Paper CIT02-0757

UNA PROPUESTA DE ACONDICIONAMIENTO TERMICO UTILIZANDO SUSTANCIAS DE CAMBIO DE FASE

Angélica Boucíguez

INENCO. Universidad Nacional de Salta. Av. Bolivia 5150. Salta, Argentina e-mail: bouciga@unsa.edu.ar

Luis Villa Saravia

INIQUI. Universidad Nacional de Salta. Av. Bolivia 5150. Salta, Argentina e-mail: villal@unsa.edu.ar

Sonia Esteban

INENCO. Universidad Nacional de Salta. Av. Bolivia 5150. Salta, Argentina e-mail: estebans@unsa.edu.ar

Miguel A. Lara

IFIR. Instituto de Física Rosario. Universidad Nacional de Rosario. Av. Pellegrini 250. Rosario, Argentina e-mail: malara@fceia.unr.edu.ar

Resumen: La utilización de sustancias de cambio de fase en acondicionamiento térmico presenta múltiples aplicaciones, especialmente cuando se trate de soportar temperaturas variables en el tiempo. Por ello, se ha pensado el estudio de sustancias de cambio de fase considerando que el lugar a acondicionar debe mantenerse a temperatura fija, igual a la de fusión de la sustancia a utilizar. Para analizar el comportamiento de la sustancia a utilizar se ha formulado un modelo del problema de Stefan a una fase para la ecuación de calor, sobre el que se presenta un análisis consistente en una predicción teórica proveyendo condiciones de existencia y unicidad de la solución y una simulación numérica en diferencias finitas que permite calcular el avance temporal del frente de fusión. Los resultados muestran que cuando la temperatura varía a lo largo del día (pero se mantiene siempre por encima o por debajo de la de fusión), la posición final de la frontera corresponde al comportamiento que se hubiese observado si la temperatura en el borde fuera la media diaria, lo que permite, simplificar el cálculo de la posición de la frontera en una primera estimación.

Palabras claves: cambio de fase, temperatura variable, acondicionamiento térmico, frente de fusión.

1. Introducción

La necesidad de buscar formas de acondicionamiento pasivo, en que el ahorro energético tenga una componente importante es de suma importancia, ya que no solo permite reducir gastos, sino también y fundamentalmente limitar el uso de los combustibles tradicionales.

La utilización de sustancias de cambio de fase en el acondicionamiento térmico, cobra entonces vital importancia dado que presenta múltiples aplicaciones, entre las que pueden mencionarse:

- El acondicionamiento térmico de edificios
- El mantenimiento de temperaturas en instalaciones agrícolas (invernaderos, secaderos, etc)
- El almacenamiento y transporte de diversos productos

En particular, se ha estudiado el uso de distintas sustancias orgánicas en muros colectores acumuladores, como parte integrante de una vivienda (Boucíguez y Saravia, 1990, Boucíguez, 1998). En cuanto a las instalaciones agrícolas, se las puede utilizar para entregar calor en forma sensible o latente y mantener así temperaturas adecuadas en el interior de invernaderos, sobre todo en las primeras horas de la madrugada en que la temperatura ambiente exterior se reduce considerablemente.

En cuanto al almacenamiento y transporte de productos, generalmente se utiliza energía convencional o bien no se utiliza ninguna, dejando en este caso al producto fuera de todo control de temperatura, lo que lleva a la pérdida de calidad y al posterior deterioro, con la consiguiente pérdida económica.

En efecto, muchos productos que se producen en una dada región del país, deben ser trasladados a otra. Generalmente esto se hace o bien en vehículos especialmente acondicionados que utilizan energía convencional o bien en transportes sin ningún tipo de acondicionamiento.

Es más, independientemente de cómo hayan llegado al lugar de distribución y venta, en el almacenamiento posterior al traslado y antes de su distribución se presentan también fallas en las condiciones de mantenimiento.

Cada producto tiene una temperatura óptima de almacenamiento. Las inferiores producen daño por frío, las superiores reducen la calidad de conservación. Las fluctuaciones causan, entre otras cosas, condensación con la consiguiente pérdida de calidad del producto.

