

• U • C •

FCTUC FACULDADE DE CIÊNCIAS  
E TECNOLOGIA  
UNIVERSIDADE DE COIMBRA

DEPARTAMENTO DE  
ENGENHARIA MECÂNICA

# **Análise comparativa de diferentes métodos para a modelação numérica do comportamento de materiais de mudança de fase (PCMs) microencapsulados**

Dissertação apresentada para a obtenção do grau de Mestre em Engenharia Mecânica na Especialidade de Energia e Ambiente.

## **Evaluation of different methods for the numerical modelling of microencapsulated phase change materials (PCMs)**

Autor

**André Alves Martins Luzio**

Orientadores

**Professor Doutor José Joaquim da Costa**

**Professor Doutor Nelson Miguel Lopes Soares**

Júri

**Presidente** Professor Doutor Adélio Manuel Rodrigues Gaspar  
Professor Auxiliar da Universidade de Coimbra  
Professor Doutor António Manuel Mendes Raimundo  
Professor Auxiliar da Universidade de Coimbra

**Orientador** Professor Doutor José Joaquim da Costa  
Professor Auxiliar da Universidade de Coimbra

---

**Coimbra, Fevereiro, 2018**



## Agradecimentos

O trabalho que aqui se apresenta só foi possível graças à colaboração e apoio de algumas pessoas, às quais não posso deixar de prestar o meu reconhecimento.

Agradeço em primeiro lugar ao Professor Doutor José Joaquim da Costa e ao Professor Doutor Nelson Miguel Lopes Soares, pela constante disponibilidade, incentivo e espírito crítico, o meu muito obrigado.

Aos meus pais e irmãos, pelo apoio, paciência, pela força que me deram para ultrapassar todos os obstáculos e por todos os valores que me transmitiram.

Por fim, agradeço também aos meus amigos pelos momentos partilhados durante este percurso académico.

Esta tese foi desenvolvida no âmbito do projeto "*PCMs4Buildings - Sistemas com cavidades retangulares com materiais de mudança de fase para o aproveitamento de energia solar térmica em edifícios*", refs. POCI-01-0145-FEDER-016750 | PTDC/EMS-ENE/6079/2014, cofinanciado por Fundos FEDER através do Programa Operacional Competitividade e Internacionalização - COMPETE 2020 e por Fundos Nacionais através da FCT - Fundação para a Ciência e a Tecnologia.





---

## Resumo

O objetivo principal deste trabalho consiste no desenvolvimento de modelos numéricos bidimensionais baseados no *método do termo-fonte* e no *método da capacidade calorífica efetiva*. Os modelos desenvolvidos visam simular o comportamento térmico de um material de mudança de fase (PCM) microencapsulado - Micronal® DS 5001 X. São avaliadas três formas distintas para especificar a evolução da capacidade calorífica equivalente durante a mudança de fase sólido-líquido: os perfis triangular e retangular, e o perfil do calor específico equivalente obtido experimentalmente. Para efeitos de validação, os resultados numéricos são comparados com os dados experimentais obtidos anteriormente por Soares *et al.* [1,2].

A formulação do perfil triangular usado por Antunes [3] é desenvolvida e aperfeiçoada, com dois objetivos principais: (i) eliminar o déficit de energia global armazenada registado em [3] e (ii) ajustar-se naturalmente às características termofísicas, generalizando a sua aplicação a diferentes PCMs. Este novo perfil, designado por triangular ajustado, revelou ser o mais eficaz, mostrando uma boa concordância com os resultados experimentais.

Assumiu-se um modelo numérico puramente difusivo, em regime transiente, onde a condução é o único mecanismo de transferência de calor durante a mudança de fase. O PCM é usado para preencher as cavidades de secção retangular de uma unidade de armazenamento de energia (UAE) térmica em alumínio. São consideradas três configurações diferentes para a UAE, de forma a avaliar a influência do número de alhetas de alumínio no seio do PCM. Para tal, calcula-se o tempo de fusão/solidificação, assim como a energia armazenada/restituída pelo PCM para as diferentes configurações.

No que diz respeito à fase de aquecimento, verificou-se que os tempos de fusão do PCM para as UAE com 1 e 5 cavidades são relativamente próximos dos obtidos experimentalmente. Para a fase de arrefecimento, o tempo de solidificação altera-se de acordo com o número de alhetas incorporadas, reduzindo o seu valor com o aumento do número de alhetas.

De um modo geral, os resultados numéricos obtidos estão em boa concordância com os resultados obtidos experimentalmente por Soares *et al.* [1,2].

**Palavras-chave:** Materiais de mudança de fase; PCM; Modelação numérica; Método da capacidade calorífica efetiva; Método do termo-fonte.



## Abstract

This work aims to develop two-dimensional numerical models based on the *additional heat source method* and the *effective heat capacity method* to simulate the thermal behaviour of a microencapsulated phase change material (PCM) - Micronal® DS 5001 X. Three different ways are evaluated to specify the evolution of the equivalent heat capacity during the solid-liquid phase change: triangular and rectangular profiles, and also the specific heat as a function of temperature, obtained experimentally. For the validation purposes, the numerical results are compared with previous experimental results obtained by Soares *et al.* [1,2].

The formulation of the triangular profile presented by Antunes [3] developed and improved, with the purposes of (i) correcting the deficit of total energy stored/released reported in [3] and (ii) generalizing its application to different materials, by natural adjustment to the thermophysical characteristics of the PCM. This new formulation, designated as triangular adjusted profile, proved to be the most effective method showing greater agreement with the experimental results.

A purely diffusive, transient model was used, where conduction is the only heat transfer mechanism during phase change. The PCM is used to fill the rectangular cavities of an aluminum made thermal energy storage (TES) unit. Three different configurations were evaluated for the TES unit, in order to assess the influence of the number of aluminum fins in the PCM bulk, by calculating the melt/solidification time as well as the energy stored/released by the PCM for the different configurations.

Regarding the heating phase, it was found that the melting time for the TES units with 1 and 5 cavities is relatively agrees well with the experimental results. For the cooling phase, the solidification time changes according to the number of fins incorporated, decreasing with the increase of the number of fins.

In general, the numerical results obtained are in good agreement with the results obtained experimentally by Soares *et al.* [1,2].

**Keywords** Phase Change Materials; PCM; Numerical modelling; Effective heat capacity method; Additional heat source method.



## Índice

Índice de Figuras .....	ix
Índice de tabelas .....	xiii
Simbologia e Siglas .....	xv
Simbologia.....	xv
Siglas .....	xvii
1. INTRODUÇÃO.....	1
1.1. Enquadramento .....	1
1.1.1. Motivação e objetivos.....	3
1.1.2. Estrutura da tese.....	4
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	5
2.1. PCMs .....	5
2.2. Classificação .....	5
2.3. Propriedades termofísicas .....	6
2.4. Encapsulamento .....	7
2.5. Corrosão nos PCMs .....	8
2.6. Estudos numéricos e experimentais anteriores .....	8
3. DESCRIÇÃO DO MODELO NUMÉRICO .....	15
3.1. Problema físico .....	15
3.2. Modelo físico .....	16
3.3. Modelo matemático .....	18
3.4. Método da capacidade calorífica efetiva.....	19
3.4.1. Perfil triangular ajustado .....	20
3.4.2. Perfil quadrangular .....	22
3.5. Método do termo-fonte .....	23
3.6. Método do <i>Reverse Cp</i> .....	24
3.7. Fração fundida .....	25
3.7.1. Método da capacidade calorífica efetiva e método do termo-fonte.....	25
3.7.2. Método experimental.....	26
3.8. Fluxograma .....	27
3.9. Convergência .....	28
4. VALIDAÇÃO DO MODELO NUMÉRICO .....	29
4.1. Resultados experimentais usados na validação .....	29
4.2. Propriedades Termofísicas do PCM .....	30
4.3. Discretização.....	31
4.3.1. Discretização espacial.....	32
4.3.2. Discretização temporal .....	35
4.3.3. Escolha da malha e da discretização temporal .....	37
4.4. Comparação dos métodos .....	37
4.5. Influência da densidade e dos valores de $\Delta T_1$ e $\Delta T_2$ .....	38
4.6. Comparação com resultados antigos.....	41
5. RESULTADOS E DISCUSSÃO .....	43
5.1. Monitorização do domínio 2D .....	43

