

5. VALIDACIÓN SIMULACIONES COMSOL

Se va a crear un modelo propio de solución numérica para problemas de cambio de fase. Para ello se va a utilizar el programa comercial COMSOL, cuyo método de resolución es en elementos finitos, para validar el modelo creado. Antes de utilizarlo, vamos a comparar los resultados dados por COMSOL con las soluciones analíticas. El programa de por sí no resuelve problemas de cambio de fase. Para ello se introduce manualmente las propiedades del material PCM, de manera que se utilizará el método de la capacidad térmica efectiva, el cual crea un calor específico aparente, cuya idea es asumir o aproximar el efecto del calor latente como si tuviera lugar en un rango de temperaturas finito. Existen varias formas de aplicar el método de la capacidad térmica efectiva, utilizándose el que se describe a continuación:

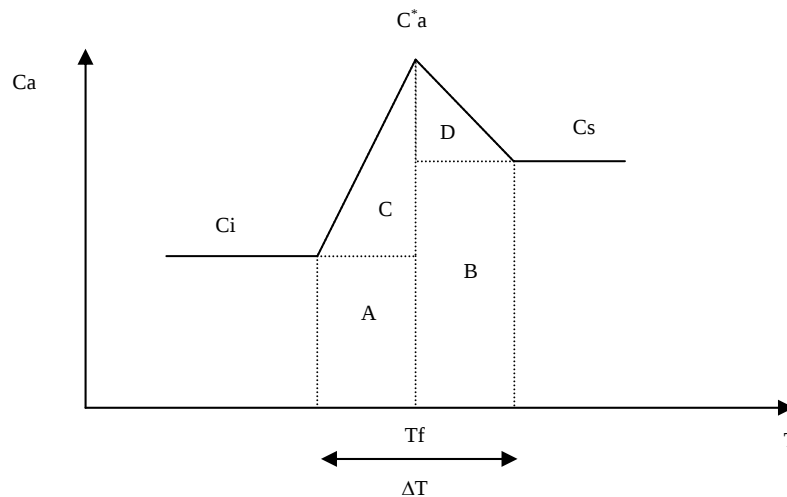


Figura 35. Evolución de la capacidad térmica en función de la temperatura

Cuando el calor específico se dibuja contra la temperatura, el área bajo la curva en el intervalo de temperaturas en el que ocurre el cambio de fase es el calor latente.

$$L = \int_{T_f - \frac{\Delta T}{2}}^{T_f + \frac{\Delta T}{2}} C_a \cdot dT$$

Siendo L el calor latente, C_a la capacidad térmica aparente, T_f la temperatura de fusión y ΔT el intervalo de temperaturas en que se produce el cambio de fase.

Asumiendo una evolución lineal de la capacidad térmica aparente, calculamos el área bajo la curva para hallar C_a^* , de manera que tendremos definida la capacidad térmica aparente mediante tres puntos.

$$A = \Delta T \cdot C_i$$

$$B = \Delta T \cdot C_s$$

$$C = \frac{\Delta T \cdot (C_a^* - C_i)}{2}$$

$$D = \frac{\Delta T \cdot (C_a^* - C_s)}{2}$$

$$L = \Delta T \cdot C_i + \Delta T \cdot C_s + \frac{\Delta T \cdot (C_a^* - C_i)}{2} + \frac{\Delta T \cdot (C_a^* - C_s)}{2}$$

$$C_a^* = \frac{L}{\Delta T} - \frac{(C_i + C_s)}{2}$$

La capacidad térmica efectiva queda por tanto definida como:

$$C_a = \begin{cases} C_i & \text{si } T \leq (T_f - \Delta T/2) \\ \frac{L}{\Delta T} - \frac{(C_i + C_s)}{2} & \text{si } T = T_f \\ C_s & \text{si } T \geq (T_f + \Delta T/2) \end{cases}$$

A continuación se van a comparar los resultados analíticos con los que ofrece la herramienta COMSOL para dos casos: temperatura impuesta y coeficientes de transferencia convectiva junto con temperatura ambiente impuestos.