Ante esta situación, se propone la utilización de sustancias que presenten cambio de fase en el rango requerido, según cada producto, para mantenerlo en condiciones favorables durante el almacenamiento y transporte. Se ha planteado anteriormente (Boucíguez, et al, 2001) un diseño de embalaje en el que un dado producto se mantenga en la temperatura adecuada, utilizando una sustancia que presente el cambio de fase a esta temperatura. En una primera etapa del análisis de factibilidad se ha analizado el caso en que la temperatura ambiente exterior se mantiene fija. Evidentemente esto no es siempre así, pudiendo oscilar dentro de un pequeño rango si está almacenada, o bien, con las oscilaciones de la temperatura ambiente durante el transporte.

Con el fin de analizar el comportamiento de tal embalaje, cuando la temperatura exterior varía en el tiempo, se han tomado registros de distintos días del año, para ser utilizados como datos en un modelo de cálculo que permita analizar tal situación. Para ello, se ha formulado un modelo del problema de Stefan a una fase para la ecuación unidimensional de transferencia de calor, sobre el que se presenta un análisis consistente en una predicción teórica proveyendo condiciones de existencia y unicidad de la solución y una simulación numérica utilizando diferencias finitas que permite calcular el avance del frente de fusión de la sustancia de cambio de fase en función del tiempo y estimar el tiempo que demandará este proceso.

2. Análisis del Comportamiento Dinámico de la Sustancia de Cambio de Fase

A tal fin, lo más adecuado para interpretar, entender y predecir el comportamiento del sistema físico en cuestión es postular su descripción mediante un modelo matemático conocido en la literatura como problema de Stefan.

2.1. Consideraciones básicas en el modelado

- a) Los parámetros de transferencia de calor y propiedades materiales de la sustancia bajo análisis, se suponen constantes.
- b) La fase correspondiente al estado de agregación inicial, se supone siempre a una temperatura uniforme dada por la de cambio de fase de la sustancia elegida.
- c) Se contempla una sola dirección espacial para la conducción de calor.

Notación a utilizar:

x,t Variables independientes: espacial y temporal, respectivamente.

T=T(x,t) Función incógnita que denota el perfil de temperatura de la porción de sustancia que cambió de fase.

s=s(t) Función incógnita que denota a la posición de la interfase.

 T_{f} , T_{a} Temperatura de fusión y del ambiente circundante, respectivamente.

 ρ , k Densidad y capacidad calorífica respectivamente, de la sustancia de cambio de fase

c, L Calor específico y latente, respectivamente de la sustancia de cambio de fase

 $\alpha = k/(\rho c)$ Difusividad térmica de la sustancia de cambio de fase

2.2. Formulación del modelo descriptivo

Teniendo presente los supuestos básicos consignados en (a), (b) y (c) del apartado precedente, se arriba al siguiente problema de contorno e inicial (PVCI) (conocido como el problema de Stefan) para las funciones T = T(x, t) y s = s(t), como modelo descriptivo del sistema de cambio de fase en análisis:

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

$$T(s(t),t) = T_f, \quad \forall t > 0 \tag{2}$$

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

$$T(x,0) = T_f, \quad o < x \le e \tag{4}$$

$$s(0) = 0 \tag{5}$$

$$T(0,t) = T_a(t) \qquad \forall t > 0 \tag{6}$$

La ecuación (3) expresa una relación de conservación de energía en la interfase, el signo ± corresponde a los casos en que la sustancia se encuentre inicialmente en fase liquida o sólida, respectivamente (Alexiades y Solomon, 1993).

