

COMPORTAMIENTO TERMICO DE UNA SUSTANCIA DE CAMBIO DE FASE CON CONDICION DE TEMPERATURA EN EL BORDE FIJO.

Ricardo Lozano y Angélica Boucíguez
Facultad de Ciencias Exactas. Universidad Nacional de Salta
Av. Bolivia 5150 – Salta
Tel: 0387 – 4255424 Fax: 0387 – 4255889
Email: lozanor@unsa.edu.ar, bouciga@unsa.edu.ar

RESUMEN: En este trabajo se analiza el comportamiento térmico de una sustancia de cambio de fase cuando la temperatura externa varía alrededor de un valor dado. Se realiza una simulación numérica utilizando un algoritmo sumamente preciso para el cálculo, que permite evaluar la distribución de temperatura en la fase sólida y la posición de la interfase. Dadas las condiciones del problema, este algoritmo puede utilizarse para el cálculo de diversas sustancias sometidas a cambios en sus condiciones externas.

Palabras claves: cambio de fase, interfase, simulación numérica, temperaturas, problema de Stefan.

INTRODUCCION

En la actualidad, los modelos de simulación numérica constituyen una herramienta sumamente útil para determinar la factibilidad de los procesos físicos, técnicos e industriales. En particular, cuando este estudio involucra la presencia de sustancias de cambio de fase, donde importe determinar con buena precisión la posición de la interfase y la distribución de temperatura en el interior de la misma, se requiere que la herramienta de cálculo sea tan precisa como efectiva, dado que el problema solo tiene solución analítica en situaciones muy particulares, las que en general, no se presentan en la práctica. Por esto, el desarrollo de modelos de cálculo es de fundamental importancia, así como su validación con los resultados analíticos conocidos.

Cuando se tiene una sustancia de cambio de fase, que se encuentra inicialmente a la temperatura de fusión, el problema se conoce como de Stefan a una fase. (Alexiades y Solomon, 1993) Para describirlo completamente son necesarias la ecuación de difusión y la que expresa el balance de energía en la interfase, sujetas a las condiciones iniciales y de borde de cada problema particular.

En trabajos anteriores se han estudiado distintos modelos de simulación numérica, que presentan ventajas y desventajas a la hora de realizar el cálculo y de presentar los resultados. (Boucíguez, 2002, Lozano, 2003) Todos ellos siguen un esquema en diferencias finitas, explícitas o implícitas, que llevan a la resolución general del problema. En este trabajo, se utiliza para la resolución del problema un esquema en diferencias finitas implícitas que sigue los pasos sugeridos propuestos por Nochetto (1984).

DESCRIPCION MATEMATICA DEL PROBLEMA

Se tiene un líquido a la temperatura de fusión T_f , que ocupa la región semiinfinita $0 < x < \infty$. El borde fijo ($x=0$), a partir del instante $t=0$, se pone en contacto directo con una fuente de calor de modo que la temperatura en este borde sea, en todo momento, una función conocida del tiempo $F(t) \leq T_f$, por lo que el líquido comienza a solidificarse.

Aparece entonces una fase sólida cuyo perfil de temperaturas $T(x,t)$ debe determinarse y una frontera que separa esta fase sólida de la líquida ya existente. La posición de la frontera, que depende del tiempo, se denota con $s(t)$ y es otra incógnita del problema. La fase sólida ocupa la región comprendida entre $x=0$ y $x=s(t)$. La fase líquida, que permanece a la temperatura de fusión, ocupa la región comprendida entre $x=s(t)$ y $x=\infty$. Si se llama $u(x,t) = T(x,t) - T_f$, a la diferencia entre la temperatura del sólido y la de fusión, las ecuaciones que describen el problema son:

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

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

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

$$u(0, t) = f(t), \quad \forall t > 0 \quad (4)$$

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

$$u(x, 0) = 0, \quad 0 < x \leq \infty \quad (6)$$

con $f(t) = F(t) - T_f \leq 0$, siendo $\alpha = k/(\rho c)$ la difusividad térmica de la fase sólida de la sustancia de cambio de fase, L la entalpía de fusión, k la conductividad térmica, ρ la densidad y c el calor específico de la fase sólida.

Este problema, conocido como de Stefan a una fase, es no lineal y tiene solución exacta solo para determinadas condiciones iniciales y de contorno, cuya resolución analítica se obtiene utilizando el método de la variable de semejanza (Alexiades y Solomon, 1993). Este método de semejanza, no puede aplicarse entre otros casos, para dominios finitos o cuando la temperatura en el borde fijo no es constante.