5.2. UAE com uma só cavidade.....	44
5.2.1. Fase de carga .....	44
5.2.2. Fase de descarga .....	47
5.3. UAE com 5 e 15 cavidades.....	49
5.3.1. Fase de carga .....	49
5.3.2. Fase de descarga .....	53
5.4. Energia armazenada/restituída.....	56
6. CONCLUSÃO.....	59
6.1. Notas conclusivas .....	59
6.2. Trabalhos futuros .....	60
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....	61

## ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1.1 - Representação esquemática do funcionamento dos PCMs -com a variação da temperatura (adaptado da ref. [8]).	2
Figura 2.1 - Evolução da temperatura de um PCM durante os ciclos de carga (fusão) e de descarga (solidificação) (Adaptado de [8]).	5
Figura 2.2 – (a) PCM Micronal® DS 5001 X. (b) Exemplo de um contentor metálico onde será incorporado o PCM. (Adaptado da ref. [23]).	7
Figura 2.3 – Representação do fenómeno de subarrefecimento: (a) sem histerese; (b) com histerese. (Adaptado da ref. [8]).	9
Figura 2.4 – (a) Representação da distribuição dos termopares na UAE. (b) Variação temporal da temperatura para os diferentes pontos de monitorização: (b) sem alhetas; (c) com espaçamento entre alhetas de 4mm. (Adaptado de [18]).	12
Figura 3.1 - Representação esquemática dos três arranjos da UAE considerados: (a) 1 cavidade; (b) 5cavidades; (c) 15 caviades. (Adaptado da ref. [1]).	15
Figura 3.2. - Modelo físico considerado para a UAE com uma só cavidade retangular: dimensões, coordenadas, nodos relevantes, de condições de fronteira (ver Tabela 3.1).	16
Figura 3.3. – Modelo físico da UAE com 5 cavidades retangulares: dimensões, coordenadas, nodos relevantes.	17
Figura 3.4.- Representação esquemática do <i>método da capacidade calorífica efetiva</i> com diferentes perfis: (a) quadrangular; (b) triangular.	20
Figura 3.5 – Representação esquemática do perfil triangular ajustado.	21
Figura 3.6 – Evolução da condutibilidade térmica de acordo com a temperatura.	24
Figura 3.7 – Representação da curva do <i>Reverse Cp</i> em função da temperatura para a fase de carga e descarga.	25
Figura 3.8 – Representação da evolução da fração fundida com a temperatura, para os métodos da capacidade calorífica efetiva e do termo-fonte.	26
Figura 3.9 – Fluxograma do programa.	28
Figura 4.1. – Representação esquemática do ensaio experimental realizado por Soares <i>et al.</i> [1].	29
Figura 4.2 - Domínio do modelo 1D considerado para os testes de discretização espacial e temporal.	32
Figura 4.3 – Representação temporal da evolução da temperatura no local do $T_5$ e do Erro Relativo para diferentes malhas - <i>método do termo-fonte</i> .	33
Figura 4.4 – Representação temporal da evolução da temperatura no local do $T_5$ e do Erro Relativo para diferentes malhas – <i>perfil triangular ajustado do método da capacidade calorífica efetiva</i> .	34

Figura 4.5 – Representação temporal da evolução da temperatura no local do $T_5$ e do Erro Relativo para diferentes malhas - método do <i>Reverse Cp</i> .....	34
Figura 4.6 – Representação temporal da evolução da temperatura no local $T_5$ e do Erro Relativo para diferentes $\Delta t$ - método do <i>termo-fonte</i> . ....	36
Figura 4.7 – Representação temporal da evolução da temperatura no local do $T_5$ e do Erro Relativo para diferentes $\Delta t$ – perfil triangular ajustado do método da <i>capacidade calorífica efetiva</i> .....	36
Figura 4.8 – Representação temporal da evolução da temperatura no local do $T_5$ e do Erro Relativo para diferentes $\Delta t$ – método do <i>Reverse Cp</i> .....	37
Figura 4.9 – Análise da evolução da temperatura em $T_5$ ao longo do tempo para os diferentes métodos.....	38
Figura 4.10 – Cálculo da massa volúmica presente numa UAE com 5 cavidades (adaptado da ref. [23])......	39
Figura 4.11 – Estudo da influência de $\Delta T_1$ e $\Delta T_2$ no perfil triangular ajustado do método da <i>capacidade calorífica efetiva</i> . ....	40
Figura 4.12 – Estudo da influência da densidade do PCM para $\Delta T_1 = 7\text{ }^\circ\text{C}$ e $\Delta T_2 = 2\text{ }^\circ\text{C}$ - método da <i>capacidade calorífica efetiva</i> com perfil triangular ajustado. ....	40
Figura 4.13 – Comparação dos resultados numéricos obtidos considerando diferentes perfis na implementação do método da <i>capacidade calorífica efetiva</i> .. ....	41
Figura 5.1 – Representação esquemática da localização dos pontos de monitorização da temperatura e da potência calculada.....	43
Figura 5.2 – Evolução temporal da temperatura obtida numérica e experimentalmente na UAE de uma só cavidade, durante a fase de aquecimento com uma potência de 34 W, considerando uma densidade de $489\text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ . Em baixo encontra-se a evolução temporal da <i>FF</i> total de PCM.....	45
Figura 5.3 – Evolução temporal da temperatura obtida numérica e experimentalmente na UAE de uma só cavidade, durante a fase de aquecimento com uma potência de 34 W, considerando uma densidade de $538\text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ . Em baixo encontra-se a evolução temporal da <i>FF</i> total de PCM.....	45
Figura 5.4 – Distribuição da temperatura em $^\circ\text{C}$ aos 600, 2400, 3000, 4200 e 6000 segundos. ....	46
Figura 5.5 – Distribuição da <i>FF</i> de PCM aos 600, 2400, 3000, 4200 e 6000 segundos. ....	46
Figura 5.6 - Evolução temporal da temperatura obtida numérica e experimentalmente na UAE de uma só cavidade, durante a fase de descarga a uma temperatura de $14\text{ }^\circ\text{C}$ . No eixo secundário encontra-se o <i>ER</i> de $T_{3num}$ . Em baixo é representada a evolução da <i>FF</i> de PCM.....	47
Figura 5.7 – Distribuição da temperatura em $^\circ\text{C}$ aos 1500, 3000, 9000, 12000 e 18000 segundos. ....	48
Figura 5.8 – Distribuição da <i>FF</i> de PCM aos 1500, 3000, 9000, 12000 e 18000 segundos. ....	48

---

Figura 5.9 – Evolução temporal da temperatura obtida numerica e experimentalmente para uma UAE com 5 cavidades,durante a fase de carga com uma potência de 34 W. No eixo secundário, à direita, encontra-se o $ER$ de $T_{3num}$ .....	49
Figura 5.10 – Comparação da evolução temporal de $T_{3num}$ obtida numericamente para UAE com 1 e 5 cavidades durante a fase de carga a 34 W. No eixo secundário apresenta-se a evolução da $FF$ de PCM para as diferentes UAE.....	50
Figura 5.11 – Evolução temporal da temperatura obtida numerica e experimentalmente para uma UAE com 15 cavidades,durante a fase de carga com uma potência de 34 W. No eixo secundário, à direita, encontra-se o $ER$ de $T_{3num}$ .....	50
Figura 5.12 – Comparação da evolução temporal de $T_{3num}$ obtida numericamente para UAE com 1, 5 e 15 cavidades durante a fase de carga a 34 W. No eixo secundário apresenta-se a evolução da $FF$ de PCM para as diferentes cavidades. ....	51
Figura 5.13 – Distribuição da temperatura em °C aos 600, 1800, 3000 e 4800 segundos para a UAE com 5 e 15 cavidades.....	52
Figura 5.14 – Distribuição da $FF$ de PCM aos 600, 1800, 3000 e 4800 segundos para a UAE com 5 e 15 cavidades. ....	52
Figura 5.15 – Evolução temporal da temperatura obtida numerica e experimentalmente para uma UAE com 5 cavidades,durante a fase descarga a uma temperatura de 14 °C. No eixo secundário, à direita, encontra-se o $ER$ de $T_{3num}$ . ....	53
Figura 5.16 – Evolução temporal da temperatura obtida numerica e experimentalmente para uma UAE com 15 cavidades,durante a fase descarga a uma temperatura de 14 °C. No eixo secundário, à direita, encontra-se o $ER$ de $T_{3num}$ . ....	54
Figura 5.17 – Comparação da evolução temporal de $T_{3num}$ obtida numericamente para UAE com 1, 5 e 15 cavidades durante a fase de descarga a 14 °C. No eixo secundário apresenta-se a evolução da $FF$ de PCM para as diferentes cavidades. ....	55
Figura 5.18 – Distribuição da temperatura em °C e da $FF$ de PCM para a UAE com 5 e 15 cavidades. ....	55