2-3- Resultados básicos sobre la solución del modelo (1) – (6)

A los fines del análisis resulta conveniente reformular el PVCI (1) a (6) en otro PVCI equivalente. En efecto, introduciendo las nuevas funciones $V(x, \tau)$, $\sigma(\tau)$, $g(\tau)$ y τ , definidas como:

$$V(x,\tau) = \frac{c}{L} \left[T(x,t) - T_f \right] \tag{7}$$

$$g(\tau) = \frac{c}{L} f(t) = \frac{c}{L} \left[T_a(t) - T_f \right]$$
 (8)

$$\tau = \frac{k}{\rho c} t \tag{9}$$

$$\sigma(\tau) = s(\frac{t}{\alpha}) \tag{10}$$

el modelo (1) a (6) queda expresado de la siguiente forma para las funciones V y σ dadas por las Ecs. (7) a (10):

$$\frac{\partial V}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 V}{\partial x^2}, \qquad 0 < x < \sigma(\tau), \quad 0 < \tau < \alpha t_0$$

$$V(\sigma(\tau), \tau) = 0, \qquad 0 < \tau < \alpha t_0$$

$$\frac{d\sigma(\tau)}{d\tau} = -\frac{\partial V(x = \sigma(t))}{\partial x}, \quad 0 < \tau < \alpha t_0$$
 (13)

$$V(x,0) = 0, x > 0$$
 (14)

$$\sigma(0) = 0 \tag{15}$$

$$V(0,\tau) = g(\tau), \qquad 0 < \tau < \alpha t 0 \tag{16}$$

Ahora, resultados básicos sobre la solución de (1) a (6) devienen de los correspondientes a la solución de (11) a (16).

3. Existencia y Unicidad de Solución.

Una fuente de información general sobre resultados referentes al comportamiento de la solución de problemas de frontera libre, es la citada como por Tarzia (1981/82). En particular, Sherman (1971) consigna los siguientes resultados sobre existencia y unicidad de la solución de (11) a (16), bajo las siguientes hipótesis:

- 1) La función $g(t) \ge 0$, $\forall t \ge 0$, es continua excepto posiblemente en un número finito de discontinuidades acotadas.
- 2) Para cada $\varepsilon > 0$, $g \neq 0$ en $0 \le t \le \varepsilon$, se tiene que para el PVCI (11) a (16), existe una y solo una solución.

3.1 Acotaciones a priori para la posicion de la frontera libre s(t).

Sherman establece que la frontera libre $\sigma(\tau)$ debe tener cotas superior e inferior, dadas por la siguiente desigualdad:

$$\left[2(1+\|g(\tau)\|)^{-1}G(\tau)\right]^{1/2} \le \sigma(\tau) \le \left[2G(\tau)\right]^{1/2} \tag{17}$$

donde
$$G(\tau) = \int_{0}^{\tau} g(z)dz$$
 , es la primitiva de $g(\tau)$

Los datos que se posee relativos al sistema físico estudiado consisten en valores conocidos de temperatura $T_a(t)$ para un conjunto discreto de valores de tiempo. A los fines de aplicar la expresión teórica dada por la Ec. (17), que acota la posición de la frontera al caso físico concreto, se ha procedido a rescribir la expresión (17) 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 (17) en términos de s(t) resulta:

$$\left[2(1+\frac{c}{L}\|(T_a(t)-Tf)\|)^{-1}\alpha F(t)\right]^{1/2} \le s(t) \le \left[2\alpha F(t)\right]^{1/2}$$
(18)

donde
$$F(t) = \int_{0}^{t} f(z)dz$$
, es la primitiva de $f(t) = T_{a}(t) - T_{f}$

A los efectos de evaluar los datos discretos tomados de la temperatura ambiente en función del tiempo a intervalos de quince minutos se ha procedido a graficarlos y a ajustarlos con un polinomio de grado seis, con una regresión de 0.92 o mayor.

3.2 Un caso particular

Si en el modelo (1) a (6) se tiene que la temperatura de borde $T_a(t)$ es constante (tal como puede ser el caso en que este valor se toma como el promedio de $T_a(t) = T_{med}$), el modelo adimensional correspondiente (8) a (12) se puede resolver en forma analítica usando la variable de similaridad:

$$\xi = x/\sqrt{t} \,, \quad t > 0 \tag{19}$$

y consecuentemente se tiene la solución de (1) a (6), dada por:

$$T(\xi) = T_{med} - (T_{med} - T_f) \frac{\int\limits_{0}^{x/\sqrt{t}} \exp(-z^2/4) dz}{\int\limits_{0}^{s(t)/\sqrt{t}} \exp(-z^2/4) dz}$$

$$(20)$$

$$s(t) = \lambda \sqrt{t} \tag{21}$$

donde λ es una constante que resulta de encontrarse como la única raíz de la ecuación trascendente:

$$\lambda \exp(\lambda^2) erf(\lambda) = \frac{Ste}{\sqrt{\pi}}$$
 (22)

donde $S_t = c \Delta T/L$ es el número de Stefan del sistema de conducción, siendo ΔT la diferencia entre la temperatura media T_{med} y la de fusión T_f .

