

## ESTUDIO DEL COMPORTAMIENTO DE UNA SUSTANCIA DE CAMBIO DE FASE CON CONDICIÓN DE BORDE CONVECTIVA

Ricardo Lozano<sup>a</sup>Luis T. Villa<sup>b</sup>y Angélica Boucíguez<sup>a</sup>

<sup>a</sup>*Facultad de Ciencias Exactas. Universidad Nacional de Salta. Av. Bolivia 5150 – Salta, Argentina. Tel 0387 –4255424. e-mail: lozanor@unsa.edu.ar; bouciga@unsa.edu.a; r mville88@gmail.com*

<sup>b</sup>*Facultad 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, problema de Stefan a una fase, frontera libre, condición de borde convectiva.

**Resumen:**El proceso de fusión - solidificación, ha sido abordado con anterioridad, procurando soluciones a problemas de difusión con cambio de fase, cuando estando inicialmente sólidas a la temperatura de fusión son sometidas a un flujo de calor por uno de sus laterales. Un flujo interesante es el convectivo, pues es la forma más realista de entrada o extracción de calor a la sustancia de cambio de fase. Dada esta condición de borde resulta interesante observar el comportamiento de la sustancia, cuando, en presencia de un frente de fusión inicial, cambia la temperatura en el borde expuesto al flujo, por influencia de éste, así como el coeficiente de transferencia de calor entre ella y el medio ambiente.

Se estudia el problema tipo Stefan a una fase, con frente de fusión inicial, cuando la sustancia es sometida a un flujo externo de tipo convectivo, teniendo en cuenta el cambio en el valor numérico del coeficiente de convección entre la pared y el material, como consecuencia del cambio de temperatura en este último. Se asume que el frente de fusión inicial es lineal, encontrándose a una cierta temperatura en el borde fijo (expuesto al ambiente) hasta la de cambio de fase en la frontera, analizándose para distintos valores iniciales de esta temperatura y una misma ambiente.

## 1 INTRODUCCIÓN

El comportamiento de sustancias que presentan cambio de fase ha sido analizado y conceptualizado por Stefan, (1889a, 1889b) por lo que tales problemas llevan su nombre. En particular, éstos presentan solución analítica sólo bajo determinadas condiciones: unidimensionalidad, geometría semi-infinita, propiedades termofísicas constantes, temperatura inicial uniforme, temperatura constante impuesta en el borde fijo, o bien flujo de calor inversamente proporcional a la raíz cuadrada del tiempo. (Alexiades y Solomon, 1993); siendo ambas condiciones de contorno equivalentes (Bouciguez et al, 2006)

Las sustancias de cambio de fase, pueden utilizarse 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, siendo sometida a un flujo de calor externo por uno de sus laterales.

La condición de flujo convectivo, permite observar el comportamiento de la sustancia, cuando ante la presencia de un frente de fusión inicial, cambia la temperatura en el borde expuesto al flujo, por influencia de éste, así como el coeficiente de transferencia de calor entre ella y el medio ambiente. (Tarzia y Turner, 1996; Lozano et al, 2011)

Un trabajo básico sobre conducción de calor unidimensional a una fase, con frontera libre y flujo de calor prescrito en la frontera fija, fue reportado por Cannon y Primicerio, 1971 Olguín, Medina, Sanziel, Tarzia, 2007 reportaron resultados sobre el efecto de un flujo convectivo transiente en el borde fijo de un medio unidimensional.

En este trabajo se estudia el comportamiento térmico de una sustancia de cambio de fase, con un frente de fusión inicial y por ende, una distribución inicial de temperaturas en el líquido originalmente presente, a ser expuesta a un flujo convectivo, por contacto con el ambiente externo, en el borde fijo. Dicha distribución se ha considerado tal que, la temperatura en el líquido inicialmente presente, varía linealmente desde un determinado valor  $T_b = T(0, t)$  en el borde expuesto, a la de fusión  $T_f$  en la interfase, siendo  $T_b \geq T_f$ , la que se encuentra a 100 mm de dicho borde. Tal distribución se ha tomado a los fines prácticos de ilustrar un caso concreto físicamente realizable. 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.

La zona de transición entre líquido y sólido, denominada interfase, se mueve en el tiempo, constituyendo un problema de frontera libre. El borde de la sustancia está en contacto con un fluido a temperatura constante, que le transfiere calor por convección.

En la Figura 1 se presenta un esquema de esta situación inicial, en ella se ha representado con  $x$ , la posición sobre una recta en la dirección del flujo de calor, así  $x=0$ , es la ubicación del borde fijo, la posición de la interfase, que es función del tiempo se representado con  $s(t)$ , por ello  $x=s(0)=b$ , representa la posición inicial de la interfase, siendo  $b > 0$ . La temperatura del fluido se representa por  $T_\infty$  y la de fusión de la sustancia por  $T_f$ . El campo térmico dinámico en la parte líquida se denota por  $T(x, t)$  donde  $x$  es posición y  $t$  es tiempo. Se denota por  $h[T(0, t)]$  el coeficiente de transferencia de calor que tiene en cuenta su dependencia con la temperatura en el borde de la sustancia.

Se han considerado distintas situaciones iniciales para el proceso de fusión, en todas ellas se mantiene constante la temperatura del fluido,  $T_\infty = 20^\circ\text{C} + T_f$ . Se ha variado la distribución de temperatura en el frente inicial al dar a la temperatura superficial de la sustancia distintos

valores por encima, igual y por debajo de la del fluido, manteniendo el perfil lineal y la profundidad del frente inicial. Para simplificar los cálculos y sin pérdida de generalidad, se ha asumido que la temperatura de fusión es igual a cero.

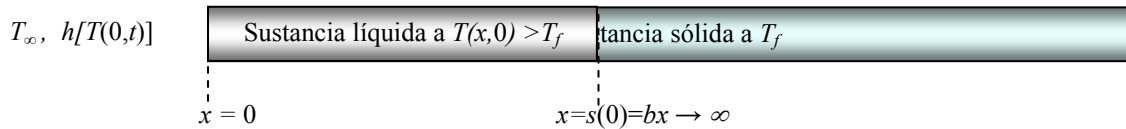


Figura 1: Esquema de la situación inicial del proceso de fusión.