---

## ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 2.1 – Vantagens e desvantagens de diferentes tipos de PCM (adaptado da ref. [4]).	6
Tabela 3.1. – Condições de fronteira impostas no modelo numérico.....	17
Tabela 4.1. - Propriedades termofísicas do PCM Micronal® DS 5001X, medidas experimentalmente. ....	31
Tabela 4.2. - Propriedades do Alumínio.....	31
Tabela 4.3. – Comparação dos valores de energia teórica armazenada com os valores obtidos numericamente e <i>ER</i> de temperatura e energia para os diferentes perfis.	42
Tabela 5.1 - Comparação dos valores da energia teórica armazenada/restituída com os valores obtido numericamente, tempos de fusão/solidificação do PCM, para as diferentes UAE. ....	57



## SIMBOLOGIA E SIGLAS

### Simbologia

$C$  – Capacidade calorífica equivalente [ $\text{J.m}^{-3}.\text{°C}^{-1}$ ]

$c_p$  – Calor específico [ $\text{J.kg}^{-1}.\text{°C}^{-1}$ ]

$DX$  – Distância entre os nodos [m]

$E$  – Energia [J]

$ER$  – Erro Relativo [%]

$FF$  - Fração fundida de PCM [-]

$ff$  – Fração fundida de PCM durante o processo de fusão [-]

$fs$  – Fração fundida de PCM durante o processo de solidificação [-]

$H$  – Entalpia específica [ $\text{kJ.kg}^{-1}$ ]

$k$  – Condutibilidade térmica [ $\text{W.m}^{-1}.\text{°C}^{-1}$ ]

$L$  – Calor latente de fusão [ $\text{kJ.kg}^{-1}$ ]

$Nu$  – Número de Nusselt [-]

$Ra$  – Número de Rayleigh [-]

$P$  – Potência [W]

$P_1$  – Potência fornecida ao PCM na interface adjacente ao nodo  $IPCM1$  [W]

$P_2$  – Potência fornecida ao PCM na interface adjacente ao nodo  $IPCM2$  [W]

$P_{TOT}$  – Potência térmica total na interface PCM-Alumínio [W]

$T$  – Temperatura [°C]

$T_i$  – Temperatura medida experimentalmente,  $i \in \{1, \dots, 5\}$  [°C]

$T_{inum}$  – Temperatura obtida numericamente,  $inum \in \{1, \dots, 5\}$  [°C]

$T_{inicio}$  – Temperatura inicial no domínio de PCM [°C]

$T_{final}$  – Temperatura final no domínio de PCM [°C]

$T_f$  – Temperatura de fusão [°C]

$T_s$  – Temperatura de solidificação [°C]

$TC$  – Temperatura de fronteira fria [°C]

$TH$  – Temperatura de fronteira quente [°C]

$t$  - Tempo [s]

$V$  – Volume [ $\text{m}^{-3}$ ]

$\Delta t$  – Intervalo de tempo [s]

$\Delta T_f$  - Intervalo de temperaturas em que ocorre a fusão do PCM [°C]

$\Delta T_{hist}$  – Diferença entre as temperaturas de fusão e solidificação do PCM [°C]

$\Delta T_s$  - Intervalo de temperaturas em que ocorre a solidificação do PCM [°C]

$\rho$  – Massa volúmica [kg.m<sup>-3</sup>]

## Siglas

1D – Unidimensional

2D – Bidimensional

DEM – Departamento de Engenharia Mecânica

DEQ – Departamento de Engenharia Química

DSC – Differential Scanning Calorimetry

FCTUC – Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade de Coimbra

GEE – Gases de Efeito de Estufa

MCCE – Método da Capacidade Calorífica Efetiva

MTF – Método do Termo-Fonte

NiCr – Níquel Crómio

PCM – *Phase Change Material* (Material de mudança de fase)

TES – *Thermal Energy Storage*

TDMA - *Tri-Diagonal Matrix Algorithm*

TPS - *Transient Plane Source*

UAE – Unidade de Armazenamento de Energia

UC – Universidade de Coimbra

VC – Volume de Controlo



# 1. INTRODUÇÃO

Ao longo deste capítulo será apresentada uma breve contextualização do trabalho realizado, nomeadamente os principais objetivos e a estrutura da tese. É efetuada uma revisão de alguns artigos publicados a nível nacional e internacional, no âmbito dos materiais de mudança de fase (PCMs, do inglês *Phase Change Materials*) e da sua aplicação em unidades de armazenamento de energia (UAE) térmica.

## 1.1. Enquadramento

O consumo de energia a nível mundial tem vindo a aumentar significativamente, originando a escassez de muitas fontes de energia não-renovável. Existe a necessidade crescente de potenciar o uso de fontes de energia renováveis, para reduzir o consumo excessivo dos combustíveis fósseis e de outras fontes de energia não renováveis [4,5], e consequentemente reduzir as emissões de gases de efeito de estufa (GEE) que muito contribuem para as alterações climáticas.

Kalnæs *et al.* [4] propõem o uso de PCMs nos edifícios, para armazenar a energia solar incidente nos mesmos. Este armazenamento de energia térmica não só ajuda a reduzir o desfasamento entre a oferta e procura de novos recursos, como também poderá melhorar a *performance* dos sistemas energéticos, tendo assim um papel importante na conservação de energia [6]. A integração dos PCMs em edifícios permite melhorar o seu comportamento térmico e aumentar a sua eficiência energética, devido ao elevado calor latente envolvido nos processos de mudança de fase sólido-líquido destes materiais (a uma temperatura aproximadamente constante). Assim, será possível melhorar a capacidade térmica do edifício, reduzir a amplitude térmica da temperatura interior e diminuir as necessidades de aquecimento ou de arrefecimento [7].

O funcionamento dos PCMs (Figura 1.1) é descrito por vários autores [4-7]: quando a temperatura aumenta e atinge a temperatura de fusão, o material funde (processo endotérmico). Este período de aquecimento é chamado fase de carga. Na fase de descarga, à medida que a temperatura diminui e se atinge a temperatura de solidificação, o PCM solidifica, sendo libertada a energia anteriormente armazenada.

Soares [8] descreveu os principais campos de aplicação dos PCMs em UAE (Figura 1.1): controlo da temperatura (efeito termorregulador) e grande capacidade de

armazenamento/libertação de calor, numa gama de temperaturas controlada e definida *a priori*.

