

# Solución Numérica de Problemas Transitorios de Conducción de Calor con Histéresis de Cambio de Fase Sólido-Líquido

## Numerical Solution of Transient Heat Conduction Problems with Solid-Liquid Phase Change Hysteresis

Presentación: 03/09/2024

Doctorando:

**Ramiro Adrián DITTLER**

Facultad Regional Paraná, Universidad Tecnológica Nacional - Argentina  
[ramirodittler@frp.utn.edu.ar](mailto:ramirodittler@frp.utn.edu.ar)

Director:

**Juan Carlos Álvarez HOSTOS**

Codirector:

**Alejandro Eduardo ALBANESI**

### Resumen

Este trabajo presenta un método numérico para abordar con precisión problemas transitorios de conducción de calor en materiales de cambio de fase (PCMs) que exhiben histéresis de entalpía. La histéresis provoca que los procesos de fusión y solidificación no sigan la misma curva de entalpía, lo que dificulta la predicción del comportamiento térmico del material. Se utiliza el método de elementos finitos (FEM) bajo una formulación mixta entalpía-temperatura, que facilita la resolución numérica y permite modelar de manera realista la evolución de la fracción líquida durante el cambio de fase. Se implementa el modelo de histéresis estática en la formulación de FEM, que proporciona una formulación matemática con base física sólida sobre la cuantificación de la histéresis de cambio de fase. Los resultados obtenidos en esta comunicación indican que el esquema numérico propuesto es fiable y robusto, permitiendo la solución de las marcadas no linealidades inherentes al modelo de histéresis estática, lo que lo convierte en una herramienta valiosa para el diseño y optimización de sistemas de almacenamiento de energía térmica (TES).

Palabras clave: Materiales de cambio de fase (PCM), entalpía-temperatura, método de los elementos finitos (FEM), modelo de histéresis, almacenamiento de energía térmica (TES).

### Abstract

This work presents a numerical method for accurately addressing transient heat conduction problems in phase change materials (PCMs) exhibiting enthalpy hysteresis. Hysteresis causes the melting and solidification processes to follow different enthalpy curves, making it difficult to predict the thermal behavior of the material. The finite element method (FEM) is used under a mixed enthalpy-temperature formulation, which facilitates numerical resolution and allows for realistic modeling of the liquid fraction evolution during phase change. The static hysteresis model is implemented in the FEM formulation, providing a mathematically sound physical basis for quantifying phase change hysteresis. The results obtained in this communication indicate that the proposed

numerical scheme is reliable and robust, enabling the solution of the pronounced nonlinearities inherent in the static hysteresis model, making it a valuable tool for the design and optimization of thermal energy storage (TES) systems.

Keywords: Phase change materials (PCM), finite element method (FEM), enthalpy-temperature, hysteresis model, thermal energy storage (TES).

## Introducción

Los materiales de cambio de fase (PCMs) ofrecen una solución prometedora para el almacenamiento de energía térmica debido a su capacidad para almacenar y liberar grandes cantidades de calor latente durante su cambio de fase sólido-líquido (Regin et al., 2008). La simulación precisa de los procesos de transferencia de calor durante el cambio de fase es crucial para caracterizar el rendimiento de los sistemas de almacenamiento de energía térmica (TES). El proceso dinámico de cambio de fase presenta un desafío complejo, ya que requiere resolver problemas de transferencia de calor transitorio notablemente no lineales. La pronunciada no linealidad se atribuye principalmente a la liberación y absorción de calor latente durante los procesos de solidificación y fusión.

La formulación mixta de temperatura-entalpía es actualmente la más precisa y eficiente para resolver problemas de conducción de calor transitorio con cambio de fase sólido-líquido (Hostos et al., 2023). La implementación sencilla ha permitido lograr una excelente convergencia para la solución numérica de problemas de cambio de fase sólido-líquido. La técnica demostró un excelente acuerdo con las soluciones exactas en la distribución de temperatura y la ubicación de las isoterms de sólido/líquido en problemas de referencia unidimensionales. La formulación mixta de temperatura-entalpía está diseñada para incorporar tanto el calor sensible como el calor latente del cambio de fase en un vector global de entalpía, lo que es eficiente computacionalmente (Hostos et al., 2023). Aunque esta formulación implica dos variables de estado como incógnitas, la dependencia explícita de la entalpía con respecto a la temperatura permite una solución completamente basada en la temperatura de tal sistema de ecuaciones. La solución a este problema no lineal se logra utilizando procedimientos iterativos basados en derivadas, como el método Newton-Rapson (NR) (Saad et al., 2015).