En tales condiciones la sustancia comienza el proceso de fusión, que resulta en el cambio de temperatura en cada punto de la parte líquida y el corrimiento de la interfase con el consiguiente aumento de la cantidad de líquido. La posición de dicha interfase, es desconocida a priori, por lo que debe determinarse conjuntamente con la temperatura en el líquido emergente; 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 presentes: la líquida.

El problema se ha resuelto numéricamente y se obtuvieron el campo térmico en la fase líquida y la posición de la interfase.

## 2 FORMULACIÓN MATEMÁTICA DEL PROBLEMA Y MODELO DE CÁLCULO

El problema resulta descrito por las ecuaciones (1) a (6), siendo  $\tau$  el tiempo total de cálculo (Alexiades y Solomon, 1993). Se designa con  $u(x,t) = T(x,t) - T_f$  a la temperatura en la fase líquida, con  $u_\infty = T_\infty - T_f$  la temperatura del fluido. El coeficiente convectivo se denota con  $h = h[u(x,t)]$ . Los parámetros físicos del material de cambio de fase son:  $\rho$  la densidad,  $k$  la conductividad térmica,  $c$  el calor específico,  $L$  el calor latente de fusión y  $\alpha = k/(\rho c)$  la difusividad térmica.

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

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

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

$$u(x,0) = \varphi(x) \quad 0 < x < b \quad (4)$$

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

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

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) a (6) son las condiciones iniciales y de borde.

La condición (4) establece la distribución inicial de temperatura en la parte líquida. Se

eligió un perfil lineal de la forma:

$$\varphi(x) = -(a/b)x + c, \text{ con } a, y c \text{ no negativos.} \quad (7)$$

La condición de compatibilidad  $\varphi(b) = 0$ , implica,  $a = c = \varphi(0)$ . Se han analizado distintas situaciones iniciales para el proceso de fusión eligiendo valores distintos para  $\varphi(0)$ , lo que implica distinta cantidad de energía aunque igual cantidad de sustancia en estado líquido. Los valores elegidos fueron 30, 25, 20, 15, 10 y 0°C. En la última situación, la temperatura en el frente de fusión es uniforme e igual a la de fusión, pero la sustancia se encuentra en el intervalo  $[0, b]$  en estado líquido.

A partir de valores numéricos computados con el programa Heat Transfer (Young y Mills, 1995) suponiendo transferencia por convección natural entre una pared vertical de 1 m expuesta a aire a temperatura  $T_\infty = 20^\circ\text{C}$  se obtuvo ajustando por cuadrados mínimos la siguiente expresión potencial para el coeficiente de transferencia de calor:

$$h_{conv}(T) = 1.36469(\text{abs}[T-20])^{0.247629} \quad (8)$$

donde  $T$  representa la temperatura en el borde de la sustancia. La Figura 2, muestra la gráfica de dicha función.

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

El procedimiento de resolución numérica se basa en el 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 este en particular.

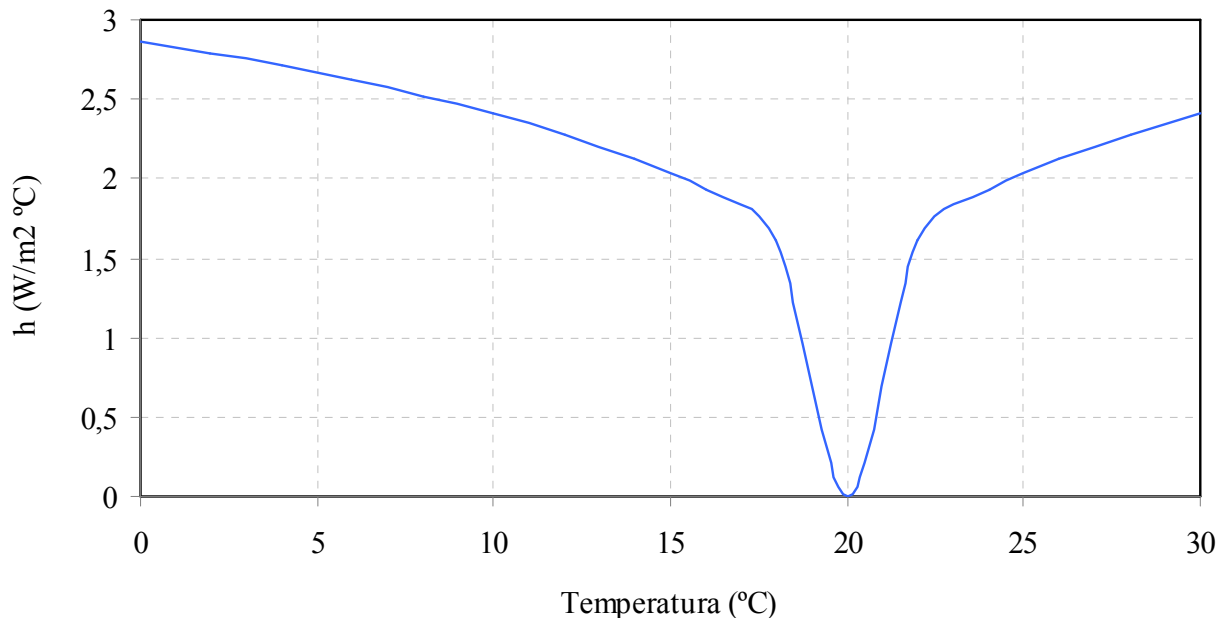


Figura 2: Gráfica del coeficiente convectivo como función de la temperatura superficial

Es necesario para tal método disponer de una expresión equivalente para la frontera. Se ha usado la expresión implícita (9) que es satisfecha por la solución del problema (1) a (6) (Tarzia, 1996)

$$s(t) \left[ 1 + \frac{h s(t)}{2k} \right] = b + \frac{h}{k} \left[ \frac{b^2}{2} + \frac{c}{L} \left( \int_0^b y \varphi(y) dy + \alpha \int_0^t u_\infty dx \right) \right] + \frac{c}{L} \left[ \int_0^b \varphi(y) dy - \int_0^{s(t)} u(y,t) dy \right] \quad (9)$$

En esta ecuación implícita para  $s(t)$ , en el último término del lado derecho, aparece la temperatura en la parte líquida al tiempo  $t$  que es una incógnita del problema. Por otra parte esta expresión resulta adecuada para el procedimiento numérico utilizado.