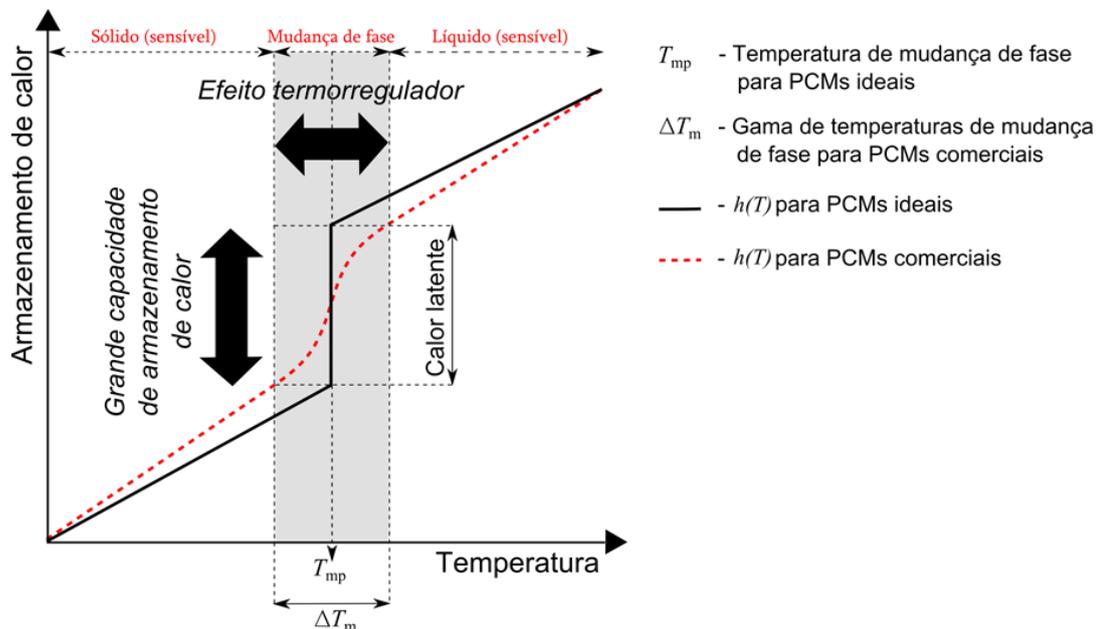


Figura 1.1 - Representação esquemática do funcionamento dos PCMs -com a variação da temperatura (adaptado da ref. [8]).

Citando Sharma *et al.* [6], ao contrário dos materiais ditos “convencionais”, usados em edifícios (como o betão, a madeira, etc) e que utilizam o calor sensível como forma de armazenar calor, os PCMs são capazes de armazenar cerca de 5 a 14 vezes mais energia térmica por unidade de volume devido ao calor latente envolvido na mudança de fase.

A criação de modelos numéricos que simulem a transferência de calor com fusão/solidificação dos PCMs tem despertado progressiva atenção a nível mundial, sendo uma área de investigação bastante ativa.

De acordo com Cabeza *et al.* [9], um dos problemas no estudo numérico da transferência de calor em cavidades preenchidas com PCMs surge no facto de existirem fronteiras móveis: a propagação da fronteira sólido-líquido depende da velocidade com que o calor latente é absorvido ou libertado. Na literatura, este problema é conhecido como “Problema de Stefan” [10]. A baixa condutibilidade térmica dos PCMs, nomeadamente das parafinas (como é o caso do PCM que vai ser utilizado neste trabalho), condiciona também a transferência de calor durante os ciclos de carga e descarga. Este problema poderá ser

mitigado, através da incorporação de alhetas metálicas no seio dos PCMs, aumentando assim a transferência de calor para o PCM.

De modo a validar os resultados numéricos obtidos nesta tese, serão usados os resultados experimentais obtidos anteriormente por Soares *et al.* [1,2]. O trabalho numérico apresentado dá também continuidade ao trabalho desenvolvido por Antunes [11].

### **1.1.1. Motivação e objetivos**

Os PCMs são materiais que fundem/solidificam a uma temperatura aproximadamente constante, armazenando/restituindo grandes quantidades de calor, numa pequena quantidade de material, devido ao calor latente envolvido nos processos de mudança de fase. Deste modo, os PCMs podem ser aplicados no armazenamento de energia térmica e na termorregulação de diferentes sistemas.

A modelação numérica do comportamento dos PCMs apresenta vários desafios, nomeadamente a existência de uma fronteira móvel, durante a mudança de fase, e de não linearidades devidas à variação das propriedades termofísicas dos PCMs com a temperatura. Estudos anteriores demonstram que a modelação numérica dos fenómenos de transferência de calor com mudança de fase de PCMs microencapsulados pode ser tratada como um problema puramente difusivo em que a convecção natural dentro das microcápsulas poliméricas pode ser desprezada [1,2].

Na literatura são descritos diferentes métodos para tratar numericamente a questão da transferência de calor com mudança de fase sólido-líquido dos PCMs. Entre eles destacam-se o *método do termo-fonte* e o *método da capacidade calorífica efetiva*. No primeiro, o calor latente de fusão é tratado como um termo fonte na equação da conservação da energia, sendo, assim, a temperatura a única variável dependente a ser determinada. Outra vantagem deste método é que a mesma equação pode ser considerada para ambas as fases, não sendo necessário determinar a posição da frente de fusão *a priori* para se resolver o problema. No segundo método, o calor latente de fusão é tratado como uma "falsa" capacidade calorífica durante a mudança de fase. Assim, a mesma equação de conservação da energia poderá ser usada também para ambas as fases. Serão avaliadas três formas distintas para especificar artificialmente a evolução da capacidade calorífica efetiva durante a mudança de fase: perfis triangular e retangular, e a curva da variação do calor específico efetivo com a temperatura obtida experimentalmente.

O objetivo principal deste trabalho é o desenvolvimento de modelos numéricos, baseados nos métodos descritos anteriormente, para simular a transferência de calor com mudança de fase sólido-líquido em arranjos de cavidades de secção retangular preenchidas com um PCM microencapsulado - Micronal® DS 5001 X (as denominadas UAE). Os modelos serão avaliados e comparados entre si e com os resultados experimentais obtidos anteriormente.

Considera-se que o estudo da transferência de calor com mudança de fase em UAE, com diferentes configurações, poderá ser útil para o desenvolvimento futuro de sistemas que incorporem este tipo de unidades na sua constituição.

### **1.1.2. Estrutura da tese**

O presente trabalho encontra-se dividido em seis capítulos. No segundo capítulo, descreve-se a temática em estudo e faz-se uma breve revisão bibliográfica, sendo apresentados alguns estudos numéricos e experimentais realizados no âmbito das UAE com PCMs. No terceiro capítulo, é feita a apresentação do problema em estudo, nomeadamente do modelo físico e dos modelos numéricos adotados para simular a transferência de calor com mudança de fase. No quarto capítulo procede-se à validação dos modelos numéricos com base nos resultados experimentais obtidos anteriormente. São também feitos testes de discretização (malha e tempo). No capítulo cinco são apresentados e discutidos os resultados do método que se revelou mais eficaz na aproximação aos resultados experimentais. No último capítulo, apresentam-se as notas conclusivas desta dissertação.

## 2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

### 2.1. PCMs

A Figura 2.1 apresenta esquematicamente o funcionamento de um PCM dito ideal (sem histerese e nem subcooling) em função da variação da temperatura. Segundo Soares [8], durante o período diurno, o PCM aquece devido à radiação solar e ao ser atingida a sua temperatura de fusão, o material funde, absorvendo calor. Com a diminuição da temperatura durante o período noturno, dá-se início à fase de descarga do calor armazenado durante o dia.

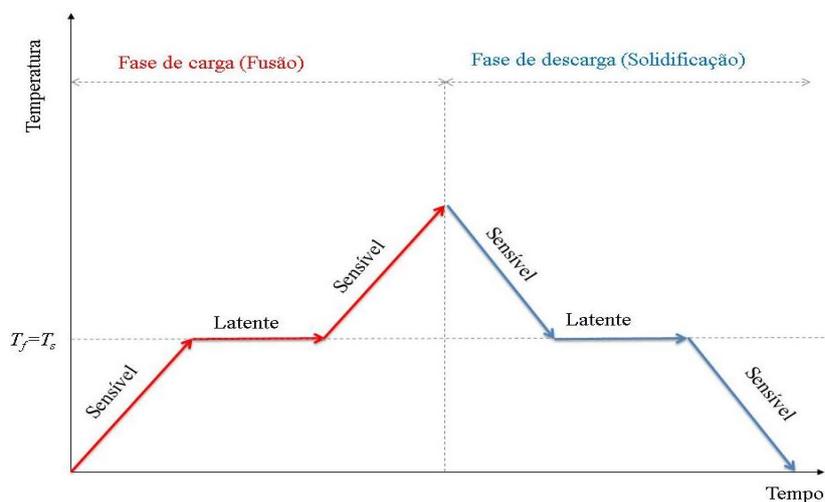


Figura 2.1 - Evolução da temperatura de um PCM durante os ciclos de carga (fusão) e de descarga (solidificação) (Adaptado de [8]).