Por esto, resulta de gran interés el desarrollo de métodos numéricos, los que deberán ser refrendados por comparación con los resultados de la solución analítica, cuando las condiciones iniciales y de borde impuestas sean las que permiten obtener tal solución.

DISCRETIZACION DEL PROBLEMA Y FORMULACION DEL ALGORITMO DE CALCULO.

La ecuación (3), llamada ecuación de Stefan, que resulta del balance de energía en la interfase, es equivalente a la siguiente condición integral:

$$\frac{s^2(t)}{2} = -\frac{k}{\rho L} \int_0^t f(v) dv + \frac{c}{L} \int_0^{s(t)} z \cdot u(z, t) dz \quad (7)$$

Esta ecuación se discretiza mediante el método de diferencias finitas implícitas de la siguiente forma:

- El espacio $x_i = ih$, siendo i el índice de la variable x y h el intervalo espacial fijo.
- El tiempo $t_j = j\tau$, siendo j el índice de la variable t y τ el intervalo temporal fijo.
- El campo térmico $u(i, j) = u(x_i, t_j)$
- La posición de la frontera libre $s(j) = s(t_j)$

El cociente incremental relativo a la derivada segunda, aproxima esta derivada por la relación:

$$\frac{\partial^2 u(i, j)}{\partial x^2} = \frac{1}{h^2} [u(i-1, j) + u(i+1, j) - 2u(i, j)] \quad (8)$$

llamando $N(j)$ a la parte entera de $(s(j)/h)$, el problema consiste en hallar las $N(j)+1$ temperaturas $u(i, j+1)$ en el instante $(j+1)\tau$ y la posición de la frontera libre $s(j+1)$ en ese mismo instante, para $1 \leq i \leq [N(j) - 1]$, tales que:

$$\frac{(u(i, j+1) - u(i, j))}{\tau} = \frac{\alpha}{h^2} [u(i-1, j+1) + u(i+1, j+1) - 2u(i, j+1)] \quad (9)$$

En tanto que cerca de la frontera resulta:

$$\frac{u[N(j), j+1] - u[N(j), j]}{\tau} = \left(\frac{2\alpha}{h} \right) \left(\frac{u[N(j)-1, j+1]}{s(j+1) - (N(j)-1)h} - \frac{u[N(j), j+1]}{s(j+1) - N(j)h} \right) \quad (10)$$

En el borde fijo se tiene:

$$u(0, j+1) = f(j+1) \quad (11)$$

La ecuación (7) para la interfase se expresa en la siguiente forma:

$$s(j+1) = \left\{ 2 \left[\frac{-k}{\rho L} \cdot \Lambda(j+1) + \sum_{i=1}^{N(j)-1} \left(u(i, j+1) i h^2 + 0.5(s(j+1) - (N(j)-1)h) - (N(j)-1)h \cdot u(N(j), j+1) N(j)h \right) \right] \right\}^{1/2} \quad (12)$$

donde $\Lambda(t) = \int_0^t f(v)dv$, puede ser discretizado de ser necesario.

Las ecuaciones (9) a (12) inducen un proceso iterativo que consiste en resolver el problema (9) – (11) a partir de un valor supuesto para $s(j+1)$ y recalculando $s(j+1)$ de (12), recomenzando el proceso con este nuevo valor de $s(j+1)$. La malla se modifica agregando un nodo si se verifica que $(N(j)+1)h < s(j+1)$. Este algoritmo sigue los pasos planteados por Nochetto (1984), el esquema se basa en la ecuación (7) que implica cierta regularidad en $s(t)$, en particular que sea creciente, situación que se verifica en la mayoría de los problemas de frontera libre y en especial en este caso.

El programa de computación para el algoritmo, los resultados numéricos y gráficos se han realizado utilizando el lenguaje *Mathematica*. La versión utilizada es la 4.0.1.0 para Windows. (Wolfram, 1999)

RESULTADOS OBTENIDOS

Comparación de los resultados del modelo numérico con los de la solución exacta

La solución exacta del problema de Stefan a una fase, cuando la temperatura T_0 en el borde fijo es constante, llamada solución de Lamé - Clapeyron, está dada por:

$$s(t) = 2\lambda\sqrt{\alpha t} \quad (13)$$

donde λ es la solución única de la ecuación:

$$\lambda \cdot \exp(\lambda^2) \cdot \operatorname{erf}(\lambda) = \frac{Ste}{\sqrt{\pi}} \quad (14)$$

siendo $\operatorname{erf}(\lambda)$ la función error.