El problema se discretiza mediante el método de diferencias finitas implícitas. 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  $(x,t), u(x,t) \equiv u(i dx, j dt)$  señalada con  $u(i,j)$
- Posición de la frontera libre  $s(t) \equiv s(j dt)$  señalada con  $s(j)$

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 (10), para puntos en el interior de la masa del líquido, mientras que en la proximidad de la frontera resulta aplicable la ecuación (11)

$$\frac{u(i, j+1) - u(i, j)}{dt} = \frac{\alpha}{(dx)^2} [u(i-1, j+1) + u(i+1, j+1) - 2u(i, j+1)] \quad (10)$$

$$\frac{u[N(j), j+1] - u[N(j), j]}{dt} = \left( \frac{2\alpha}{dx} \right) \cdot \left( \frac{u[N(j)-1, j+1]}{s(j+1) - (N(j)-1)dx} - \frac{u[N(j), j+1]}{s(j+1) - N(j)dx} \right) \quad (11)$$

La condición en el borde fijo, dada por la ecuación (6) al ser discretizada queda expresada por la ecuación (12)

$$\frac{k}{dx} [u(1, j+1) - u(0, j+1)] = h[u_\infty - u(0, j+1)] \quad (12)$$

La ecuación (7) para la interfase, al ser discretizada se expresa por la ecuación (13)

$$s(j+1) = \left( 1 + \frac{h[u(0, j+1)]s(j+1)}{2k} \right)^{-1} \left( b + \frac{h[u(0, j+1)]}{k} \left[ \frac{b^2}{2} + \frac{c}{L} \left( dx^2 \sum_{i=0}^{N(0)} i \varphi(i dx) + \alpha dt u_\infty (j+1) \right) \right] + \frac{c dx}{L} \left[ \sum_{i=0}^{N(0)} \varphi(i dx) - \sum_{i=0}^{N(j+1)} u(i, j+1) \right] \right) \quad (13)$$

Las ecuaciones (10) a (13) conducen a un proceso iterativo que resuelve el problema (10) – (12) a partir de un valor dado para  $s(j+1)$  y luego recalcula  $s(j+1)$  de (13), reiniciando el proceso con el nuevo valor de  $s(j+1)$ . 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  $dt=900$ seg, mientras que el espacial es  $dx=1$ mm.

El procedimiento de resolución numérica de este problema de frontera libre, 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. (Lozano y Boucíguez, 2009)

### 3 RESULTADOS OBTENIDOS.

Los cálculos fueron realizados utilizando el lenguaje *Mathematica* (Wolfram, 2011), el que haciendo uso de las subrutinas que tiene implementadas permite calcular simultáneamente la posición de la interfase y la distribución de temperaturas en la sustancia.

En las Figuras 3 a 11, se presentan los resultados obtenidos para: la posición de la frontera y las temperaturas alcanzadas por la sustancia de cambio de fase, para las distintas situaciones analizadas. La Figura 3 muestra la evolución temporal de la interfase.

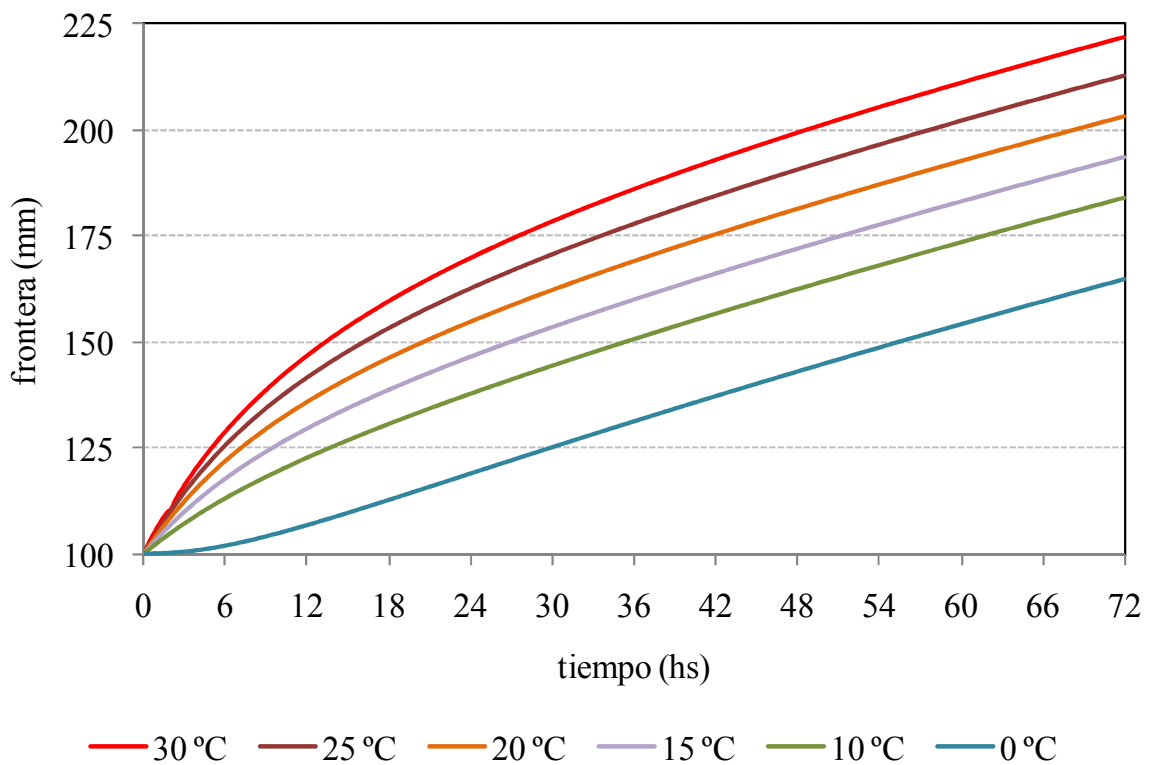


Figura 3: Posición de la interfase cuando  $T(0,0) = 30, 25, 20, 15, 10$  y  $0^\circ\text{C}$ .