### 2.2. Classificação

Os PCMs podem ser agrupados em três categorias principais: (i) orgânicos (parafinas e não-parafinas); (ii) inorgânicos, (sais hidratados e metálicos); (iii) misturas eutécticas (compostas por dois ou mais componentes em que cada um funde e solidifica congruentemente). Na Tabela 2.1, apresentam-se as principais vantagens e desvantagens de cada grupo. Relativamente às principais limitações dos PCMs, a baixa condutibilidade térmica pode ser compensada com a incorporação de materiais condutores no seio dos PCMs (por exemplo alhetas ou matrizes metálicas); o subarrefecimento pode ser reduzido ao introduzir-se um agente nucleativo, e a fusão incongruente pode ser mitigada através do

uso de uma espessura adequada [6]. A literatura sobre a aplicação de PCMs em edifícios é muito vasta e pode ser consultada com mais detalhe nas referências: [4,5,7,9,12].

**Tabela 2.1 – Vantagens e desvantagens de diferentes tipos de PCM (adaptado da ref. [4]).**

<b>PCM</b>	<b>Vantagens:</b>	<b>Desvantagens:</b>
<b>Orgânico</b>	- Baixo subarrefecimento e pouca segregação de fase; - Baixa pressão de vapor; - Grande variedade de temperaturas de fusão; - Quimicamente estáveis; - Recicláveis; - Elevado calor latente.	- Inflamável; - Baixa condutividade térmica; - Variação de volume na mudança de fase
<b>Inorgânico</b>	- Elevado calor latente; - Condutividade térmica mais elevada; - Baixo preço; - Não Inflamáveis.	-Corrosivo com metais; - Subarrefecimento e segregação de fase; - Problemas de congruência; - Elevada variação de volume na mudança de fase.
<b>Eutético</b>	- Temperaturas de fusão específicas mais fáceis de obter; - Propriedades podem ser ajustadas de acordo com requerimentos específicos.	- Propriedades termofísicas de muitas combinações difíceis de quantificar, - Elevado custo.

### **2.3. Propriedades termofísicas**

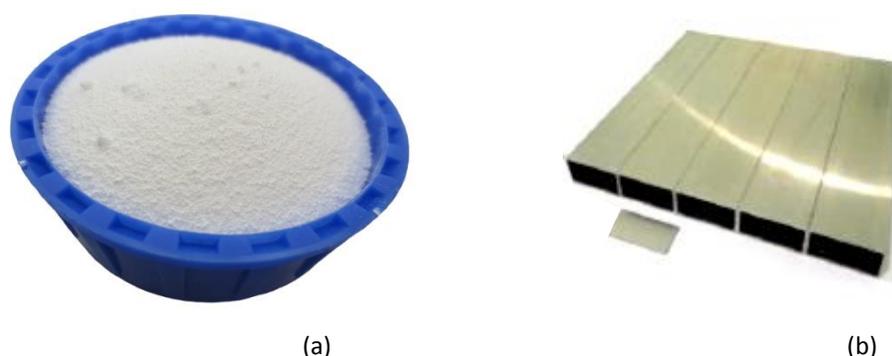
De forma a garantir o correto uso dos PCMs e a aproveitar o seu máximo potencial, devem ter-se em conta vários critérios aquando da sua escolha para uma aplicação específica [4,6]:

- elevado calor latente de fusão e calor específico;
- temperatura de mudança de fase adequada à operação exigida;
- estabilidade química, baixo nível de corrosão, não inflamáveis e não tóxicos;
- elevada densidade;
- pequenas variações de volume na mudança de fase;
- ausência de subarrefecimento e boa taxa de cristalização;
- elevada condutividade térmica;
- reduzida histerese;
- baixo custo e de fácil obtenção.

Tipicamente, os valores das propriedades termofísicas dos PCMs, fornecidos pelas empresas produtoras, não são suficientes para a correta caracterização do material. Normalmente são utilizadas duas técnicas laboratoriais para obter o valor das principais propriedades termofísicas dos PCMs (temperatura de mudança de fase e calor latente de fusão): o método *T-history* e a calorimetria de varrimento diferencial (DSC, do inglês *Differential Scanning Calorimetry*) [5].

## 2.4. Encapsulamento

Kuznik *et al.* [5] descrevem varias técnicas para a incorporação de PCMs num dado material. As técnicas menos utilizadas consistem na impregnação direta do PCM em materiais porosos e na formação de um PCM fisicamente estável (do Inglês, *shape-stabilized PCM*). As técnicas mais utilizadas para evitar a perda de PCM líquido são o macro- e o micro-encapsulamento. De acordo com Kalnæs *et al.* [4], o macroencapsulamento consiste no confinamento de PCMs num qualquer tipo de recipiente, com uma qualquer forma geométrica (tubular, esférica, etc.); o microencapsulamento, consiste no confinamento dos PCMs em cápsulas de diâmetro pequeno, cerca de 1 $\mu$ m até 300 $\mu$ m. O microencapsulamento revela-se atrativo para o sector da construção, uma vez que o produto final é uma espécie de "pó", (Figura 2.2 (a)) que pode ser incorporado em muitos sistemas construtivos ou materiais porosos. Mais detalhes sobre esta técnica são descritos nas referências [4,5,12,13]. Neste trabalho serão usadas duas técnicas de confinamento combinadas, o PCM microencapsulado (Micronal<sup>®</sup> DS 5001 X) será usado para preencher macrocápsulas de alumínio (Figura 2.2 (b)), dando origem às UAE.



**Figura 2.2 – (a) PCM Micronal<sup>®</sup> DS 5001 X. (b) Exemplo de um contentor metálico onde será incorporado o PCM. (Adaptado da ref. [23]).**

## 2.5. Corrosão nos PCMs

A compatibilidade do PCM com o contentor é outro aspeto a ter em consideração na escolha de um PCM, como descrito nas refs. [14,15]. Ferrer *et al.* [14] avaliaram o efeito da corrosão para cinco tipos de metais em contacto com quatro tipos de PCMs (orgânico, mistura inorgânica e dois ácidos gordos eutéticos). A metodologia do estudo consistiu em analisar a combinação metal-PCM após várias semanas (1, 4 e 12, respetivamente), fazendo uma imersão da amostra dos metais nos PCMs. No final do tempo estabelecido, avaliou-se a taxa de corrosão presente na mistura e verificou-se que o PCM orgânico era o mais compatível com qualquer tipo de metal estudado, sendo a corrosão insignificante.

## 2.6. Estudos numéricos e experimentais anteriores

Soares *et al.* [2] avaliaram experimentalmente a transferência de calor com mudança de fase em cavidades retangulares empilhadas verticalmente e preenchidas com dois tipos de PCMs diferentes, microencapsulados e livres, na qual consideraram as paredes verticais da UAE arrefecidas/aquecidas. Por PCM livre entende-se que o contentor de alumínio é a única forma de confinamento para evitar a fuga de material líquido. Durante a fase de carga dos PCMs livres observou-se que a condução era o processo dominante de transferência de calor inicial. No entanto, numa determinada altura, a convecção natural assumiu o papel mais importante na transferência de calor. Na fase de descarga a condução voltou a ser o principal mecanismo de transferência de calor. Antes de começar a solidificação foi visível o efeito de subarrefecimento, no qual o PCM é arrefecido abaixo da temperatura de fusão. No caso do PCM microencapsulado, quer na fase de carga quer na fase de descarga, verifica-se apenas a condução como o principal mecanismo de transferência de calor. Neste caso, a transferência de calor pode aproximar-se de um problema puramente difusivo.