En la figura 1 se presenta la comparación entre la solución exacta y los resultados de la simulación numérica obtenidos mediante el esquema presentado, para la posición de la frontera libre en función del tiempo, cuando la temperatura en el borde fijo es de 10 C, con $\tau = 1260 \text{ seg}$ y $h = 0.004 \text{ m}$. La solución exacta está dada por la línea fina, mientras que la línea gruesa, está formada por los todos los puntos del cálculo, la superposición de ambas demuestra la bondad del modelo. La línea correspondiente a la solución exacta se ha extendido a los efectos de que pudiera ser identificada claramente. Con 162 pasos temporales del programa, lo que equivale a 57.05 horas, la frontera libre llegó a 0.12 metros.

La sustancia utilizada para el cálculo es el estearato de butilo, cuyas propiedades son: $k=0.24 \text{ W/m C}$, $\rho=800 \text{ kg/m}^3$, $c=1600 \text{ J/kg C}$, $L=120000 \text{ J/kg}$, $T_f=25\text{C}$. (Swen,1964)

En la figura 2 se presenta la comparación entre la solución exacta y los resultados de la simulación numérica obtenidos mediante el esquema presentado, en el tiempo final, es decir, al cabo de 57,05 horas. La línea llena corresponde a la solución exacta y los puntos a los resultados de la simulación numérica.

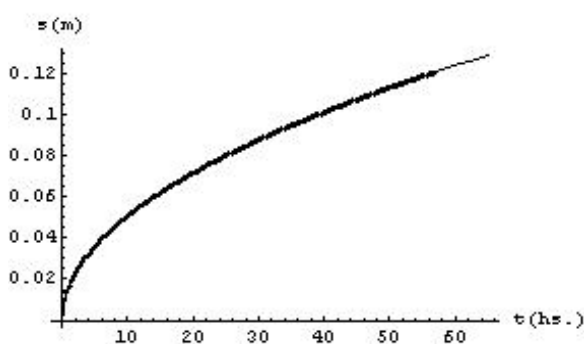


Figura 1: Comparación de las posiciones de la frontera libre

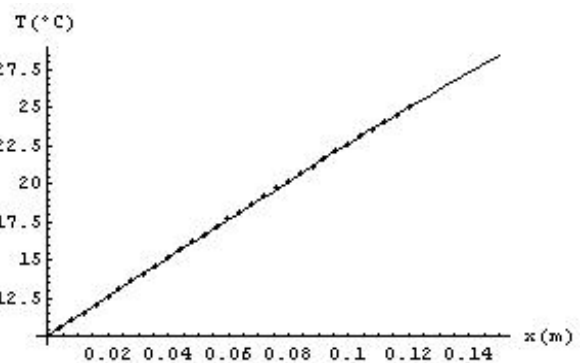


Figura 2: Comparación de las temperaturas a las 57.05 hs.

En ambas figuras, se observa una superposición entre los resultados de la solución exacta y los evaluados mediante la simulación numérica presentada, con lo que el modelo de simulación queda validado

Aplicación del modelo de cálculo a situaciones concretas.

En razón de la confiabilidad del modelo de cálculo presentado, se ha evaluado el caso en que la temperatura en el borde fijo es una función del tiempo, para dos situaciones particulares:

- Con el registro de temperatura de un día en la ciudad de Salta
- Con una función seno

En el primer caso a los efectos de poder llevar a cabo la simulación numérica, los datos provenientes del registro fueron ajustados con un polinomio de grado siete. En la figura 3 se muestran los datos horarios (puntos) y el polinomio de ajuste (línea continua). La temperatura media de este día es de 10 C, temperatura esta elegida como la temperatura constante utilizada para realizar la comparación con la solución exacta.

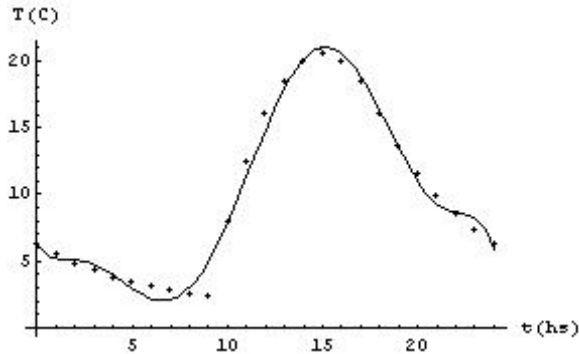


Figura 3: Datos registrados cada hora y ajuste con polinomio.

