

ANÁLISIS DE SUSTANCIAS DE CAMBIO DE FASE CON FRENTE DE FUSIÓN INICIAL Y FLUJO CONVECTIVO

Ricardo Lozano^a Angélica Boucíguez^a María del S. Vilte^a y Luis T. Villa^b

^aFacultad de Ciencias Exactas. Universidad Nacional de Salta. Av. Bolivia 5150 – Salta, Argentina.
Tel 0387 –4255424. e-mail: lozanor@unsa.edu.ar; bouciga@unsa.edu.ar; mvilte88@gmail.com

^bFacultad de Ingeniería. Universidad Nacional de Salta. Av. Bolivia 5150 – Salta, Argentina.
Tel 0387 –4255424. e-mail: villal@unsa.edu.ar.

Palabras claves: cambio de fase, frente de fusión inicial, flujo convectivo, interfase.

Resumen: Se presenta el estudio del comportamiento de una sustancia de cambio de fase, en un medio semi infinito, con un frente de fusión inicial. El borde fijo, se encuentra expuesto a un flujo convectivo, por contacto con el medio circundante; el que inducirá el movimiento del frente de fusión inicial, produciendo un corrimiento del mismo hacia el extremo opuesto al que recibe el calor, cuya velocidad depende de dicho flujo. Se ha considerado que el perfil térmico inicial es lineal, mientras que el resto de la sustancia se encuentra sólida a la temperatura de fusión. Tal situación se corresponde con un problema de Stefan, en el que debe evaluarse simultáneamente el gradiente de temperatura en la fase líquida y el avance del frente de fusión. La temperatura de la sustancia en el borde expuesto se encuentra inicialmente en 20°C, mientras que la del ambiente se mantiene fija, analizándose los casos en que ésta sea mayor o menor que la inicial en el borde expuesto. Los resultados muestran las diferencias existentes, ante el mismo salto térmico entre el medio y la temperatura en el borde fijo, cuando ésta última es menor o mayor que la del medio. Se realiza una comparación cuando no existe tal frente de fusión y la sustancia es sometida a las mismas condiciones externas.

1 INTRODUCCION

El comportamiento de sustancias que presentan cambio de fase sólido – líquido, con miras a ser utilizadas en el acondicionamiento térmico de locales destinados a diversos usos, ha sido planteado por varios autores. (Grodzka, 1980; Hamdan y Elwerr, 1996; Bouciguez y Lara, 2009; Farid et al, 2004) En tales situaciones, por lo general, la sustancia se encuentra totalmente sólida al inicio del proceso. En este trabajo, se ha estudiado el caso en que, la misma exhibe un frente de fusión inicial y por ende, una distribución inicial de temperaturas en el líquido originalmente presente, exponiéndosela a un flujo convectivo, por contacto con el ambiente externo.

Dicha distribución se ha considerado tal que, en el líquido inicialmente presente, la temperatura varía linealmente de 20 °C en el borde expuesto, a 0 °C en la interfase, la que se encuentra a 100 mm de dicho borde. El resto de la sustancia se encuentra sólida a la temperatura de fusión. Tal distribución inicial de temperatura, puede deberse al hecho de que luego de ser sometido el material de cambio de fase, a un proceso de calentamiento y posterior enfriamiento, no ha llegado a solidificarse por completo, existiendo por tanto una distribución inicial de temperatura.

Las sustancias de cambio de fase deben ser químicamente estables, no ser tóxicas, ni corrosivas, ni inflamables. Al ser utilizadas con fines térmicos, es deseable que tengan un calor específico y latente de fusión altos, para aprovechar la transferencia de calor tanto en forma sensible como latente. Por otra parte, los volúmenes específicos de líquido y sólido deben ser similares a fin de no tener problemas con el envasado de los recipiente que las contengan; condición que normalmente se cumple.

En general, las sustancias orgánicas, especialmente las grasas de origen animal o vegetal, reúnen estas características; además no presentan problemas de sub-enfriamiento y soportan, sin alteraciones significativas en sus propiedades térmicas, sucesivos ciclos de fusión – solidificación. (Hasan y Saying, 1994; Sari y Kaygusuz, 2001; Tunçbilek et al., 2005)

En la Figura 1 se presenta un esquema de la distribución inicial mencionada; en ella se ha representado con x , la dirección en que el flujo de calor se propaga. Así, $x=0$, representa el borde fijo; $s(t)$, la interfase, función del tiempo, por ello $x=s(0)=b$, representa su posición inicial, siendo $b=100\text{mm}$. El material se considera semi infinito.