En las Figuras 4 y 5 se presentan, respectivamente, las temperaturas en el borde expuesto al ambiente  $T(0,t)$  y en la posición inicial de la interfase  $T(b,t)$  en función del tiempo, para todos los casos estudiados.

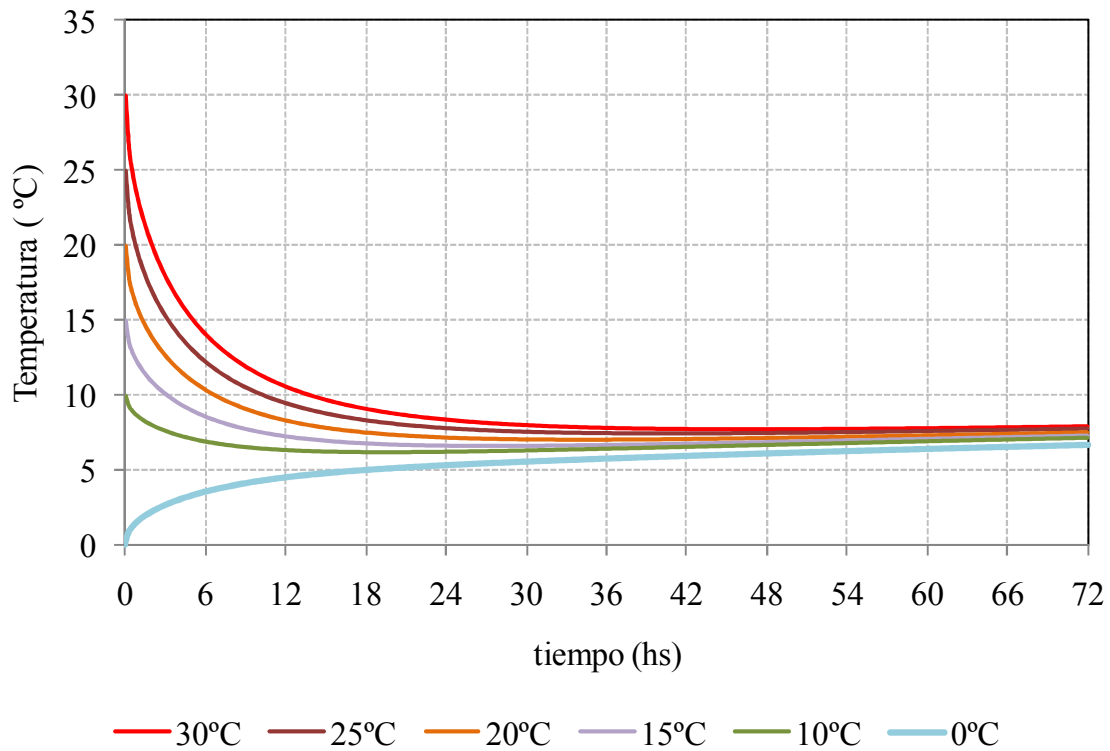


Figura 4: temperatura en el borde fijo  $T(0,t)$  cuando  $T(0,0)= 30, 25, 20, 15, 10$  y  $0^\circ\text{C}$

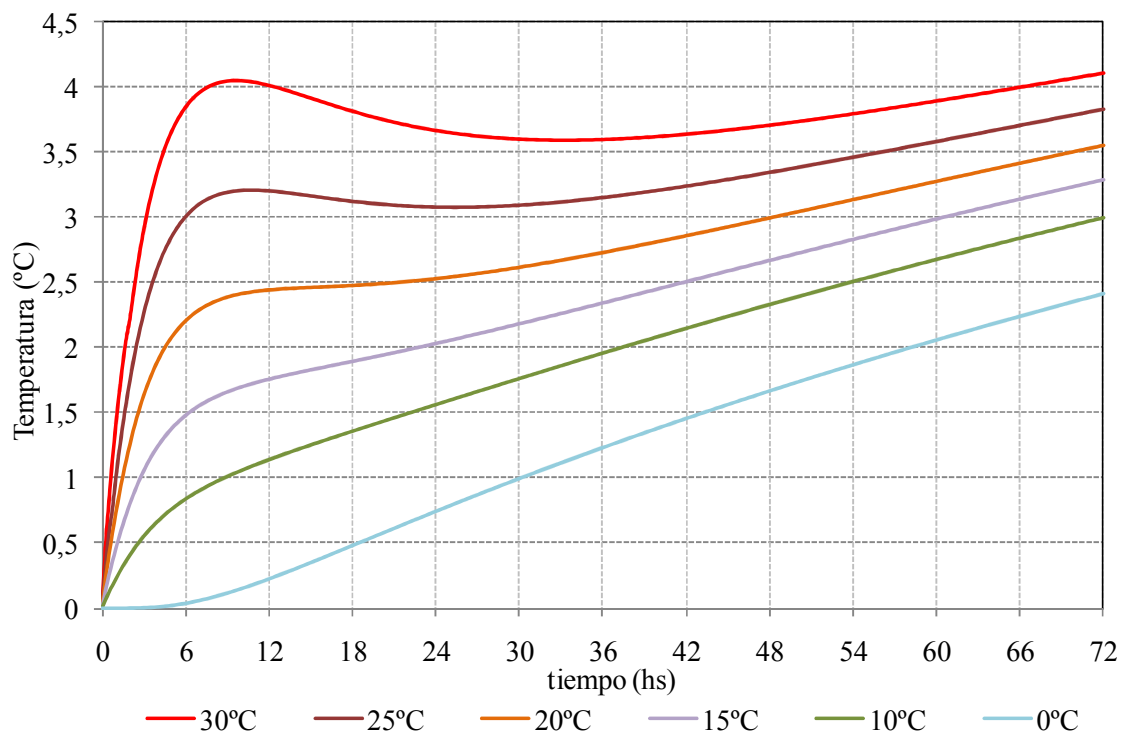


Figura 5: Temperatura en el plano  $x = b$ ,  $T(b,t)$  cuando  $T(0,0)= 30, 25, 20, 15, 10$  y  $0^\circ\text{C}$