Sin embargo, el problema se vuelve más complejo cuando los materiales de cambio de fase que experimentan fenómenos de histéresis o superenfriamiento (Goia et al., 2018). La histéresis de cambio de fase hace que los procesos de fusión y solidificación no sigan la misma curva  $H(T)$ , es decir, no existe una simple correspondencia biyectiva de la entalpía con la temperatura. La histéresis térmica se define como un retraso en el cambio de fase durante el proceso de enfriamiento, lo que provoca que la solidificación comience a una temperatura más baja que la temperatura a la que termina la fusión (Bony y Citherlet, 2007).

En la última década, ha habido varios artículos de investigación y trabajos enfocados en la modelización computacional de la histéresis del cambio de fase (Klimeš et al., 2020). La mayoría de estos modelos de cambio de fase se centran meramente en representaciones matemáticas de las dos curvas  $H(T)$  para escenarios con cambio de fase completo. La modelización computacional de tales casos es relativamente fácil y sin desafíos, ya que alterna entre las dos curvas  $H(T)$  en puntos fuera del rango de cambio de fase donde las curvas  $H(T)$  coinciden. La situación es mucho más complicada y ambigua en casos con cambio de fase parcial (incompleto), es decir, cuando la transición de fase de un estado a otro se interrumpe antes de completarse. Por ejemplo, cuando la fusión se interrumpe durante el cambio de fase y es seguida por un enfriamiento de regreso al estado inicial. El principal desafío en estos escenarios radica en formular un enfoque que permita transiciones entre las curvas de calentamiento y enfriamiento manteniendo la consistencia física.

Barz y Sommer (2018) llevaron a cabo un estudio completo, riguroso y relevante de estrategias de modelización para la histéresis del cambio de fase en PCMs. El comportamiento de estos materiales se formula en términos de la fracción líquida  $\xi \in [0,1]$ , que se relaciona con la fracción sólida  $\eta$  como  $\xi = 1 - \eta$ . La fracción líquida se utiliza como un parámetro característico que describe el estado del PCM. De todos los métodos formulados y discutidos por Barz y Sommer (2018), el modelo de histéresis estática (SHM), ofrece un compromiso prometedor entre la

robustez física y la aplicabilidad práctica, considerando su facilidad de parametrización e implementación. El SHM se formula considerando que la fracción líquida  $\xi$  es una función de la temperatura y el signo de la tasa de temperatura, pero no de su magnitud.

Aunque el SHM proporciona una formulación matemática con base física sólida sobre la cuantificación de la histéresis de cambio de fase, aún no existen enfoques numéricos bien establecidos para modelar rigurosamente tales efectos dependientes del camino. En este sentido, hay una notable falta de estudios detallados sobre la solución numérica de problemas macroscópicos de conducción de calor transitorio sujetos a las no linealidades inherentes en este modelo de histéresis. Los desafíos de lograr estabilidad y convergencia óptima durante la solución iterativa de las no linealidades en casos que involucran histéresis de cambio de fase siguen siendo un problema abierto. Principalmente para procesos que involucran cambios de fase parciales, los cuales representan un aspecto crítico que impacta en una variedad de aplicaciones.

En este contexto, este trabajo presenta una aplicación sin precedentes del método de elementos finitos (FEM) bajo una formulación mixta de entalpía-temperatura para la solución numérica de problemas de conducción de calor transitorio que involucran histéresis en procesos de cambio de fase sólido-líquido, tanto en transiciones de fase completas como incompletas. Se propone un nuevo enfoque regularizado para implementar el algoritmo del SHM en la formulación basada en FEM, permitiendo una transición continua entre ciclos de calentamiento y enfriamiento mientras se mantiene la consistencia física. El esquema numérico propuesto facilita la aplicación de métodos iterativos como el NR para resolver el sistema de ecuaciones resultante, asegurando estabilidad y convergencia durante la resolución de los sistemas de ecuaciones no lineales. La efectividad del método se demuestra mediante resolución de un problema de referencia unidimensional.