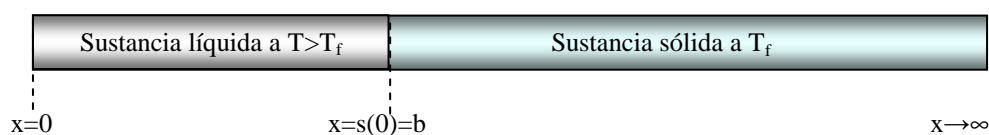


Figura 1: Esquema de la posición inicial del sólido y la posición de la interfase.

Conocida la distribución inicial, se analiza el comportamiento de la sustancia cuando se encuentra sometida a un flujo de calor de tipo convectivo, por contacto con el ambiente en el que se encuentra.

Se ha considerado que la temperatura del ambiente es igual (que corresponde a un flujo inicial nulo), mayor y menor a la existente originariamente en el borde fijo.

En tales condiciones, la sustancia comienza paulatinamente el proceso de fusión, generando el corrimiento de la interfase y la presencia de una mayor cantidad de líquido. La posición de dicha interfase, desconocida a priori, debe determinarse conjuntamente con la temperatura en el líquido; mientras que el sólido existente permanece a la temperatura de

fusión. Este problema se denomina de Stefan a una fase (Alexiades y Solomon, 1993), por el hecho de que solo debe determinarse la temperatura en una de las dos fases físicamente presentes: la líquida.

Por tratarse de un problema a una fase, mientras exista sustancia sólida, puede estudiarse el comportamiento de la sustancia como si el problema fuera semi infinito, razón por la cual, se lo ha considerado así.

A fin de simplificar los cálculos, se ha tomado la temperatura de fusión en 0°C, por tanto, los valores obtenidos, corresponden al valor en que se ha elevado la temperatura por encima de la de fusión.

Para los flujos de calor considerados, el frente de fusión se desplaza sin deformación, por lo que el problema puede resolverse en forma unidimensional, considerando que la transferencia de calor dentro del material es solo conductiva (Alexiades y Solomon, 1993; Zerroukat y Chatwin, 1994; Lock, 1996; Hamdan y Al-Hinti, 2004)

2 FORMULACION MATEMATICA DEL PROBLEMA Y MODELO DE CALCULO

El problema numérico a resolver resulta completamente descrito por la ecuación de difusión del calor en la fase líquida, el balance de energía en la interfase, denominada ecuación de Stefan y las correspondientes condiciones iniciales y de borde. (Alexiades y Solomon, 1993) Se ha considerado que la sustancia se encuentra expuesta a un flujo de calor, debido al contacto con el aire externo circundante, el que se encuentra entre 30 y 10°C, estudiándose para diferentes temperaturas en este rango.

Se designa con $u(x,t)$ la temperatura, función de la posición x y el tiempo t , en el interior de la sustancia, con u_∞ (la que se considera constante) la temperatura del aire circundante y con h el coeficiente convectivo entre el aire y la pared del material de cambio de fase; con $s(t)$ la posición de la interfase como función del tiempo, la que en $t=0$ se encuentra en $x=s(0)=b=100\text{mm}$. Los parámetros físicos del material de cambio de fase son: ρ la densidad, k la conductividad térmica, c el calor específico, L el calor latente de fusión y $\alpha=k/(\rho c)$ la difusividad térmica. El problema resulta descrito por las ecuaciones (1) a (6), siendo τ el tiempo total de cálculo.

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

$$\rho L \frac{ds(t)}{dt} = -k \frac{\partial u(x=s(t)^-)}{\partial x} \quad 0 < t < \tau \quad (2)$$

$$u(s(t), t) = 0 \quad 0 < t < \tau \quad (3)$$

$$u(x, 0) = \begin{cases} -0.2x + 20 & 0 \leq x \leq b \\ 0 & x > b \end{cases} \quad \begin{matrix} \text{con } x \text{ en m y} \\ u \text{ en } ^\circ\text{C} \end{matrix} \quad (4)$$

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

$$h(u_\infty - u(0, t)) = -k \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \Big|_{x=0} \quad 0 < t < \tau \quad (6)$$

La ecuación (1) es la de difusión en el líquido, que determina la distribución de temperatura en él. El sólido se mantiene a la temperatura de fusión por lo que no es necesario establecer ecuación alguna en tal región. La ecuación (2) es la de Stefan, que da el balance de energía en la interfase. Las ecuaciones (3) - (6) son las condiciones iniciales y de borde.