En las Figuras 6 a 11, se muestran, la distribución de temperaturas en función de la posición, para distintos tiempos de iniciado el proceso, para todos los casos estudiados, esto es para

$T(0,0) = 30, 25, 20, 15, 10$  y  $0^\circ\text{C}$  y  $T_\infty = 20^\circ\text{C}$ , respectivamente.

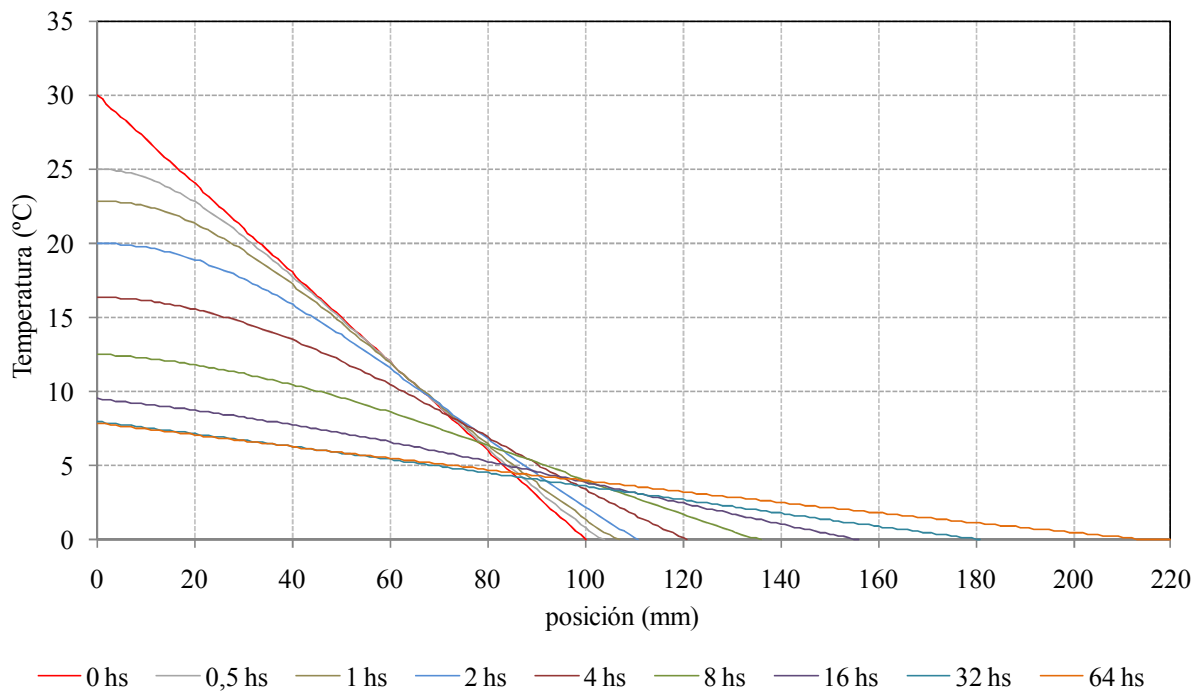


Figura 6: Temperaturas en función de la posición, cuando  $T(0,0) = 30^\circ\text{C}$

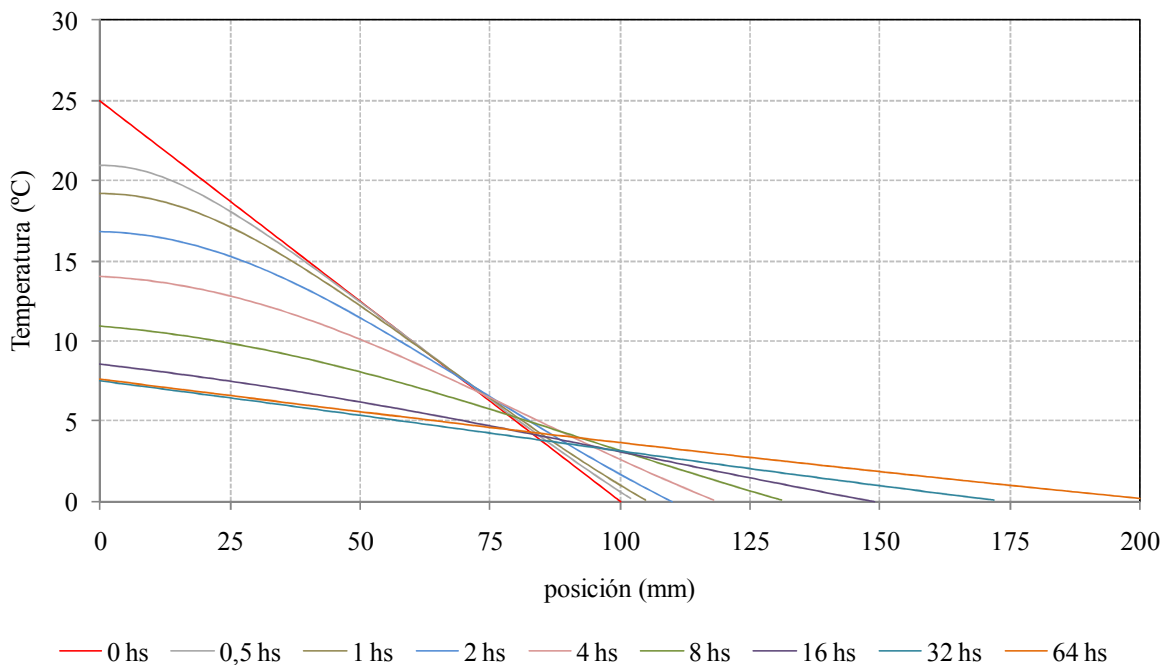


Figura 7: Temperaturas en función de la posición, cuando  $T(0,0) = 25^\circ\text{C}$