## Desarrollo

En este trabajo, se aborda la formulación y resolución de problemas de conducción de calor transitoria en un dominio incomprensible utilizando una formulación mixta de entalpía-temperatura. La formulación se basa en el balance de energía interna dada por:

$$\rho \frac{\partial H}{\partial t} = \nabla \cdot (k \nabla T)$$

Las condiciones del problema incluyen una condición inicial en la que la temperatura es constante en todo el dominio al inicio del análisis y las siguientes condiciones en las fronteras del dominio:

$$\begin{aligned} T &= T_0 \quad \text{en } t = 0 \\ T &= T_D \\ -k \nabla T \cdot \hat{n} &= q_0 \end{aligned}$$

La relación entre la entalpía específica  $H$  y la temperatura  $T$  se define a través de la capacidad calorífica específica  $c_p$  y el calor latente de fusión  $H_f$ , teniendo en cuenta la fracción de volumen líquido  $\xi$  del material. Esta fracción cambia con la temperatura desde un estado sólido completo a un estado completamente líquido a lo largo de un rango de temperatura.

$$H(T) = \int_{T_{ref}}^T c_p dT + \xi H_f$$

Las propiedades térmicas como la capacidad calorífica, la conductividad térmica y la densidad se calculan utilizando una mezcla ponderada de las propiedades de las fases sólida y líquida del material, ajustando las propiedades según la fracción líquida (Hostos et al., 2017).

Las transiciones entre las fases deben ser realistas y acordes al comportamiento observado en los ensayos experimentales, lo cual es crucial para la conservación de masa y energía durante el modelado de histéresis. En este sentido el modelo de histéresis estática cumple con estos requisitos y además es fácil de parametrizar e

implementar computacionalmente. El algoritmo de histéresis estática está dado por las siguientes ecuaciones (Barz y Sommer, 2018):

$$\xi(T^{t+\Delta t}) = 1 - \frac{1 - \xi(T^t)}{1 - \xi_{heat}(T^t)} [1 - \xi_{heat}(T^{t+\Delta t})] \quad \text{para } \frac{\partial T}{\partial t} \geq 0$$

$$\xi(T^{t+\Delta t}) = \frac{\xi(T^t)}{\xi_{cool}(T^t)} \xi_{cool}(T^{t+\Delta t}) \quad \text{para } \frac{\partial T}{\partial t} \leq 0$$

Donde  $\xi_{heat}$  y  $\xi_{cool}$  representan las funciones que definen la fracción líquida para fusión y solidificación completa, respectivamente. Como se puede observar la fracción de fase líquida depende tanto de la temperatura actual como del estado para la temperatura anterior y del signo de la tasa de temperatura (calentamiento o enfriamiento), es decir depende del historial térmico del material.

Para modelar la transición de fase, se emplea un enfoque suavizado basado en funciones de transición que permiten una transición continua entre los estados sólido y líquido durante ciclos de calentamiento y enfriamiento. Esto se realiza mediante una aproximación de la función escalón de Heaviside, que permite modelar la transición de fase entre el estado sólido y el líquido. La transición suave proporcionada por esta aproximación asegura que los efectos de la fase cambiante se reflejen de manera más precisa en la simulación, minimizando problemas asociados con transiciones abruptas y mejorando la estabilidad del modelo.

Finalmente, se utiliza un método de elementos finitos para resolver la formulación, aplicando técnicas iterativas para obtener la solución de temperatura en cada paso de tiempo. La precisión y estabilidad del método se aseguran mediante un criterio de convergencia que evalúa el error en los parámetros nodales de temperatura. La solución del sistema de ecuaciones no lineales se logra utilizando procedimientos iterativos basados en derivadas, como el NR.