4. El Problema concreto abordado y el modelo de cálculo utilizado

A los efectos de evaluar la posición de la frontera y el perfil de temperaturas para el caso concreto señalado se ha trabajado con las Ec. (1) a (6), donde las condiciones de borde en temperatura $T(0,t)=T_a(t)$ fueron tomadas de registros de temperatura ambiente en la ciudad de Salta, medidos cada 15 min, en el predio de la Universidad Nacional con un sistema de adquisición de datos Omega, que puede registrar hasta seis canales.

De estos registros se han seleccionados tres días, uno de ellos en el mes de julio correspondiente a un día nuboso, con temperaturas máximas y mínimas de 7 C y - 1.6 C, respectivamente. Otro día del mes de setiembre, con registros de máxima y mínima de 20.1 C y - 2 C respectivamente y otro correspondiente al mes de octubre con temperaturas máxima 28.75 C y mínima 12.75 C. Estos registros permiten un amplio rango de variación en los cálculos.

El día seleccionado de julio, representa un día típico de gran nubosidad de la ciudad de Salta, los días elegidos en los meses de setiembre y octubre constituyen también registros de temperatura típicos para esa época del año en la misma ciudad. Se ha trabajado con cuatro sustancias orgánicas, no inflamables ni tóxicas, que pueden conseguirse en el mercado local, con temperatura de fusión entre 12 y 40 C, cuyos parámetros térmicos se muestran en la Tab. (1).

Tabla 1: Parámetros térmicos de las sustancias utilizadas en los cálculos

sustancia	Tf (°C)	k (W/ m C)	$\rho (Kg/m^3)$	c (J/Kg C)	L (J/Kg)
estearato de butilo	12	0.240	800	1600	120000
difenilmetano	25	0.142	1000	1622	105500
estearato de metilo	26	0.220	800	1600	120000
parafina	40	0.140	770	2890	180000

Dado que, la premisa para la utilización de una u otra sustancia es que la temperatura ambiente $T_a(t)$, se encuentre a lo largo del día siempre por debajo o siempre por encima de la temperatura de fusión, se ha calculado la posición de la frontera para los casos mostrados en la Tab. (2)

Tabla 2: Casos en los que se ha calculado la posición de la frontera en los tres días seleccionados.

meses calculados	sustancia
julio	estearato de butilo - difenilmetano - parafina
setiembre	difenilmetano - estearato de metilo - parafina
octubre	estearato de butilo - parafina

A los efectos de llevar a cabo el cálculo se ha considerado el caso en que la temperatura varía en el tiempo según los datos oportunamente registrados y el caso en que dicha temperatura es constante e igual a la media diaria, con el fin de comparar los valores obtenidos en ambas situaciones. Para ello, se desarrolló un programa en Qbasic que utiliza una aproximación de derivadas parciales por medio de diferencias finitas de las Ec. (1) y (3) sujetas a las condiciones dadas por las Ec. (2), (4), (5) y (6).

Para el caso en que la temperatura en x=0 es constante (T_{med}), se utilizaron diferencias finitas implícitas, con un intervalo de tiempo de 15 min y un intervalo espacial de 3.3 milímetros. La validez de la solución y del modelo de cálculo empleado se explicita en Boucíuez et al (2002), presentado en este mismo congreso.