El problema no tiene solución analítica por lo que sólo puede resolverse numéricamente. Para ello se ha estructurado un programa de computación en lenguaje *Mathematica*, utilizando diferencias finitas implícitas, que calcula para cada paso temporal, la posición de la interfase y la distribución de temperaturas en el interior de la sustancia.

El esquema de resolución numérica se ajusta al presentado por [Nochetto \(1984\)](#), el mismo requiere cierta regularidad en la frontera $s(t)$, en particular que sea siempre creciente, situación que se cumple en la mayor parte de los problemas de frontera libre y en éste en particular.

La ecuación (2), que da el balance de energía en la interfase, es equivalente a la condición integral, dada por la ecuación (7)

$$s(t) = b + \frac{c}{L} \int_0^b u(x,0) dx + \frac{1}{\rho L} \int_0^t h \cdot [u(0,t') - u_\infty] dt' - \frac{c}{L} \int_0^{s(t)} u(x,t) dx \quad (7)$$

Para los nodos de la grilla espacio - tiempo se adopta la siguiente notación:

- Coordenada espacio/tiempo $\equiv (x,t) \equiv (i dx, j dt)$, señalada con (i,j)

donde i y j son números enteros, mayores o iguales a cero, dx es el paso espacial fijo y dt el paso temporal fijo

- Temperatura en $(x,t) \equiv u(x,t) \equiv u(i dx, j dt)$ señalada con $u(i,j)$
- Posición de la frontera libre $s(t) \equiv s(j dt)$ señalada con $s(j)$

La ecuación (1) se aproxima por diferencias implícitas progresivas para el tiempo y centradas en el espacio.

Llamando $N(j)$ a la parte entera de $[s(j)/dx]$, el problema consiste en hallar las $N(j)+1$ temperaturas $u(i,j+1)$ con $i = 0, 1, \dots, N(j)$ y la posición de la frontera libre $s(j+1)$ en el instante $(j+1)dt$, tales que, se verifique la ecuación (8), para puntos en el interior de la masa del líquido, mientras que en la proximidad de la frontera resulta aplicable la ecuación (9)

$$\frac{u(i, j+1) - u(i, j)}{dt} = \frac{\alpha}{(dx)^2} [u(i-1, j+1) + u(i+1, j+1) - 2u(i, j+1)] \quad (8)$$

$$\frac{u[N(j), j+1] - u[N(j), j]}{dt} = \left(\frac{2\alpha}{dx} \right) \cdot \left(\frac{u[N(j)-1, j+1]}{s(j+1) - (N(j)-1)dx} - \frac{u[N(j), j+1]}{s(j+1) - N(j)dx} \right) \quad (9)$$

La condición en el borde fijo, dada por la ecuación (6) al ser discretizada queda expresada por la ecuación (10)

$$\frac{k}{dx} [u(1, j+1) - u(0, j+1)] = -h[u_\infty - u(0, j+1)] \quad (10)$$

La ecuación (7) para la interfase, al ser discretizada se expresa por la ecuación (11)

$$s(j+1) = b + \frac{c}{L} dx \left[\sum_{i=0}^b u(i,0) + \sum_{i=1}^{N(j)} u(i, j+1) \right] + \frac{h}{\rho L} dt \left[u_\infty \cdot (j+1) - \sum_{k=0}^{j+1} u_0(0, k) \right] \quad (11)$$

Las ecuaciones (8) a (11) conducen a un proceso iterativo que resuelve el problema (8) – (10) a partir de un valor dado para $s(j+1)$ para luego recalcularse $s(j+1)$ de (11), reiniciando el proceso con el nuevo valor de $s(j+1)$, hasta que su valor no cambie. La grilla se modifica agregando un nodo si se verifica que $(N(j)+1) dx < s(j+1)$. El intervalo temporal considerado para el cálculo es $dt=900\text{seg}$, mientras que el espacial es $dx=1\text{mm}$.

En el caso en que no exista tal frente de fusión inicial resulta $b=0$, siendo las ecuaciones idénticas a las presentadas.

A los efectos del cálculo se han tomado los valores de las propiedades térmicas, de grasas orgánicas monosaturadas comerciales, de fácil adquisición en el mercado local, medidas en laboratorio: $\rho=914.5 \text{ kg/m}^3$; $k=0.76 \text{ W/m}^2 \text{ K}$; $L=140\text{kJ/kg}$ y $c=6950 \text{ J/Kg K}$. El valor de b se ha tomado en 100mm .