La efectividad del método numérico propuesto se evalúa mediante aplicación a un problema de referencia unidimensional (Feng et al., 2022), que ha sido abordado por otros autores tanto numéricamente como experimentalmente (Goia et al, 2018). El problema unidimensional involucra una pared multicapa, similar a un panel tipo sándwich, que comprende dos capas de placas de yeso, dos capas de policarbonato y una capa de PCM en el medio. Las características físicas de cada capa se indican en la Tabla 1. El PCM es un producto disponible comercialmente de Rubitherm llamado "SP 26 E".

Material	d [mm]	$\rho$ [kg/m <sup>3</sup> ]	cp [J/(kg·K)]	k [W/(m·K)]
Placa de yeso	12.5	720	1090	0.19
Policarbonato	0.5	1200	1200	0.20
Capa de PCM	9.0	1450	2000	0.50
Policarbonato	0.5	1200	1200	0.20
Placa de yeso	12.5	720	1090	0.19

Tabla 1: Propiedades termofísicas de cada material de la pared multicapa.

Inicialmente, toda la pared se encuentra a una temperatura uniforme de  $T_0$ . La superficie inferior de la pared se mantiene constantemente a 26°C, mientras que en la superficie superior se impone una variación de temperatura sinusoidal periódica. Esta variación tiene un valor promedio de 26°C y una amplitud que varía según los dos casos analizados: un escenario de cambio de fase completo con una amplitud de  $\pm 12^\circ\text{C}$ , y un escenario de cambio de fase incompleto con una amplitud de  $\pm 6^\circ\text{C}$ . Además, ambos escenarios tienen un período de 24 horas. Es importante destacar que se considera un período inicial de 12 horas, durante el cual la solución depende de la temperatura inicial; este período se descarta para el proceso de validación de la solución.

## Resultados

Las soluciones numéricas basadas en derivadas obtenidas mediante la formulación mixta temperatura-entalpía propuesta se comparand con las soluciones del modelo de histéresis transicional de dos fases implementado por Feng et al. (2022) en el software de simulación energética de edificios (BES) EnergyPlus, como

se ilustra en las Figuras 2 y 3 para cambios de fase completos e incompletos, respectivamente. En las Figuras 4 y 5 se puede observar el comportamiento del SHM para los casos analizados. Las curvas que definen la fracción líquida para fusión  $\xi_{heat}$  y solidificación  $\xi_{cool}$  completa se muestran en color rojo y azul, respectivamente. Cabe destacar que el modelo de histéresis transicional de dos fases se basa en el SHM, reemplazando el método estándar de cálculo de transición de fase en este software, y utiliza un método de diferencias finitas implícito con funciones auxiliares de entalpía-temperatura para representar el proceso de transición de fase. Este método se basa en un enfoque de calor específico efectivo/aparente y tiene problemas de estabilidad. En contraste, el esquema numérico propuesto en esta comunicación bajo una formulación mixta de entalpía-temperatura es numéricamente estable y logra tasas de convergencia super-lineales durante la solución iterativa de las no linealidades debido a los efectos de histéresis y calor latente.

Los resultados numéricos basados en derivadas muestran una alta consistencia con las soluciones del modelo de histéresis bifásico, tanto en cambios de fase completos como incompletos. Esta coincidencia indica que el método propuesto captura adecuadamente la física del cambio de fase y es una alternativa fiable a los métodos existentes. Además, la formulación mixta temperatura-entalpía presenta ventajas numéricas y computacionales, destacando por su estabilidad y convergencia, lo que la hace eficiente para manejar las no linealidades del SHM bajo un procedimiento NR, incluso con pasos de tiempo grandes.