En el caso en que la temperatura en el borde sea una función variable en el tiempo $(T_a(t))$ se trabajó con diferencias finitas explícitas. Esto obedece a la necesidad de trabajar con intervalos pequeños tanto temporales como espaciales, lo que asegura que los saltos en la temperatura del borde son tan pequeños como sea posible para tratar de dar continuidad a los datos discretos de los que se dispone, dado que la temperatura ambiente es, de hecho, una función continua. Se probaron distintas pares de intervalos temporales y espaciales compatibles con la condición de estabilidad del método utilizado (Carnahan et all, 1969). Entre todos estos pares de valores se realizó el cálculo para un intervalo temporal de 3 seg y un espacial de 1.25 mm. Los valores de $T_a(t)$, para el intervalo de tiempo de cálculo, fueron interpolados linealmente dentro del mismo programa. La validez de este modelo queda expresada por la comparación entre los resultados obtenidos y la Ec. (18) obtenida a partir de la desigualdad dada por Sherman, (Ec. (17)).

5. Resultados obtenidos

Como ya se ha dicho se trabajo para las tres situaciones siguientes en cada caso.

- $T(0,t) = T_a(t)$, iniciando el cálculo a las 0 hs del día
- $T(0,t) = T_a(t)$, iniciando el cálculo a las 12 hs del día
- $T(0,t) = T_{med}$, constante e igual a la temperatura media diaria

En las Fig. (1) a (7) se representa la posición de la frontera libre en estas tres situaciones para cada mes y cada sustancia elegida de acuerdo a las premisas de temperaturas consideradas (ver Tab. (2)). En ellas en vez de rotular las series con la hora de inicio, se lo hizo con el valor de la temperatura inicial (T_{ini}) tomada para el cálculo, por considerarse que esto permite una mejor comparación de los resultados obtenidos. El caso en que la temperatura en el borde es constante e igual a la media diaria se rotulo con T_{med} .

Las Fig. (1) a (3) corresponden al mes de setiembre, en que la amplitud diaria es de 22.1 C, para las sustancias difenilmetano, estearato de metilo y parafina, respectivamente. Las Fig. (4) y (5) corresponden al mes de octubre, en que la amplitud diaria es de 16 C, para las sustancias estearato de butilo y parafina, respectivamente. Las Fig. (6) y (7) corresponden al mes de julio, en que la amplitud diaria es de 8.6 C, para el estearato de butilo y el de metilo, respectivamente

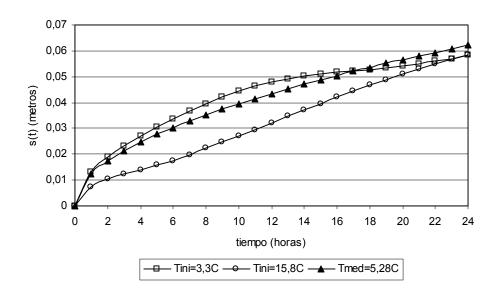


Figura 1: Posición de la frontera libre para el difenilmetano, en un día de setiembre en que la media diaria es de 5.28 C

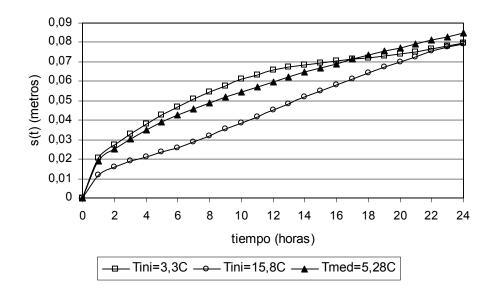


Figura 2: Posición de la frontera libre para el estearato de metilo, en un día de setiembre en que la media diaria es de 5.28 C

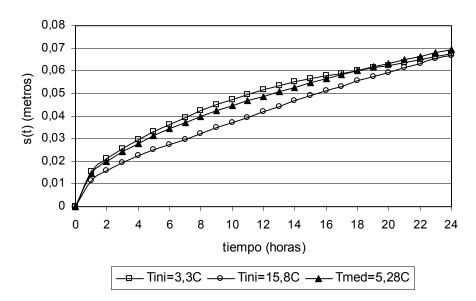


Figura 3: Posición de la frontera libre para la parafina, en un día de setiembre en que la media diaria es de 5.28 C