Para evaluar el coeficiente convectivo entre la pared expuesta al ambiente y éste, se ha utilizado la Versión 1.1a del programa Heat Transfer (Young y Mills, 1995), que permite obtener rápidamente el coeficiente convectivo h , considerando las temperaturas y el fluido que lo origina, obteniéndose los siguientes valores: 2.41, 2.28, 2.16, 2.03, 1.92 y $1.62 \text{ W/m}^2\text{C}$, cuando la diferencia de temperatura entre la pared y el ambiente es de 10, 8, 6, 5, 4 y 2 C , respectivamente; tales coeficientes se han considerado constantes para cada caso durante todo el cálculo.

3 RESULTADOS OBTENIDOS.

Los resultados obtenidos, se presentan en las Figuras 2 a 9, en ellas se presenta la posición de la frontera y las temperaturas alcanzadas por la sustancia de cambio de fase.

La Figura 2 muestra la evolución temporal de la interfase, para los casos representativos del problema planteado.

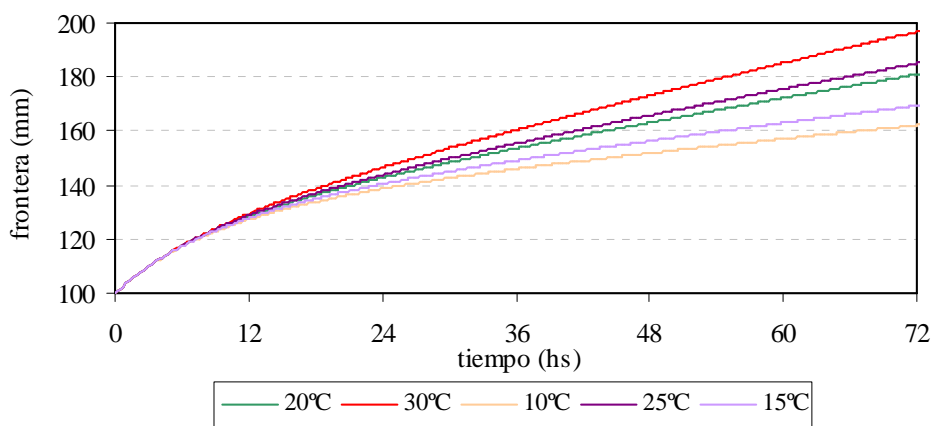


Figura 2: Posición de la interfase, cuando $T_{amb}=20, 30, 10, 25$ y 15C .

En la Figura 3 se presentan las temperaturas en el borde expuesto al ambiente en función del tiempo, cuando la temperatura ambiente es 20, 30, 10, 25 y 15C .

En la Figura 4 se presentan las temperaturas en la posición original de la interfase ($b=100\text{mm}$) en función del tiempo, cuando la temperatura ambiente es 20, 30, 10, 25 y 15C .

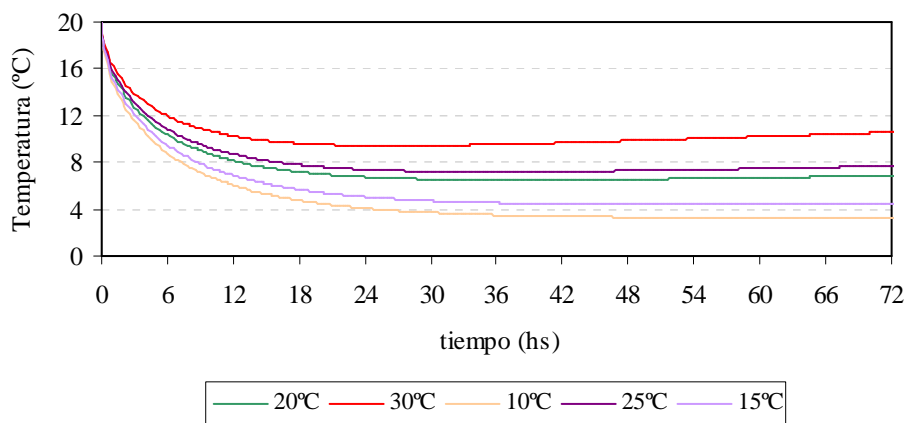


Figura 3: Evolución temporal de la temperatura en el borde fijo, cuando $T_{amb}=20, 30, 10, 25$ y 15°C .