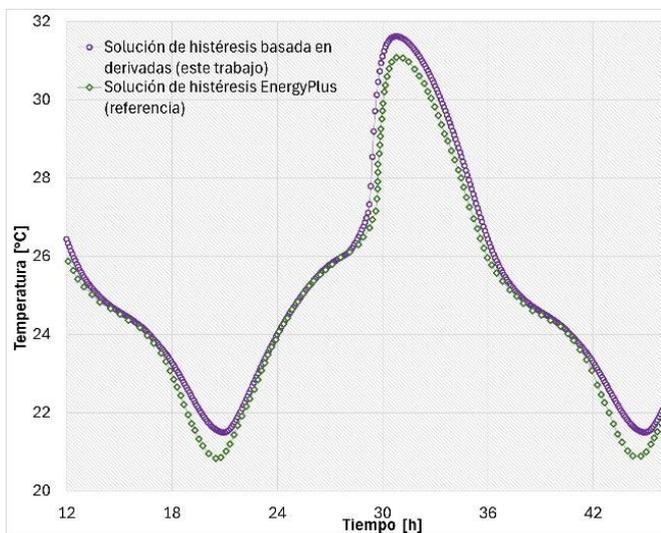


Figura 2. Comparación entre solución de histéresis actual y solución de referencia para cambio de fase completo.

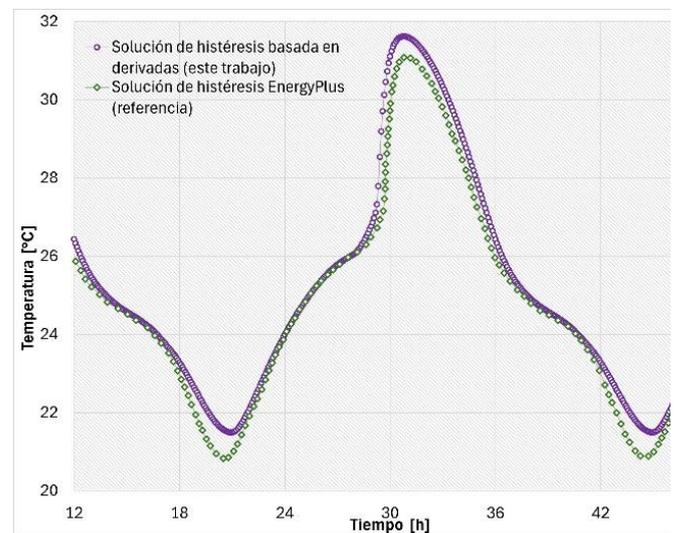


Figura 3. Comparación entre solución de histéresis actual y solución de referencia para cambio de fase incompleto.

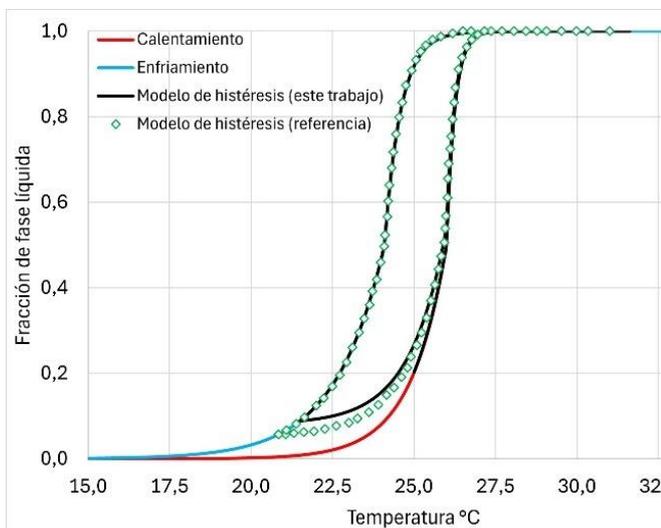


Figura 4. Comportamiento del SHM para solución actual y solución de referencia para cambio de fase completo.

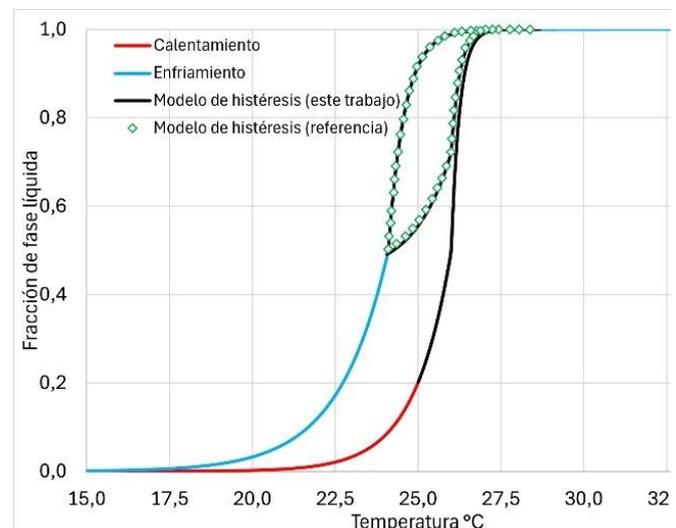


Figura 5. Comportamiento del SHM para solución actual y solución de referencia para cambio de fase incompleto.