5.1. CONDICIONES DE TEMPERATURA IMPUESTA

A continuación se muestra la evolución a lo largo del eje del material A_23 de PLUSICE[®], con temperatura de cambio de fase de 23°C, con condiciones de contorno de temperatura impuesta para varios instantes de tiempo con la temperatura superficial impuesta de -100°C. Las simulaciones en COMSOL se grafican junto con las soluciones analíticas en los mismos instantes de tiempo. El material A_23 tiene las siguientes propiedades:

- Densidad: 785 Kg/m³
- Calor latente: 170 KJ/Kg
- Conductividad térmica: 0.18 W/(m·K)
- Calor específico: 2.22 KJ/(Kg·K)

Estas propiedades fueron tomadas del catálogo de la empresa. En las propiedades dadas se observa que no existe distinción entre las propiedades del material en estado sólido y en estado líquido. Esto se debe a que el material está macroencapsulado con aditivos que mantienen sus propiedades constantes tanto en un estado como en el otro.

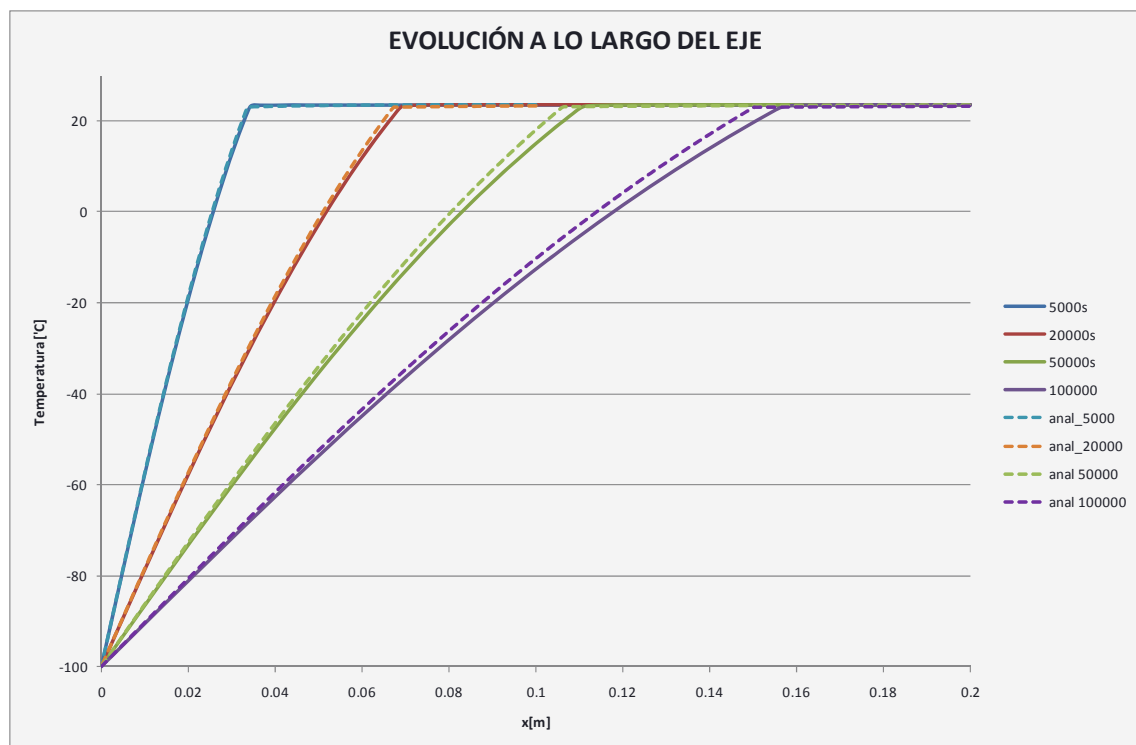


Figura 36. Evolución de la temperatura a lo largo del eje en varios instantes de tiempo para condición de temperatura impuesta

Para el cálculo de la capacidad térmica efectiva para su posterior introducción en COMSOL se ha utilizado un intervalo de temperatura de cambio de fase de 1°C, ya que un intervalo menor daría problemas de cálculo. Por esta razón, el cambio de fase se produce desde 22.5°C hasta 23.5°C. Para poder comparar la solución que da el programa con la solución analítica, la temperatura inicial debería ser igual a la de fusión, sin embargo, si pusiéramos 23°C como temperatura inicial no se utilizaría toda la energía latente del material. Por lo tanto, la temperatura inicial será 23.5°C.