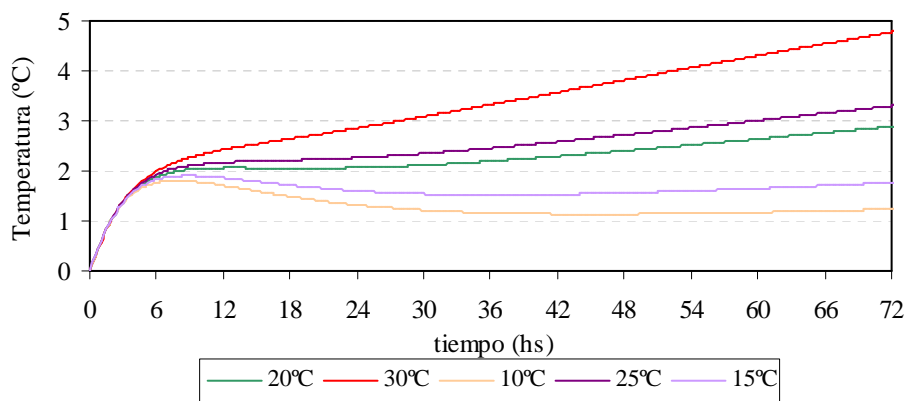


Figura 4: Evolución temporal de la temperatura en $b=100\text{mm}$, cuando $T_{amb}=20, 30, 10, 25$ y 15°C .

En las Figuras 5 y 6, se muestra la distribución de temperatura en función de la posición, al cabo de 24 y 48 horas, de iniciado el proceso, cuando la ambiente es 30, 25, 20, 15 y 10°C .

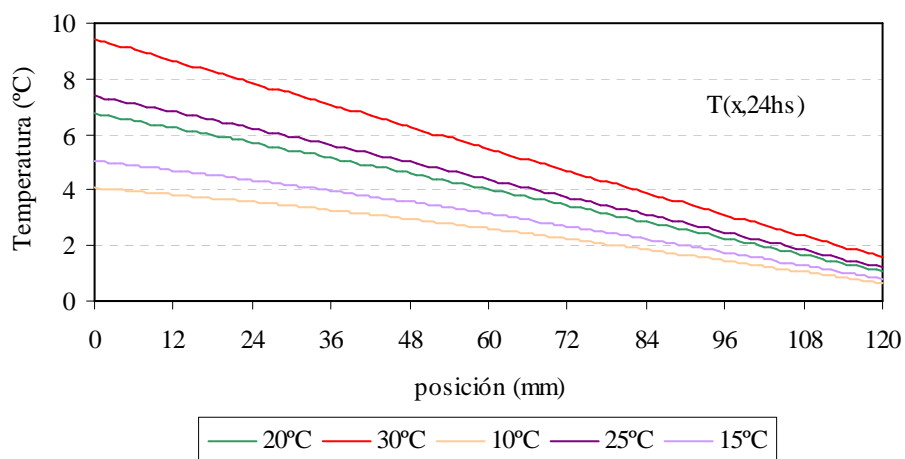


Figura 5: Temperaturas en función de la posición, luego de 24 hs, cuando $T_{amb}=30, 25, 20, 15$ y 10°C

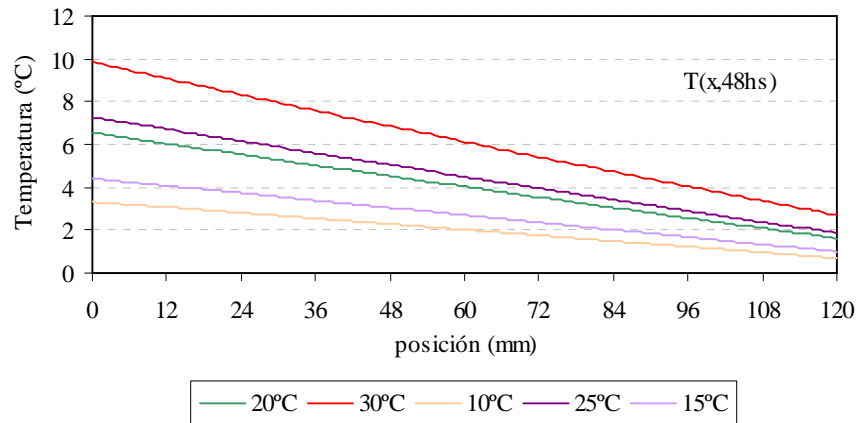


Figura 6: Temperaturas en función de la posición, luego de 48hs, cuando $T_{amb}=30, 25, 20, 15$ y 10°C

En la **Figura 7** se muestra la posición de la frontera, cuando no existe tal frente de fusión inicial ($b=0$).