## Conclusiones

Los resultados presentados en este trabajo demuestran la efectividad del enfoque numérico basado en el FEM bajo una formulación mixta temperatura-entalpía para problemas de conducción de calor transitorios que involucran cambio de fase sólido-líquido con histéresis, incluyendo escenarios con transiciones completas e incompletas. El enfoque regularizado para incorporar el modelo de histéresis estática (SHM) en la formulación basada en FEM asegura una transición continua y suave entre los ciclos de calentamiento y enfriamiento, permitiendo soluciones precisas de las pronunciadas no linealidades inherentes a este modelo bajo un esquema Newton-Rapson (NR). La efectividad del método numérico se comprueba mediante la resolución de un problema de referencia unidimensional, demostrando que es una herramienta numérica valiosa para aplicaciones prácticas como el diseño y optimización de sistemas de almacenamiento de energía térmica (TES).

## Referencias

- Álvarez-Hostos, J. C., Puchi Cabrera, E. S., & Bencomo, A. (2017). A pseudo-transient heat transfer simulation of a continuous casting process, employing the element-free Galerkin method. *International Journal of Cast Metals Research*, 31(1), 47–55. doi: 10.1080/13640461.2017.1366002
- Álvarez-Hostos, J. C., Puchi Cabrera, E. S., & Bencomo, A. (2023). Solving heat conduction problems in the start-up stage of direct chill casting processes via a temperature-enthalpy mixed formulation based on the improved element-free Galerkin method. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 212, 124231. doi: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2023.124231
- Barz, T., & Sommer, A. (2018). Modeling hysteresis in the phase transition of industrial-grade solid/liquid PCM for thermal energy storages. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 127, 701–713. doi: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2018.08.032
- Bony, J., & Citherlet, S. (2007). Numerical model and experimental validation of heat storage with phase change materials. *Energy and Buildings*, 39(10), 1065–1072. doi: 10.1016/j.enbuild.2006.10.017
- EnergyPlus Development Team. (2024). EnergyPlus, Version 24.1.0. [Software]. Department of Energy (or relevant publisher). Retrieved from <https://energyplus.net/documentation>
- Feng, F., Li, Y., Gong, J., Wang, J., & Xu, D. (2022). Enhancement of phase change material hysteresis model: A case study of modeling building envelope in EnergyPlus. *Energy and Buildings*, 276, 112511. doi: 10.1016/j.enbuild.2022.112511
- Goia, F., Chaudhary, G., & Fantucci, S. (2018). Modelling and experimental validation of an algorithm for simulation of hysteresis effects in phase change materials for building components. *Energy and Buildings*, 174, 54–67. <https://doi.org/10.1016/j.enbuild.2018.06.001>
- Klimeš, L., Černý, M., & Svoboda, Z. (2020). Computer modelling and experimental investigation of phase change hysteresis of PCMs: The state-of-the-art review. *Applied Energy*, 263, 114572. doi: 10.1016/j.apenergy.2020.114572
- Regin, F. S., Solanki, S. C., & Saini, J. S. (2008). Heat transfer characteristics of thermal energy storage system using PCM capsules: A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 12(9), 2438–2458. doi: 10.1016/j.rser.2007.06.009
- Saad, A., Gandin, C.-A., & Bellet, M. (2015). Temperature-based energy solver coupled with tabulated thermodynamic properties: Application to the prediction of macrosegregation in multicomponent alloys. *Computational Materials Science*, 99, 221–231. doi: 10.1016/j.commatsci.2014.12.009