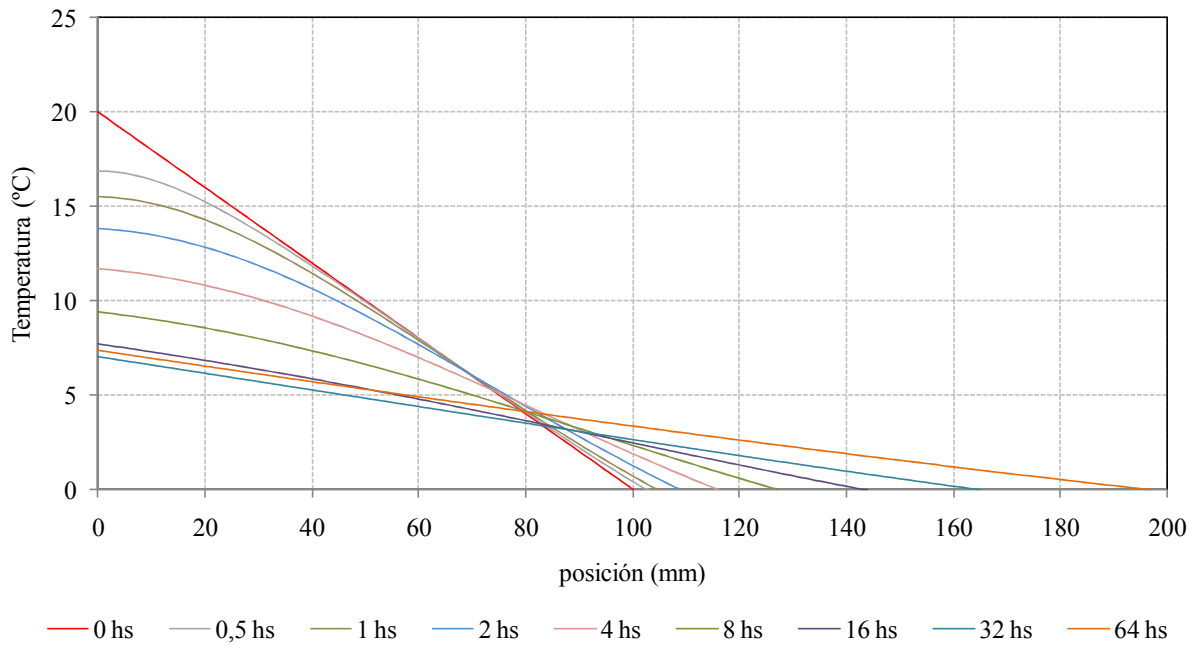


Figura 8: Temperaturas en función de la posición, cuando  $T(0,0)= 20\ 0^{\circ}\text{C}$

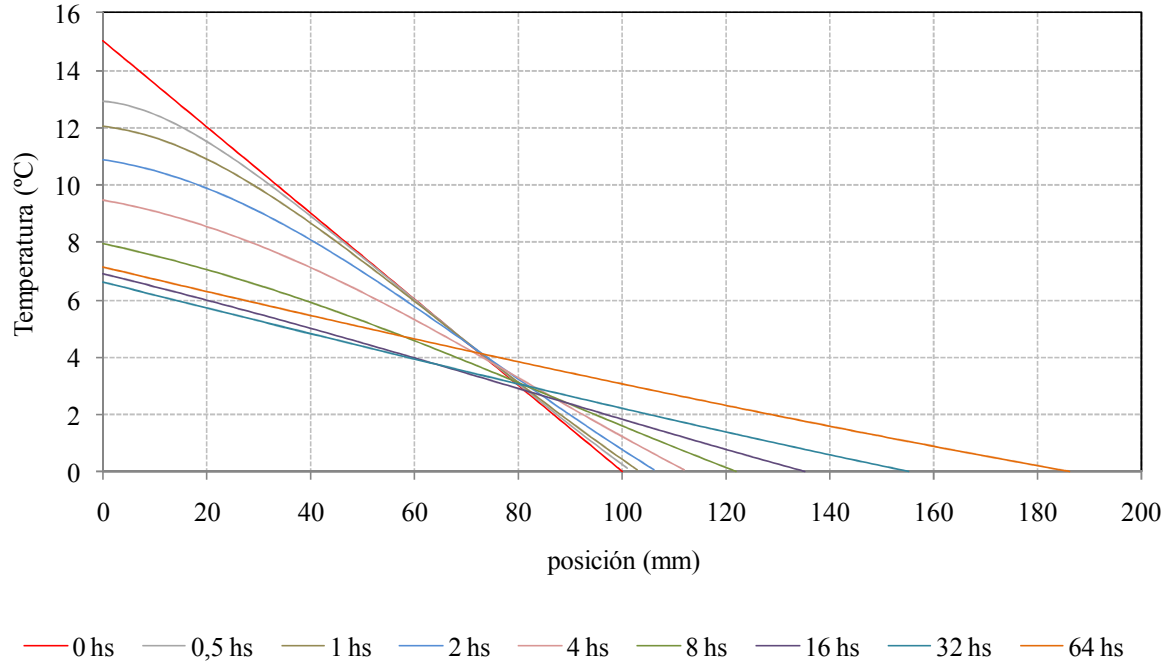


Figura 9: Temperaturas en función de la posición, cuando  $T(0,0)= 15^{\circ}\text{C}$