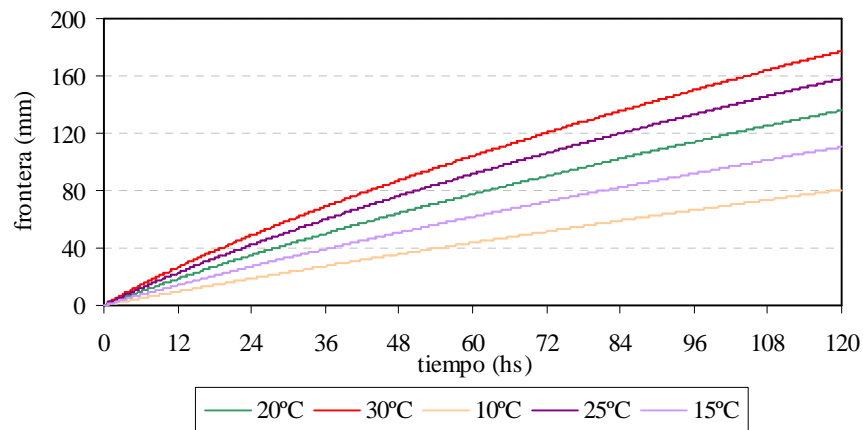


Figura 7: Posición de la interfase, sin frente de fusión inicial, cuando $T_{amb}=20, 30, 10, 25$ y 15°C .

En las **Figura 8** y **9** se presentan las temperaturas alcanzadas por la sustancia de cambio de fase, en $x=0$ y $x=b$, respectivamente, cuando no existe frente de fusión inicial.

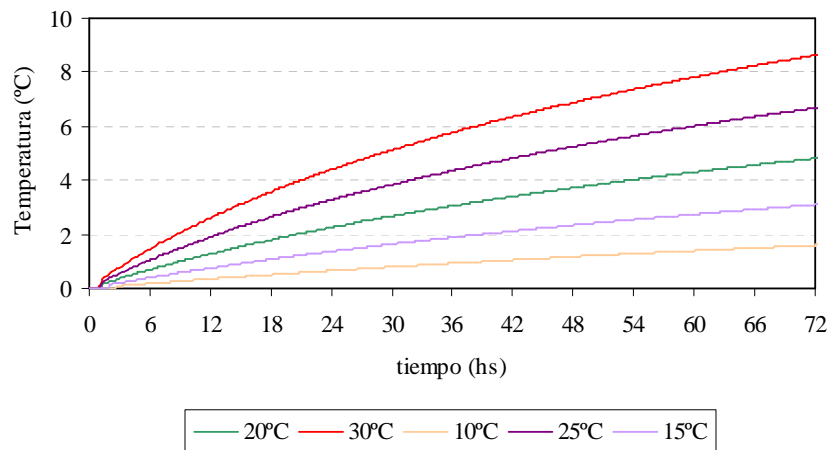


Figura 8: Temperatura vs tiempo, en $x=0$, sin frente de fusión inicial, para $T_{amb}=20, 30, 10, 25$ y 15°C .

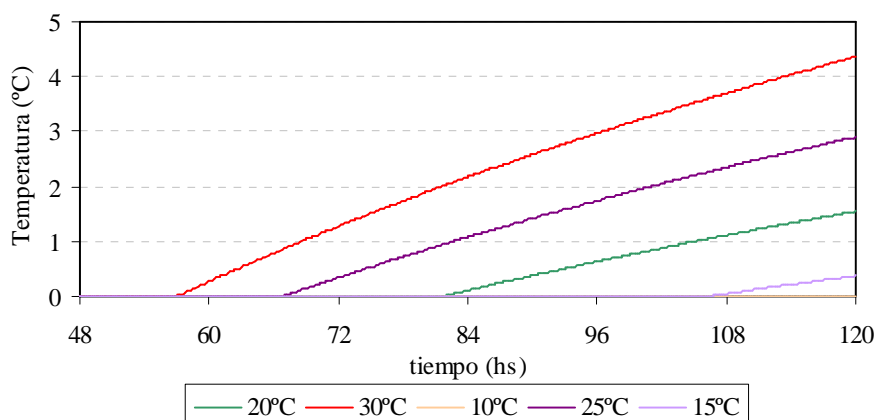


Figura 9: Temperatura vs tiempo, en $x=b$, sin frente de fusión inicial, para $T_{amb}=20, 30, 10, 25$ y 15°C .