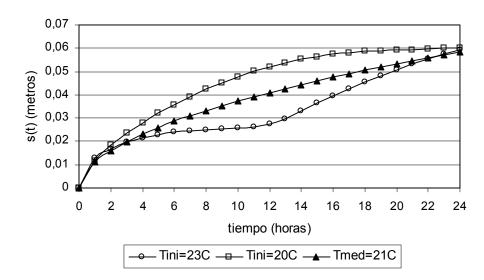


Figura 4: Posición de la frontera libre para el estearato de butilo, en un día de octubre en que la media diaria es de 21 C

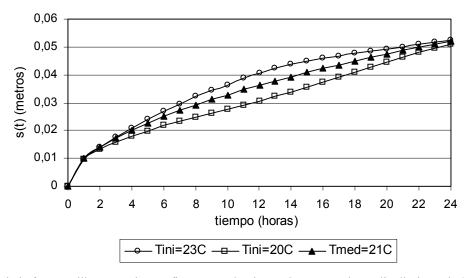


Figura 5: Posición de la frontera libre para la parafina, en un día de octubre en que la media diaria es de 21 C

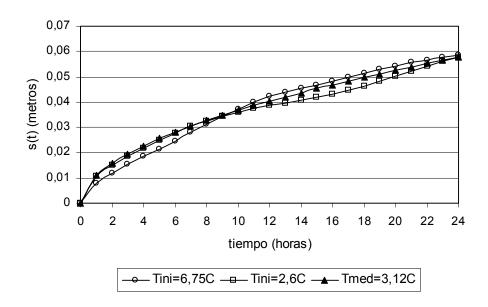


Figura 6: Posición de la frontera libre para el estearato de butilo, en un día de julio en que la media diaria es de 3.12 C

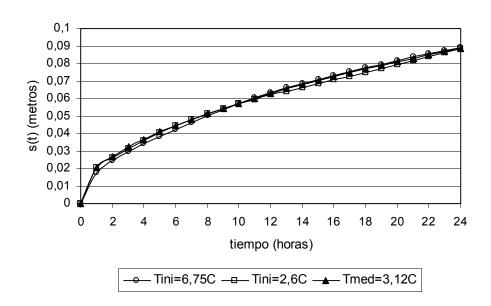


Figura 7: Posición de la frontera libre para el estearato de metilo, en un día de julio en que la media diaria es de 3.12 C

En las Fig. (6) y (7) se observa que las tres curvas están muy próximas entre sí, esto se justifica por el hecho de que la amplitud térmica diaria es pequeña, por lo que la posición de la frontera no presenta cambios significativos con la temperatura a la que se inicia el cálculo.

Los valores de la posición de la frontera calculados mediante el programa se corroboraron con los obtenidos utilizando la Ec. (18). Los resultados de esta comparación muestran que los valores arrojados mediante el modelo numérico se encuentran, en todos los casos, dentro de los límites previstos por esta expresión.

A los efectos de realizar una comparación del comportamiento de una dada sustancia bajo distintas temperaturas ambientes se ha representado los resultados obtenidos para la parafina, para los meses de setiembre y octubre. Los resultados se muestran en la Fig. (8).

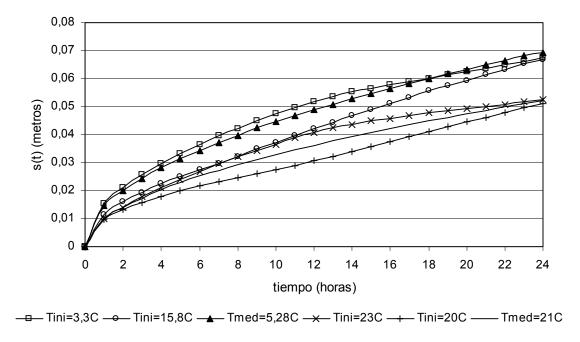


Figura 8: Posición de la frontera libre para la parafina, para comparar los resultados obtenidos en setiembre y octubre.

6. Conclusiones

Los resultados obtenidos y mostrados en las Fig. (1) a (7) permiten afirmar que, en líneas generales, al cabo de un día la posición de la frontera libre cuando la temperatura en el borde es variable en el tiempo, se encuentra muy próxima a la que alcanza si la temperatura en el borde se mantiene constante e igual al promedio de la temperatura variable. Esto es importante porque permite tener una primera aproximación, mediante un cálculo rápido y sencillo, de la posición de la frontera.