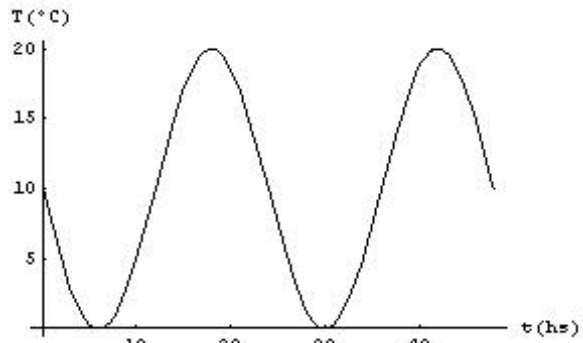


Figura 4: Temperatura variando según una función seno.

En el segundo caso se tomó la función seno, que oscilara alrededor de los 10 C, con una amplitud también de 10 C con lo que su promedio coincide con este valor. Dicha función se ha representado en la figura 4 para un tiempo total de 2 días.

La posición de la frontera se encuentra acotada entre los valores que han sido encontrados por Sherman (1971), estas cotas están dadas por:

$$\left[\left(1 + \frac{c}{L} \|f(t)\| \right)^{-1} \frac{2k}{\rho L} \int_0^t f(z) dz \right]^{1/2} \leq s(t) \leq \left[\frac{2k}{\rho L} \int_0^t f(z) dz \right]^{1/2} \quad (15)$$

Donde la $\|f(t)\|$, es la norma del máximo de la función $f(t)$

Como la integral que aparece en ambas cotas es el área encerrada por la temperatura al tiempo t , su valor puede obtenerse fácilmente cuando la temperatura es constante. Este valor es el mismo para cualquier función que encierre la misma área, en el mismo tiempo, como ocurre en este caso. Además, en los casos representados en las figuras 3 y 4 el valor máximo de la función $f(t)$ es 22,8 y 25 C, respectivamente, por lo que la cota inferior varía ligeramente entre ellas y es de esperar que ambas fronteras se encuentren muy próximas entre sí. En los casos estudiados, al cabo de 24 horas, la cota superior es de 0,0805 m, mientras que la inferior es de 0,0705 m para el ajuste polinomial y de 0,0697 m para la función seno.

En la figura 5 y 6 se muestran, respectivamente, los resultados obtenidos de la simulación numérica para el caso de la temperatura medida, la que como se ha dicho, se ha ajustado con un polinomio y para la función seno. Al cabo de 24 horas, las posiciones de las fronteras son: 77,52 mm y 77,57 mm respectivamente.

En la figura 5 (polinomio) se observa que las posiciones de la frontera libre son: 0,045m (6 hs); 0,063m (12 hs); 0,069m (18 hs) y 0,077 m (24 hs). En la figura 6 (seno) las posiciones de la frontera libre son: 0,037m (6 hs); 0,055m (12 hs); 0,068m (18 hs) y 0,077m (24 hs) Estas posiciones están comprendidas en los límites dados por la ecuación (15)

En las figuras 7 y 8 se muestran, respectivamente, el perfil de temperaturas en el interior de la sustancia para el caso del ajuste polinomial y para la función seno, para 6, 12, 18 y 24 horas. En ellas se observa que en todas las curvas la temperatura final es la de fusión, mientras que la inicial es la correspondiente a la condición de borde en el tiempo graficado, con lo que la pendiente de cada una de ellas es distinta.

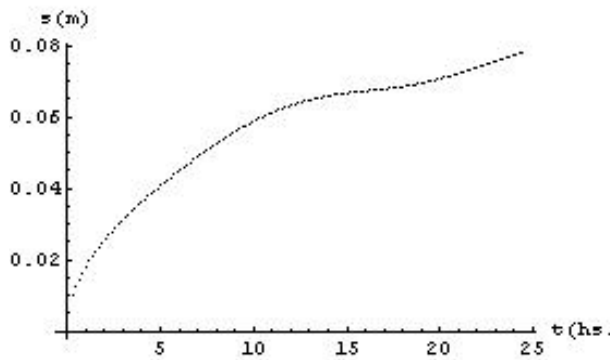


Figura 5: Posición de la frontera libre para el polinomio.

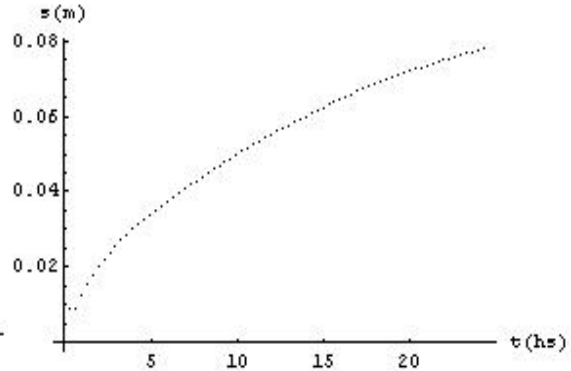


Figura 6: Posición de la frontera libre para la función seno.