En la Figura 9, no se aprecia el valor correspondiente a $T_{amb}=10^{\circ}\text{C}$, debido a que para este valor, la sustancia se encuentra sólida al cabo de las 120 hs graficadas. Esto concuerda con lo mostrado en la Figura 7, donde se observa que al cabo del mismo tiempo la frontera se encuentra en los 80 mm para dicha temperatura ambiente.

4 ANALISIS DE RESULTADOS.

En virtud de los resultados obtenidos se observa que, cuando existe frente de fusión inicial, la razón de avance de la frontera es similar, para todos los casos estudiados durante las primeras 10 hs, comenzando a evidenciarse diferencias a partir de este tiempo.

Cuando la temperatura ambiente es mayor a 20°C , la interfase prácticamente duplica su valor inicial luego de las 72 hs de iniciado el proceso. Cuando la temperatura ambiente es menor a 20°C , el avance es más lento; llegando al cabo de 72 hs a unos 160mm.

Cuando $T_{amb}=20^{\circ}\text{C}$, lo que equivale a un flujo inicial nulo, la posición de la frontera avanza en valores comprendidos entre las dos situaciones anteriormente planteadas. Es importante recalcar que, en este caso, si bien el flujo inicial es nulo, esto deja de ser así ni bien, cambia la temperatura en el borde fijo, donde la sustancia empieza a recibir calor del ambiente.

Se observa que en todos los casos la temperatura en el borde fijo disminuye durante cierto tiempo y luego se estabiliza en un cierto valor; siendo éste de 10, 7.2, 6.5, 4.4 y 3.3°C , cuando la temperatura ambiente es de 30, 25, 20, 15 y 10°C , respectivamente.

En la posición inicial de la frontera ($x=100\text{mm}$), las temperaturas alcanzadas por la sustancia que inicialmente se encontraba sólida en ese punto son similares para las todas las temperaturas externas consideradas hasta las 6hs [$T(b,6\text{hs})\cong 1.8^{\circ}\text{C}$]. A partir de este tiempo, cuando $T_{amb}\geq 20^{\circ}\text{C}$, la temperatura en este punto aumenta continuamente, alcanzando valores de 4.8, 3.3 y 2.8°C para $T_{amb}=30, 25$ y 20°C , respectivamente; lo que está de acuerdo con el avance sostenido de la frontera libre, producto de que la sustancia siempre recibe calor del ambiente. Cuando $T_{amb}< 20^{\circ}\text{C}$, la temperatura en $x=100\text{mm}$, presentan un máximo alrededor de las 8.5hs, para luego disminuir y estabilizarse en un determinado valor, el que es de 1.7 y 1.2°C para $T_{amb}=15$ y 10°C , alrededor de las 36 horas de iniciado el proceso; lo que está de acuerdo con la forma en que avanza la posición de la interfase.

Cuando no existe frente de fusión inicial, es decir, cuando inicialmente toda la sustancia se encuentra sólida; siempre recibe calor del medio externo, ya que la temperatura del material es

siempre menor que la su entorno. La posición de la frontera avanza en forma continua a un ritmo que depende de la temperatura externa, cuanto mayor es ésta, mayor es el avance de la interfase. Las temperaturas en el borde expuesto al ambiente ($x=0$), aumenta monótonamente, en una proporción acorde con el flujo incidente, es decir, con la temperatura externa; a consecuencia de ello, en $x=100$ mm, la fase líquida se hace presente a distintos tiempos, dependiendo de dicha temperatura; así cuando ésta es de 30 °C, existe líquido en $x=100$ mm al cabo de 57hs; mientras que es de 20°C, deben transcurrir 82hs y si ella es de 15°C, no se presenta líquido en dicho punto hasta que han transcurrido unas 107 hs.

5 CONCLUSIONES

El modelo de simulación numérica utilizado, ha sido validado en trabajos anteriores, comparando los resultados por él arrojados con los correspondientes a situaciones en que existe solución analítica, el acuerdo es óptimo, por lo que resulta confiable. El mismo, admite introducir cualquier distribución inicial de temperatura, flujo de calor y posición de la frontera; lo que permite realizar rápida y con un buen grado de precisión, el análisis de cualquier acondicionamiento térmico, debiendo darse las condiciones iniciales y de contorno, correspondientes al problema a estudiar (Lozano y Boucíguez, 2009).