Cálculo de errores.

Se observa cómo aumenta la diferencia entre la solución obtenida y la analítica a medida que aumenta el tiempo que transcurre. De manera que calcularemos el máximo error en los cuatro tiempos simulados. El error en cada uno de los instantes de tiempo se va a calcular cómo:

$$\text{error} = \text{abs} \frac{(T_{\text{analítico}} - T_{\text{COMSOL}})}{T_{\text{analítico}}}$$

El error máximo en cada instante de tiempo es:

- $t=5000s \rightarrow 0.11\%$
- $t=20000s \rightarrow 0.45\%$
- $t=50000s \rightarrow 0.84\%$
- $t=100000s \rightarrow 0.91\%$

Se aprecia que el error es pequeño, ya que no llega al 1%. También es cierto, que al tratarse de errores relativos influye que se haya calculado con grados Kelvin. Se advierte un aumento del error al aumentar el tiempo.

5.2. CONDICIONES CONVECTIVAS

En este apartado se hará lo mismo que en el apartado anterior, con el mismo material, siendo la temperatura ambiente 5°C y el coeficiente de película de 12W/(m²·K). En este caso, cobra una gran importancia la evolución de la temperatura superficial a lo largo del tiempo, ya que de este valor depende todo el campo de temperaturas.

De nuevo se tiene que tener en cuenta que comparamos una solución analítica con temperatura de cambio de fase y temperatura inicial de 23°C, cuando en COMSOL tenemos que el cambio de fase se produce entre 22.5°C y 23.5°C con una temperatura inicial de 23.5°C.

A continuación, se muestran la evolución de la temperatura superficial y la evolución a lo largo del bloque para cuatro instantes de tiempo diferentes:

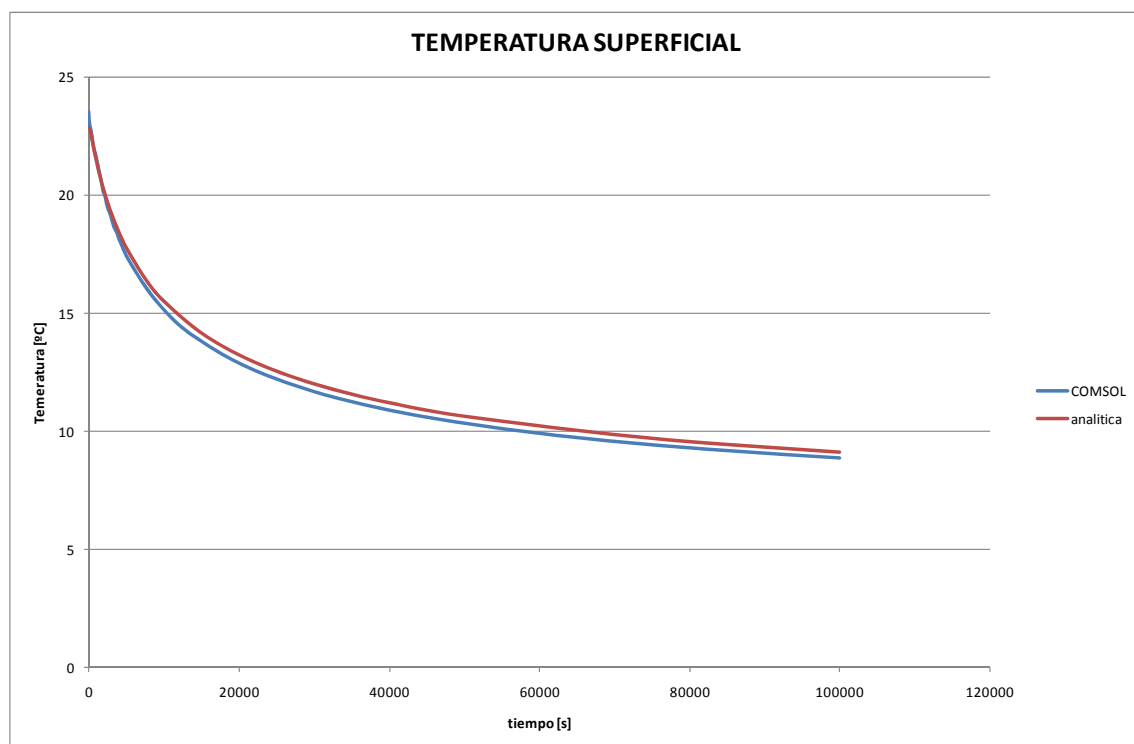


Figura 37. Evolución de la temperatura superficial a lo largo del tiempo para condición convectiva

El mayor error cometido en la temperatura superficial es de 0.16%.

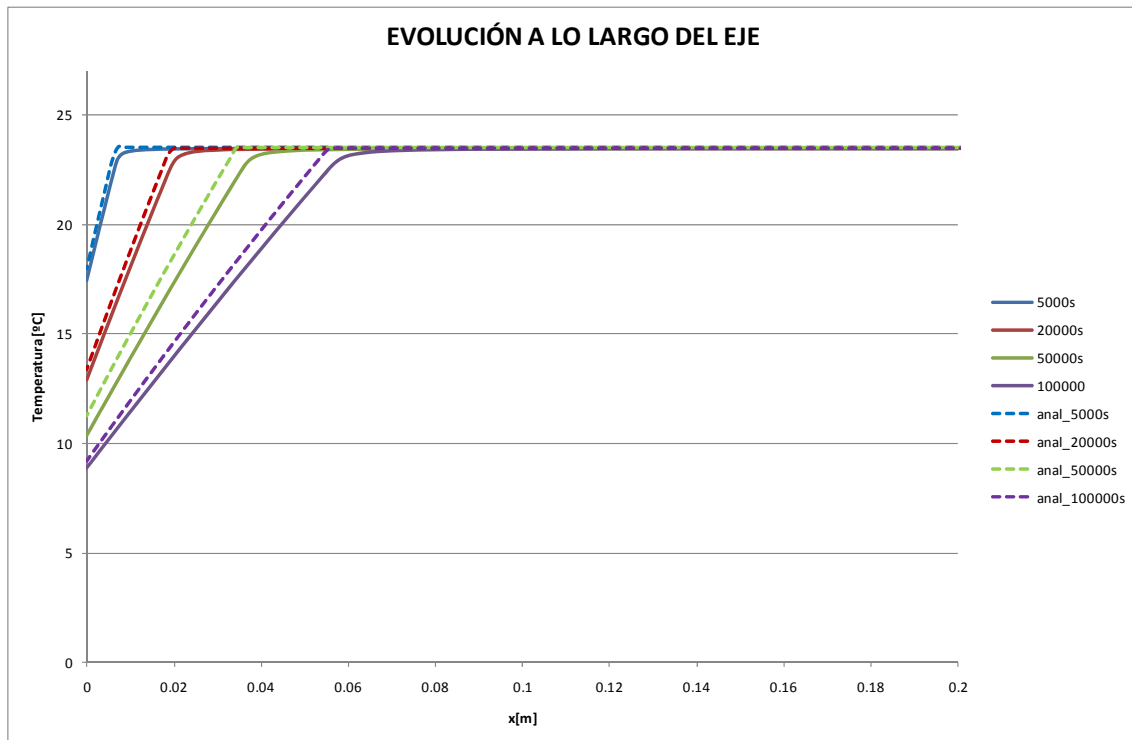


Figura 38. Evolución de la temperatura a lo largo del eje para varios instantes de tiempo para condición convectiva

El error máximo en cada instante de tiempo es:

- $t=5000s \rightarrow 0.13\%$
- $t=20000s \rightarrow 0.17\%$
- $t=50000s \rightarrow 0.18\%$
- $t=100000s \rightarrow 0.21\%$

Se ha calibrado el COMSOL para la simulación de problemas con cambio de fase y se ha logrado un buen nivel de concordancia con las soluciones analíticas. En consecuencia es válido usar COMSOL, como referencia para la evaluación del método de diferencias finitas que se va a desarrollar.