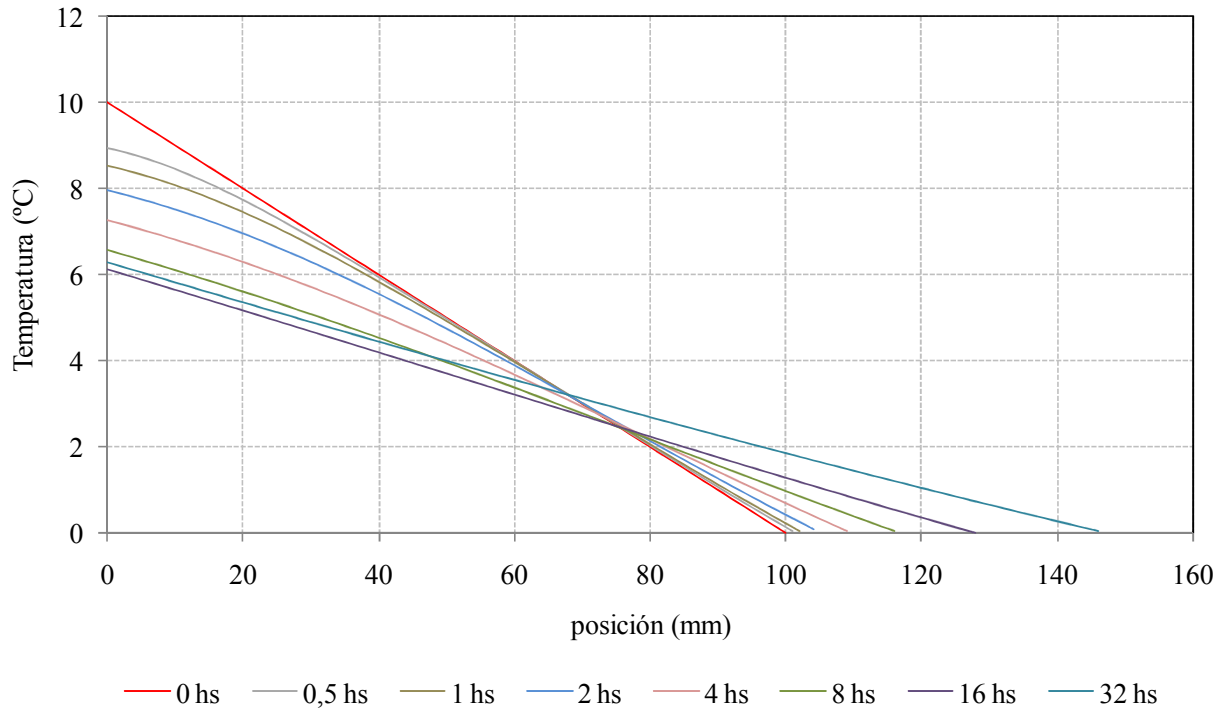


Figura 10: Temperaturas en función de la posición, cuando  $T(0,0) = 10^\circ\text{C}$

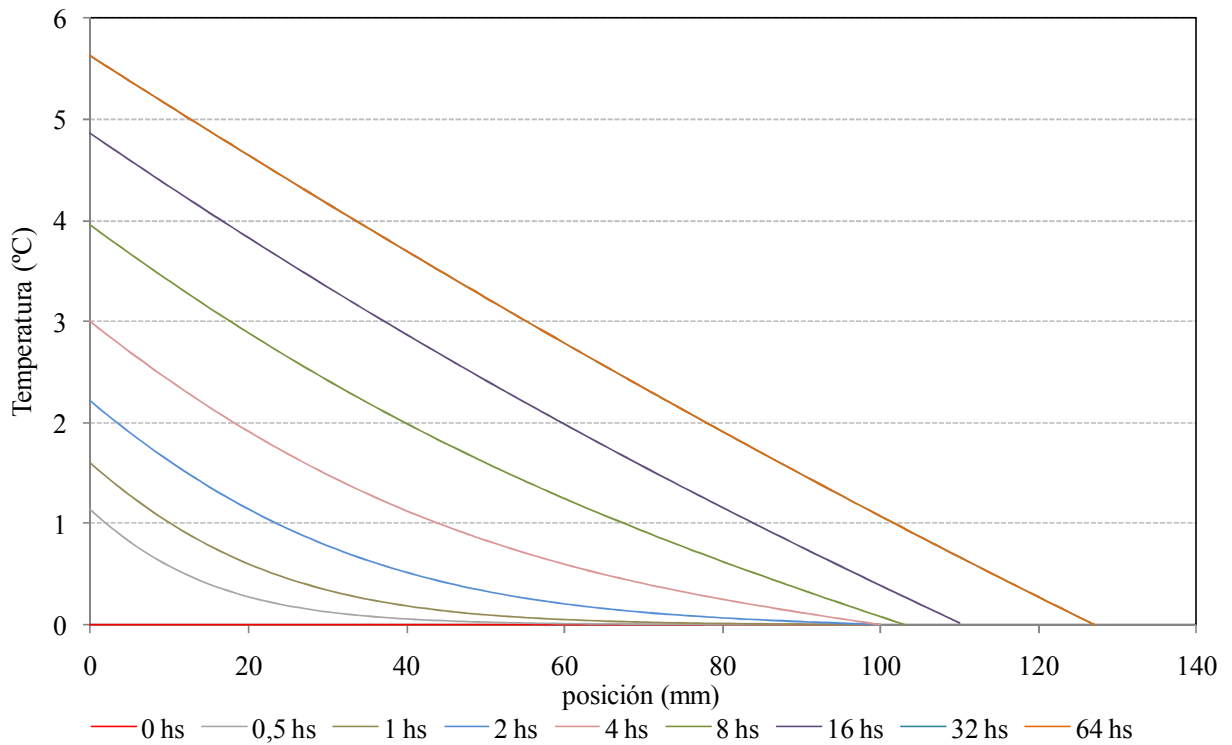


Figura 11: Temperaturas en función de la posición, cuando  $T(0,0) = 0^\circ\text{C}$

#### 4 ANALISIS DE RESULTADOS.

La **Figura 3** muestra que, al comienzo del proceso, a mayor temperatura del frente de fusión inicial, mayor es la velocidad de avance de la frontera, luego de 24 hs. dichas velocidades se igualan, por lo que se mantiene la diferencia obtenida en ese lapso.