Num outro trabalho Soares *et al.* [1], avaliaram experimentalmente a influência do fator de forma das cavidades assim como do número de alhetas metálicas presentes numa UAE, nas fases de carga/descarga. Os autores concluíram que, para a fase de carga do PCM livre, ao diminuir-se o fator de forma das cavidades reduz-se o efeito da convecção natural, melhorando a transferência de calor por condução e tornando o processo de fusão mais rápido. Na descarga, ao aumentar o número de cavidades, aumenta-

se o efeito do subarrefecimento, atrasando-se o processo de solidificação. Para a carga do PCM microencapsulado, Soares *et al.* [1] observaram que o efeito da convecção natural pode ser desprezado. Ao diminuir-se o fator de forma das cavidades preenchidas com o PCM microencapsulado aumenta-se a taxa de transferência de calor por condução, reduzindo o período termorregulador. Para a fase de descarga, observou-se que o efeito do subarrefecimento e da convecção natural poderão ser desprezados. Concluiu-se então que as UAE preenchidas com PCMs livres são mais atrativas para sistemas em que o principal objetivo é melhorar o período termorregulador e reduzir a temperatura de controlo da superfície quente. As UAE com o PCM microencapsulado serão mais adequadas para elementos onde é crucial reduzir o tempo necessário para completar a fusão do PCM.

Na Figura 2.3 é visível o efeito do subarrefecimento, referido anteriormente, onde é atingida uma temperatura abaixo da temperatura de solidificação de maneira a iniciar-se a recristalização. Soares [8] descreve que, idealmente, a temperatura de solidificação deveria ser igual à de fusão. Como muitas vezes isto não acontece, verifica-se o fenómeno de histerese. O fenómeno de histerese pode ser provocado por muitos aspetos como descrito na ref. [8]: subarrefecimento, condições experimentais, características dos equipamentos de medição, propriedade intrínseca do material, etc.. O conhecimento do fenómeno de histerese e das curvas de variação da entalpia com a temperatura para os diferentes ciclos de carga e descarga é de extrema importância para a modelação numéricas dos fenómenos de transferência de calor com mudança de fase.

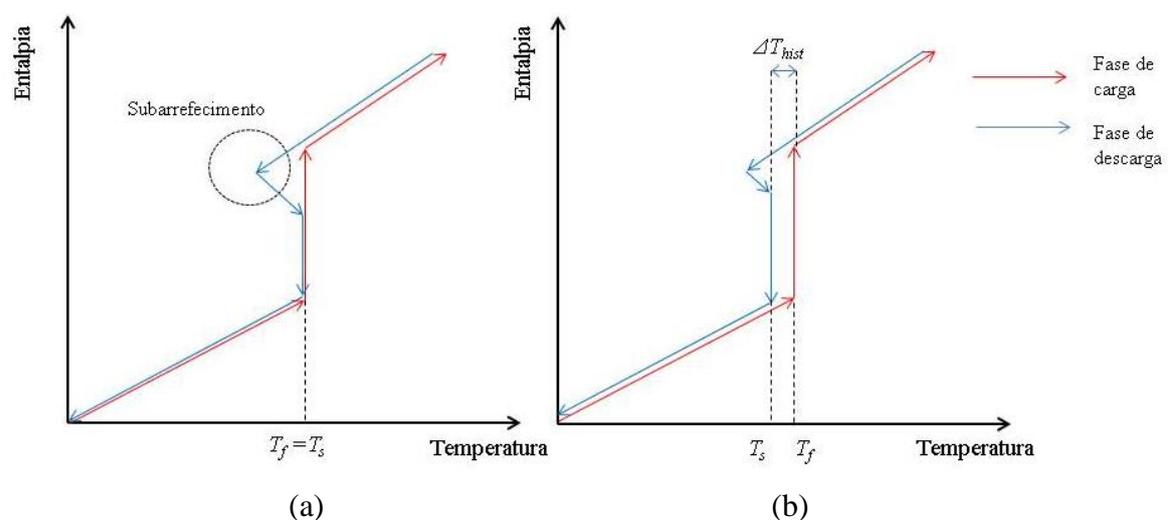


Figura 2.3 – Representação do fenómeno de subarrefecimento: (a) sem histerese; (b) com histerese. (Adaptado da ref. [8])

Antunes [3] desenvolveu um modelo numérico bidimensional (2D), com base nos resultados experimentais obtidos por Soares *et al.* [1,2], capaz de reproduzir o comportamento térmico de uma UAE em regime transiente, e de avaliar a transferência de calor com mudança de fase sólido-líquido, em cavidades de secção retangular preenchidas com PCMs microencapsulados. O modelo numérico puramente difusivo foi baseado no *método da capacidade calorífica efetiva*, que trata o calor latente de fusão do PCM como um “falso” calor sensível, aumentando artificialmente o valor da sua capacidade calorífica na gama de temperaturas onde se dá a mudança de fase. Inicialmente, foram estudados dois tipos de perfis para a curva  $C_p(T)$ : o triangular e o quadrangular. Verificou-se que ambos os perfis representavam bem a evolução das curvas obtidas experimentalmente e a inércia do problema. Com o primeiro perfil, no entanto, existia um défice de energia na quantificação da energia armazenada/restituída durante um ciclo completo de carga/descarga. Para ultrapassar o problema, Antunes [3] propôs o perfil triangular corrigido, no qual se duplicou artificialmente o valor do calor latente de fusão do PCM por forma a duplicar-se a área de integração da curva  $C_p(T)$ . Assim, a área de integração das curvas  $C_p(T)$  é aproximadamente a mesma para os dois perfis, quadrangular e triangular corrigido. Antunes [3] mostrou que com os perfis quadrangular e triangular corrigido é possível obter resultados numéricos muito próximos daqueles obtidos experimentalmente, existindo apenas um ligeiro atraso na mudança de fase, na fase de carga, devido possivelmente à incerteza dos valores da condutibilidade térmica e da densidade do PCM.

Lachheb *et al.* [16] estudaram numérica e experimentalmente o comportamento térmico de novos compostos de gesso contendo um PCM microencapsulados. A parte experimental foi baseada no método *hot plates method* que consiste em colocar uma amostra em forma de paralelepípedo em contacto com duas placas de alumínio, onde ocorrem trocas de calor através de banhos termorreguladores. Este método permite impor variações de temperatura em cada face da amostra. Simultaneamente, mede as variações da temperatura e as trocas de calor durante o aquecimento e arrefecimento, permitindo determinar as propriedades termofísicas da amostra. A parte numérica foi desenvolvida através do *método da entalpia* (do inglês, *enthalpy method*). Este método consiste na introdução do calor latente de fusão através da variação da entalpia do PCM, ao longo do intervalo de temperaturas em que ocorre a mudança de fase. O modelo numérico foi validado através dos resultados experimentais obtidos. Foi também concluído que as

oscilações de temperatura e do fluxo de calor são extremamente afetadas pela quantidade de PCM na mistura, diminuindo com o aumento da fração mássica de PCM.

Libeer *et al.* [17] estudaram experimentalmente a transferência de calor num PCM durante o processo de fusão, com o objetivo de analisar a importância da convecção natural. Para tal foram montados dois reservatórios, um de aquecimento outro de refrigeração, para simular, respetivamente, uma fonte de calor a uma temperatura constante de 80 °C, e uma fonte fria à temperatura de -20 °C. A temperatura inicial estabelecida para o PCM foi de 10 °C. Os testes foram realizados para três orientações diferentes: sentido ascendente, horizontal e descendente. Foi também desenvolvido um modelo 2D em *FORTRAN*, em regime transiente, para simular o processo de mudança de fase. Concluiu-se que quando o PCM é aquecido a partir de cima, o tempo necessário para fundir todo o PCM é muito maior, devido essencialmente ao menor efeito da convecção natural.