Las sustancias de cambio de fase, particularmente las grasas orgánicas aquí utilizadas, presentan una interesante opción para el acondicionamiento térmico de locales destinados a diversos fines: invernaderos, secaderos, viviendas, centros sanitarios, almacenamiento de productos agrícolas, químicos y medicinales, etc., de acuerdo a cada situación particular. Por otra parte, contribuyen al ahorro de energía, ya que usualmente se emplea energía eléctrica para el mantenimiento de temperaturas de estos recintos. Su utilización podría reemplazar, total o parcialmente, a las fuentes tradicionales, haciendo que su consumo sea menor.

Los resultados obtenidos muestran que la existencia de un frente de fusión inicial produce diferencias importantes respecto a la situación en que éste no está presente.

El tiempo necesario para que se alcance la posición inicial de la interfase está directamente relacionado con el valor del flujo, dependiendo también de éste las temperaturas alcanzadas por la sustancia.

El espesor del material de cambio de fase no debe ser significativo respecto del recinto a acondicionar, no superior a 15 cm; los resultados obtenidos muestran que bajo las condiciones analizadas, estas sustancias cumplen cabalmente este requisito, al tiempo que las temperaturas en el interior de ellas no se elevan significativamente, por lo que pueden utilizarse sin inconvenientes.

6 AGRADECIMIENTOS

El presente trabajo se desarrolló en el marco del Proyecto de Investigación N° 1886 y del Trabajo de Investigación N° 1941 del Consejo de Investigaciones de la Universidad Nacional de Salta, a quien se agradece su financiamiento.

REFERENCIAS

- Alexiades, V.; Solomon, A. *Mathematical Modeling of Melting or Freezing Processes*, Hemisphere Publishing Corporation, A Member of the Taylor & Francis Group, 1993.
- Boucíguez, A.; Lara, M. Utilización de Sustancias Orgánicas en el Acondicionamiento Térmico de Recintos, *Avances en Energías Renovables y Medio Ambiente*, Vol.13: 9.01 - 9.06, 2009.

- Farid, M; Khudhair, A; Razack, S y Al-Hallaj, S. A Review on Phase Change Energy Storage: Materials y Applications *Energy Conversion and Management* N° 45: 1597-1615, 2004.
- Grodzka, F. Phase Change Storage Systems. Cap. 25. *Solar Energy Technology Handbook. Part A. Engineering Fundamentals. Edited by W. Dickinson and P. Cheremisinoff*, 1980
- Hamdan, M.; Elwerr, F. Thermal Energy Storage Using A Phase Change Material. *Solar Energy*, Vol. 56, N° 2: 183 -189, 1996.
- Hamdan, M y Al-Hinti, I. Analysis of Heat Transfer During the Melting of a Phase Change Material. *Applied Thermal Engineering*, N° 13: 1935 - 1944, 2004.
- Hasan, A y Saying, A. Some Fatty Acids as Phase Change Thermal Energy Storage Materials. *Renewable Energy*, Vol. 4, N° 1, pág. 69 -76, 1994.
- Lock, G. On the Freeze Occlusion Water, Freezing and Melting Heat *Transfer in Engineering, Hemisphere*, New York, 199 - 221, 1991.
- Lozano, R y Boucíguez, A. Análisis de Sustancias de Cambio de Fase con Frente de Fusión Inicial Sometidas a un Flujo de Calor Constante. *Mecánica Computacional. Asociación Argentina de Mecánica Computacional. Vol. XXVIII: 3079 - 3091*, 2009.
- 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, N° 11: 143 -166, 1984.
- Sari. A y Kaygusuz, K. Thermal Performance of Myristic Acid as a Phase Change Material for Energy Storage Applications. *Renewable Energy*, Vol. 24: 303 -317, 2001.
- Tunçbilek, K; Sari, A, Tarhan, S, Ergunes, G y Kaygusuz, K. Lauric and Palmitic Acids Eutectic Mixture as Latent Heat Storage Material for Low Temperature *Heating Applications Energy*, Vol. 30: 677- 692, 2005.
- Young B. y Mills A. F. *Heat Transfer*. Versión 1.1a. Universidad de California, Los Ángeles. Copyright Richard D. Irwin Inc., 1995
- Zerroukat, M y Chatwin, C. Computational Moving Boundary Problems. *John Wiley & Sons Inc.*, 1994.