Por otra parte, los resultados para el día elegido del mes de julio muestran que cuando la amplitud térmica diaria no es significativa no hay grandes variaciones entre las curvas obtenidas para distintas temperaturas iniciales, que corresponden a distintas horas del día.

La Fig. (8) muestra el comportamiento de una misma sustancia sujeta a condiciones de borde distintas. En ella puede observarse la dependencia de la posición de la frontera con las distintas condiciones de temperatura a la que dicha sustancia está sujeta. Lógicamente, la frontera crece más a medida que la temperatura ambiente se aparta más de la de fusión.

En términos generales, los resultados obtenidos muestran que puede calcularse rápidamente la posición de la frontera, con solo tener el valor de la temperatura media diaria. Claramente surge la necesidad de analizar el caso en que la sustancia de cambio de fase elegida presente fusión a una temperatura que se encuentre en algunos periodos de tiempo por encima de la ambiente y en otros por debajo, lo cual no es sencillo, ya que la existencia de la solución no está asegurada, sino bajo ciertas condiciones; por otra parte, el modelo de cálculo para llevar a cabo la simulación numérica debería ser mucho más complejo. Esto será objeto de un próximo análisis.

7. Agradecimientos

Este trabajo se desarrolló en el marco del Proyecto de Investigación "Estudio de Sustancias con Cambio de Fase a Temperatura Ambiente y sus Aplicaciones en el Habitad y en el Agroalimentación", financiado por el Consejo de Investigaciones de la Universidad Nacional de Salta.

8. Referencias

Alexiades, V. and Solomon, A, "Mathematical Modeling of Melting or Freezing Processes". Hemisphere Publishing Corporation, A Member of the Taylor & Francis Group, 1993, pp. 2 - 50

- Boucíguez, A. y Saravia, L, "El Uso del Estearato de Metilo en Colectores Acumuladores para Calentamiento Pasivo de Viviendas". Actas del V Congreso Ibérico y IV Congreso Iberoamericano de Energías Renovables. Madrid, España, 1990, pp. 95 102.
- Boucíguez, A., "Buthyl Stearate Behavior in Passive Conditioning of Dwellings Building." Actas del 7° Congreso Latinoamericano de Transferencia de Calor y Materia. (LAYCYM 98) Salta, Argentina, 1998, Vol II, pp. 421 424.
- Boucíguez, A., Villa, L y Lara, M, "Análisis de Sustancias de Cambio de Fase para su Utilización en el Envasado y Transporte de Productos Alimenticios", CIAR 2001 VI Congreso Iberoamericano de Aire Acondicionado y Refrigeración, Buenos Aires, Argentina, 2001, pp. 640 648
- Carnahan, B. Luther, H. and Wilkes, J, "Applied Numerical Methods" John Wiley & Sons, New York, 1969, pp. 456 470. 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, 1971, 33, pp. 449 466.
- Tarzia, D, "Una Revisión sobre Problemas de Frontera Móvil y Libre para la Ecuación del Calor. El Problema de Stefan", Mathematicae Notae. Año XXIX, 1981/82, pp. 147 241.

A PROPOSAL OF THERMAL CONDITIONING USING PHASE CHANGE MATERIALS

Abstract. The use of phase change materials in thermal conditioning presents a lot of applications, especially when it is exposed at variable temperature in the time. For that, the study of those substances has been though considering that the place to condition should be stayed at a fixed temperature, equal to the fusion one of the substance in use. To analyze the behavior of the phase change material to be used, a model of one phase Stefan problem was formulated, in which a consistent analysis is presented in a theoretical prediction providing existence and uniqueness of the solution and a numerical simulation using finite differences to calculate the free boundary position. The results show the behavior when the temperature varies at the time is similar at that in which the temperature is fixed and equal to the daily mead, It is useful because allows a simple evaluation of the interface position as a first approximation.

Key words. phase change materials, variable temperature, thermal coditioning free boundary position.