Huang *et al.* [18] analisaram experimentalmente a influência da inserção de alhetas em cavidades retangulares preenchidas com PCMs livres, para serem incorporadas em painéis fotovoltaicos. Para tal foram introduzidos termopares no interior das cavidades (Figura 2.4 (a)), com o intuito de monitorizar a evolução da temperatura ao longo do ensaio. Inicialmente verificou-se que a condução era o único mecanismo de transferência de calor. Com o decorrer do tempo, a convecção natural passou a ter um papel relevante na transferência de calor, começando por fundir o PCM do topo da cavidade para a base (Figura 2.4 (b)) As alhetas aumentam a transferência de calor para o PCM. A inserção de mais alhetas reduz o efeito da convecção natural, assim como a estratificação térmica, originando uma distribuição de temperatura mais uniforme (Figura 2.4 (c)). A redução do espaçamento das alhetas reduz também o período em que ocorre a mudança de fase. Por fim, é revelada a influência do número de *Rayleigh* ( $Ra$ ). Ao diminuir-se o valor de  $Ra$ , diminui-se a influência da convecção natural.

Ye *et al.* [19] efetuaram estudos numéricos e experimentais, com o principal objetivo de analisar a influência da expansão volumétrica durante a mudança de fase do PCM em cavidades retangulares. Foram também estudados parâmetros como a taxa de expansão volumétrica, o tempo de armazenamento térmico e a fração fundida de PCM. Os ensaios foram realizados com cavidades preenchidas com diferentes frações volúmicas do PCM - entre 35% e 95%. Notou-se um aumento da transferência de calor por convecção natural à medida que a quantidade de PCM aumentava, devido à existência de uma maior massa de PCM fundida próxima das superfícies quentes. Com o aumento do volume de

PCM, a taxa de expansão volumétrica diminuiu, no entanto o período para o armazenamento completo aumentou.

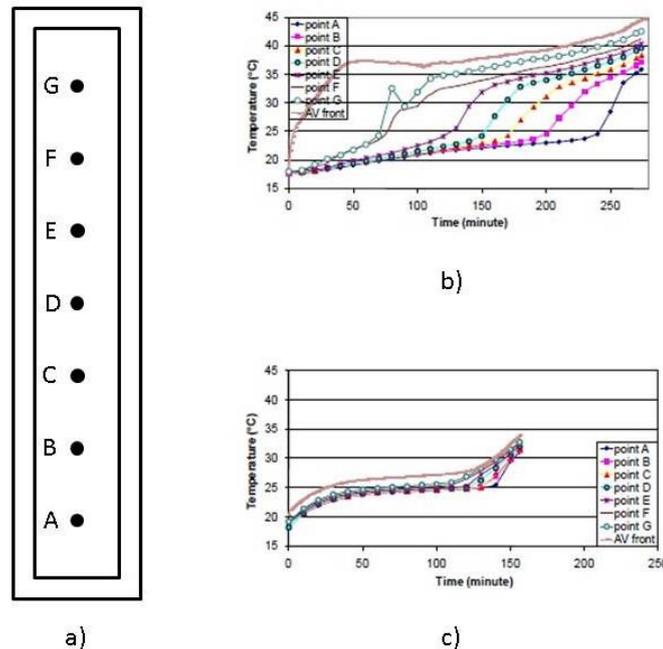


Figura 2.4 – (a) Representação da distribuição dos termopares na UAE. (b) Variação temporal da temperatura para os diferentes pontos de monitorização: (b) sem alhetas; (c) com espaçamento entre alhetas de 4mm. (Adaptado de[18]).

Costa *et al.* [20] desenvolveram modelos uni- e bi-dimensionais, baseados no *método de entalpia*, para avaliar o comportamento de UAE. O modelo 1D teve em conta os mecanismos de condução e convecção, e a não inserção de alhetas. O modelo 2D considerou apenas a condução como mecanismo de transferência de calor e a inserção de alhetas. Concluiu-se que, para o modelo 2D, a presença de alhetas aumenta significativamente a taxa de transferência de calor e a fração fundida de PCM. Em termos de energia armazenada, no modelo 1D, é importante realçar o efeito predominante da convecção natural em relação à condução.

Lamberg *et al.* [21] avaliaram numericamente o processo de fusão e solidificação de um PCM através do *método da entalpia* e do *método capacidade calorífica efetiva*. Foram avaliadas UAE com e sem a incorporação de alhetas. Os autores concluíram que, para o *método da capacidade calorífica efetiva*, se obtém resultados mais precisos considerando um pequeno intervalo de temperatura. Verificou-se também que quando a convecção natural é desprezada, o PCM demora o dobro do tempo a atingir o pico máximo da temperatura.

Silva *et al.*[22] desenvolveram um modelo 1D com base no *método da entalpia*, a ser validado com base em alguns resultados experimentais. O estudo foi feito para geometrias retangulares posicionadas verticalmente. O processo de carga foi garantido através de uma parede vertical aquecida a uma taxa constante, usando um circuito elétrico composto por um fio de NiCr. O processo de descarga foi feito através de um fluxo de ar na parede vertical da direita. Concluiu-se que o tempo de fusão é influenciado pelo fluxo de calor imposto assim como pela espessura do PCM. O número de *Nusselt* (Nu) revelou também alguma importância relativamente ao processo de solidificação, uma vez que influencia o tempo de solidificação, assim como a espessura do PCM.

.



### 3. DESCRIÇÃO DO MODELO NUMÉRICO

Neste capítulo é apresentado o problema físico em estudo. Será também feita uma descrição detalhada dos vários métodos utilizados para a simulação da transferência de calor com mudança de fase: *método da capacidade calorífica efetiva* (e respetivos perfis de  $C(T)$ ); o *método do termo-fonte* e imposição da curva  $c_p(T)$  do PCM obtida experimentalmente. Por fim, são apresentados todos os passos necessários para a simulação da transferência de calor em UAE preenchidas com PCMs microencapsulados.

#### 3.1. Problema físico

Pretende-se avaliar numericamente a transferência de calor com mudança de fase (sólido-líquido) de um PCM microencapsulado - Micronal<sup>®</sup> DS 5001 X, em regime transiente, num domínio retangular referenciado em coordenadas cartesianas. O problema é tratado como sendo puramente difusivo, desprezando-se o efeito da convecção natural no interior das microcápsulas. Na Figura 3.1 encontram-se representadas as três configurações consideradas para a UAE, com as respetivas dimensões. Será avaliada a distribuição da temperatura em alguns pontos de monitorização ao longo dos ensaios de carga e descarga, assim como a evolução da fração fundida de PCM. A inserção de alhetas metálicas tem como objetivo melhorar a transferência de calor por condução.

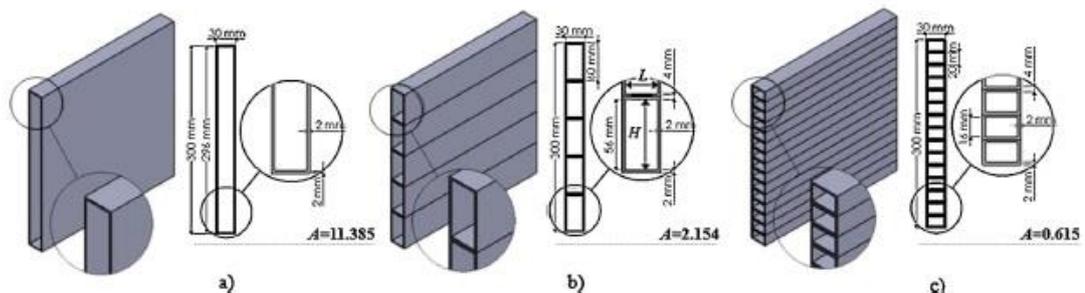


Figura 3.1 - Representação esquemática dos três arranjos da UAE considerados: (a) 1 cavidade; (b) 5 cavidades; (c) 15 cavidades. (Adaptado da ref. [1]).