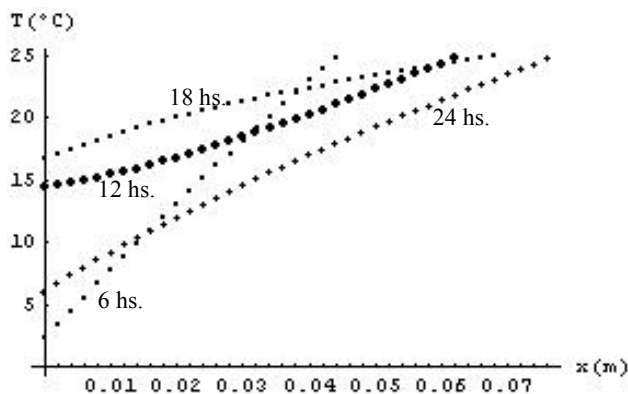


Figura 7: Temperaturas para el polinomio

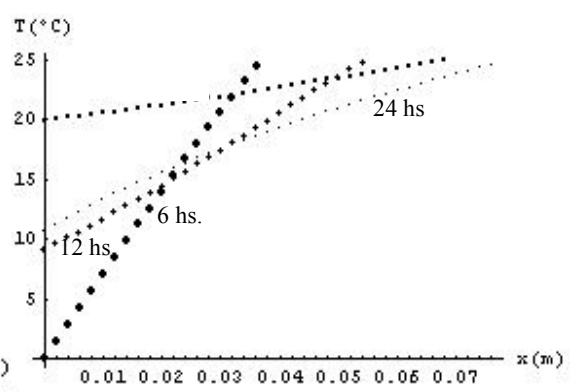


Figura 8: Temperaturas para el seno

CONCLUSIONES

El modelo de simulación numérica presentado es muy bueno, tal como puede verse de la comparación de sus resultados con los correspondientes a la solución exacta, la precisión lograda es óptima. El lenguaje de programación utilizado permite la realización del cálculo y la inmediata visualización de los resultados en forma gráfica, lo cual resulta muy útil para seguir el desarrollo de la simulación numérica. La aplicación de este modelo de cálculo a otras situaciones resulta inmediata y sus resultados muy confiables.

De los resultados obtenidos para los casos en que la temperatura externa es una función del tiempo, se observa que ellos se encuentran dentro de los límites previstos por la teoría. Se observa también que los mismos están próximos al valor correspondiente a la temperatura constante, lo que puede explicarse teniendo en cuenta que la solución exacta debe encontrarse también dentro de los valores establecidos por Sherman, y que ambas cotas están próximas entre sí.

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo fue realizado en el marco del Proyecto de Investigación N° 1264 del CIUNSA.

REFERENCIAS

- Alexiades, V. y Solomon, A. *Mathematical Modeling of Melting and Freezing Processes*. Hemisphere Publishing Corporation, 1993
- Boucíguez, A; Medina, M; Villa, L; González, J y Lara, M. *Comportamiento de Métodos Numéricos en la Solución del Problema de Stefan*. Revista Energías Renovables y Medio Ambiente, 2002, Vol. 11, pág. 41 – 46.

- Lozano, R. Boucíguez, A. Hoyos, E. González, J. Ovejero, M y Villa, L. *Métodos Numéricos para la Resolución del Problema de Stefan con Condición de Flujo de Calor en el Borde Fijo*. Avances en Energías Renovables y Medio Ambiente, 2003, Vol. 7, pág. 08.05 – 08.06.
- Nochetto, R. *Una Introducción General a la Resolución Numérica del Problema de Stefan Unidimensional*. Cuadernos del Instituto de Matemática "Beppo Levi". Universidad Nacional de Rosario, 1984 pp.143 -166.
- 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, 1971, pp. 449 – 466.
- Swern, D. *Bayley's Industrial Oil and Fat Products*, 1964 Chapter 3, pp. 97 - 139.
- Wolfram, S. *The Mathematica ® Book*. Wolfram Medio, Cambridge University Press. 4th Edition, 1999.

PHASE CHANGE MATERIAL THERMAL BEHAVIOR WITH TEMPERATURE CONDITION IN THE FIXED BOUNDARY

ABSTRAC: The thermal performance of a phase change material when the external temperature oscillates around a fixed value is presented here. A numerical simulation of that performance, using a very precise algorithm is presented. The temperature distribution in the solid phase and the interface position have been studied. The simulation model can be used to study the performance of other substances by changes in the external conditions.

Key words: phase change, interface position, numerical simulation, temperatures, Stefan problem.