En la **Figura 4** se aprecia que cuando la temperatura del borde es mayor que  $10^{\circ}\text{C}$ , la temperatura del mismo desciende hasta alcanzar un mínimo aproximadamente a las 24 hs., luego aumenta muy lentamente. Esto implica que la tasa de descenso de la temperatura en el borde es mayor a mayor temperatura inicial. En todos los casos luego de 30 hs. la temperatura en el borde se mantiene entre  $6$  y  $9^{\circ}\text{C}$  aproximadamente y aumenta muy lentamente.

En la **Figura 5** se observa que la temperatura en el punto  $x=b$ , asciende hasta alcanzar un máximo entre las 6 y las 12 hs, para luego descender y finalmente, volver a subir, cuando la temperatura inicial en el borde fijo es mayor a la del ambiente. En cambio, si  $T(0,0) \leq T_{\text{amb}}$ , la temperatura aumenta desde el inicio del proceso, aunque a diferentes velocidades durante el desarrollo del mismo. Cuando la sustancia se encuentra líquida a la temperatura de fusión, la temperatura en  $x=b$ , aumenta desde el principio, muy lentamente durante las primeras 6 hs, para ascender luego con mayor rapidez.

En las mismas (**Figuras 6 a 11**), se observa que, cuando la temperatura inicial es mayor que la temperatura del fluido, los perfiles de 32 y 64 hs. son coincidentes desde el borde hasta 80 mm aproximadamente. Cuando la temperatura inicial de la pared es 20 o menor se observa con claridad que a partir de las 32 hs la temperatura el borde y sus cercanías comienza a subir. Esto indica que en ese momento la pérdida de calor hacia el sólido iguala a lo que se gana desde el medio. Mientras la temperatura de la pared es mayor que la del ambiente el borde de la sustancia pierde calor hacia el sólido y hacia el exterior.

Antes de 32hs, las temperaturas en la parte del frente inicial más cercano al borde hasta una profundidad de 80 cm descienden, a excepción del caso con temperatura inicial igual a la de fusión. Después de ese tiempo, en todos los casos el perfil final es aproximadamente lineal con la una temperatura alrededor de  $6^{\circ}\text{C}$  en el borde y menor pendiente a mayor temperatura inicial.

Se han realizado cálculos para tiempos sustancialmente mayores, hasta más de 120 días, la gráfica correspondiente se presenta en la **Figura 12**, donde se presenta la temperatura en el borde fijo, en función del tiempo. En ella se observa que a partir de cuatro días las diferencia de temperaturas entre todos los casos es de  $1^{\circ}\text{C}$  o menos, a partir de allí estas diferencias disminuye sustancialmente hasta prácticamente desaparecer.

#### 5 CONCLUSIONES

La condición de borde convectiva es interesante desde el punto de vista teórico y práctico, pues es la forma más realista de suministrar o extraer calor de la sustancia de cambio de fase.

Del análisis de los resultados obtenidos, se observa que durante las primeras 30 hs, en la que el proceso de fusión depende fuertemente de las condiciones iniciales, las tasas de cambio de las temperaturas y las velocidades de avance de la interfase son muy diferentes para las distintas situaciones analizadas y los perfiles de temperatura se curvan

Luego, a partir de las 30 hs., la influencia de la situación inicial casi ha desaparecido. Las velocidades de avance de la interfase son muy parecidas. El perfil de temperatura se hace nuevamente lineal con una temperatura en el borde de alrededor de  $6^{\circ}\text{C}$  para todos los casos estudiados. Como efecto indeleble de la situación inicial permanecen las distintas posiciones alcanzadas por la frontera.



- Handbook.Part A. Engineering Fundamentals. *Edited by W. Dickinson and P. Cheremisinoff*, 1980
- 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.
- 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*
- Lozano, R; Boucíguez, A; Vilte, M y Villa, L. *Análisis de Sustancias de Cambio de Fase con Frente de Fusión Inicial y Flujo Convectivo. Mecánica Computacional. Asociación Argentina De Mecánica Computacional. (MECOM 2011) Vol. XXX p p. 1616-1624, 2011*
- 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, pág.143 -166, 1984.*
- Olguin M; Medina M; Sanziel M; Tarzia D. *Behavior of the solution of a Stefan problem by changing thermal coefficients of the substance. Applied Math and Computation .190, pp.765-780. 2007*
- Stefan, J. (1889a) *Ueber die theorie der eisbildung, insbesondere ueber die eisbildung im Polarmeer. Zit. Akad. Wiss. Wien, Math. Cl., 98, pp.965-983.*
- Stefan, J. (1889b) *Uebereinige Probleme der Theorie der Wärmeleitung. Zit. Akad. Wiss. Wien, Math. Cl., 98, pp.473-484.*
- Tarzia, D. A.; Turner C. V. *The Asymptotic Behavior for the One-Phase Stefan Problem with a Convective Boundary Condition, Appl. Math. Lett. Vol. 9 N° 3, pp. 21-24, 1996*
- Tarzia, D. A.; Turner C. V. *The Asymptotic Behavior for the Two-Phase Stefan Problem with a Convective Boundary Condition, Comm. In Applied Analysis. Vol. 7 N° 3, pp. 313-334, 2003*
- Wolfram, S. *Mathematica 8, Version Number 8.0.4.0. Wolfram Research Inc. © 2011.*
- Young B. y Mills A. F. *Heat Transfer. Versión 1.1a. Universidad de California, Los Ángeles. Copyright Richard D. Irwin Inc., 1995*