### 3.2. Modelo físico

A Figura 3.2 mostra uma representação esquemática do domínio físico para a UAE com uma só cavidade retangular (sem alhetas metálicas), com as dimensões exteriores, assim como algumas coordenadas definidas com o intuito de identificar os principais nodos do domínio, de acordo com o *Método dos Volumes Finitos* proposto por Patankar [10]. Este método divide o domínio de cálculo num certo número de Volumes de Controlo (VC) contíguos que não se intersectam, representados por nodos. Para aplicação do método, é imperativo posicionar os nodos interiores fronteiras, vizinhos dos primeiros nodos exteriores, designados fictícios. Só assim será possível definir corretamente as condições fronteira e os limites do domínio. Serão avaliadas mais duas UAE com as mesmas dimensões exteriores, mas com 5 (Figura 3.3) e 15 cavidades retangulares preenchidas com o mesmo PCM. Isto servirá para avaliar a influência da incorporação de alhetas metálicas na transferência de calor.

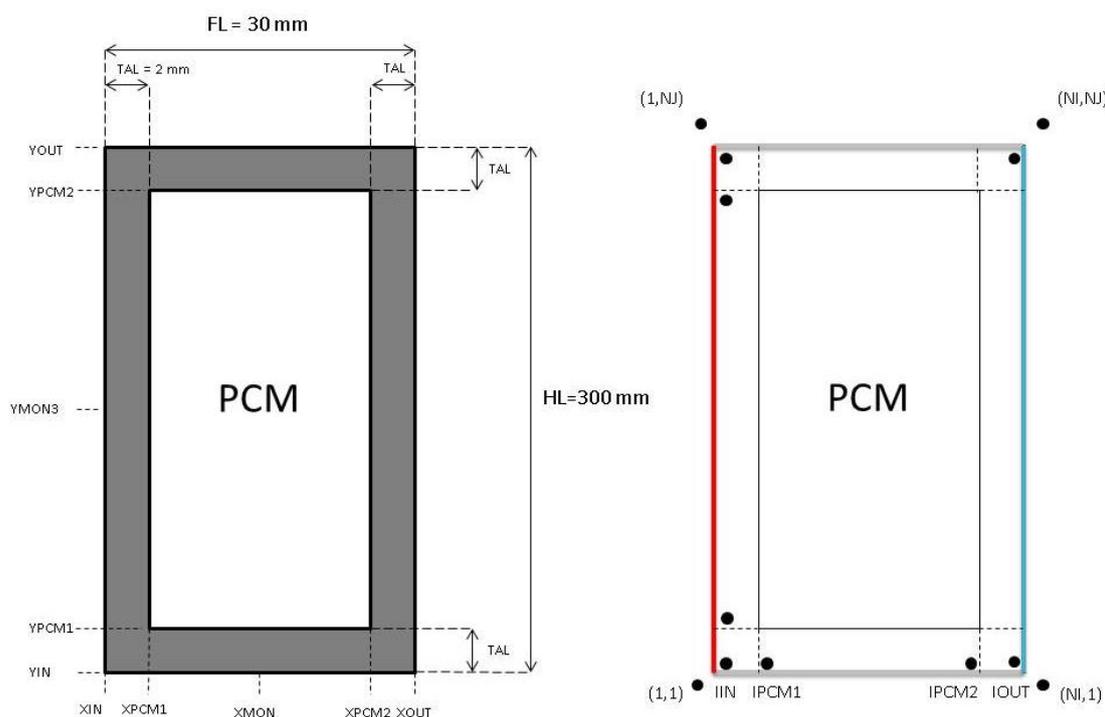
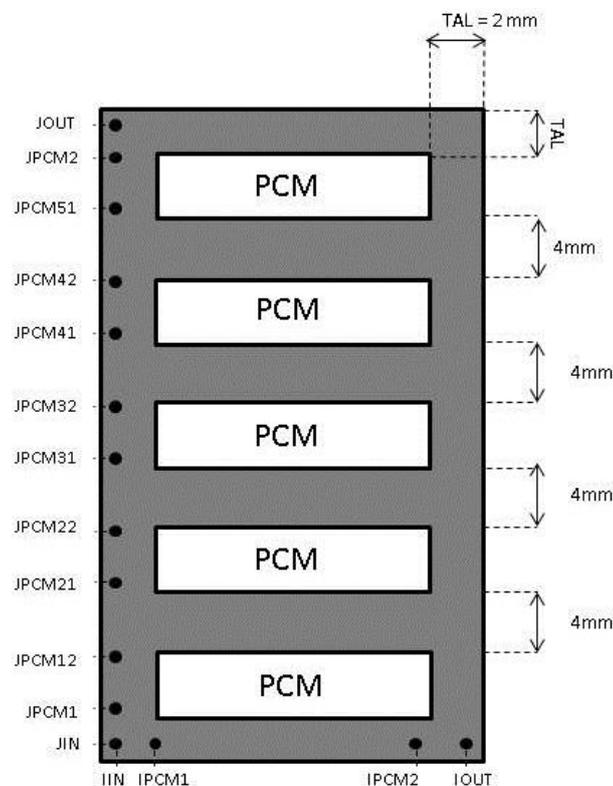


Figura 3.2. - Modelo físico considerado para a UAE com uma só cavidade retangular: dimensões, coordenadas, nodos relevantes, de condições de fronteira (ver Tabela 3.1).

De acordo com os ensaios experimentais realizados por Soares *et al.* [1,2], a fase de carga é garantida pelo aquecimento de uma placa quente, com uma potência elétrica constante de 34 ou 68 W. A fase de descarga, por sua vez, é garantida pelo arrefecimento da placa fria onde corre, no interior da mesma, circulação de água fria a uma temperatura de 14 ou 20 °C. Para efeitos de validação, foram colocados termopares em cada superfície da UAE, em contacto com as placas quente e fria, assim como no eixo central da cavidade (domínio do PCM), de forma a monitorizar as temperaturas, a cada 30 segundos. Este registo da evolução das temperaturas permite obter resultados experimentais precisos, ajudando também a que as condições de fronteira sejam bem definidas no modelo numérico. Na Figura 3.2, estão também representadas as diferentes condições de fronteira impostas no domínio numérico (ver Tabela 3.1).

**Tabela 3.1. – Condições de fronteira impostas no modelo numérico**

Fronteira (ver Figura 3.2)	Condição
Cor Cinzenta: 	<b>Fronteira Adiabática:</b> Não há qualquer troca de calor.
Cor Vermelha: 	<b>Fronteira Quente:</b> Temperatura imposta e variável ao longo do tempo.
Cor Azul: 	<b>Fronteira Fria:</b> Temperatura imposta e variável ao longo do tempo.



**Figura 3.3. – Modelo físico da UAE com 5 cavidades retangulares: dimensões, coordenadas, nodos relevantes.**

### 3.3. Modelo matemático

A equação diferencial de conservação, em coordenadas cartesianas e notação tensorial, de transporte de calor e de massa, associada a escoamento de fluídos, pode ser representada da seguinte forma genérica, designada por equação geral da conservação:

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \rho u_j \phi - \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) - S_\phi = 0 \quad (3.1)$$

em que

$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t}$  – termo transiente;

$\frac{\partial}{\partial x_j} \left( \rho u_j \phi - \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right)$  – balanço entre os fluxos de  $\phi$  que saem e entram pelas faces do VC, por advecção e difusão, respetivamente;

$S_\phi$  - Fonte/Poços.

As variáveis  $\Gamma_\phi$  e  $S_\phi$ , podem adquirir diferentes significados. Para o caso em estudo, em que se descarta a componente de advecção, podemos tratar o problema como um fenómeno puramente difusivo. Considerando  $\phi=h$  e que o PCM é um meio incompressível ( $dh = c_p dT$ ), a equação de conservação de energia toma a forma da equação geral da condução de calor:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + S_h \quad (3.2)$$

sendo  $S_h$ , o termo fonte genérico. As equações diferenciais de conservação são, por norma, exatas, mas irresolúveis, sendo por isso necessário uma discretização, de que resultam equações algébricas aproximadas, mas resolúveis. Procede-se, assim, a uma discretização espacial, dividindo o domínio em volumes de controlo (VC) finitos representados por nodos. A Eq. (3.3) relaciona os valores da variável dependente num dado nodo  $P$ , neste caso a temperatura  $T$ , com os valores nos seus nodos vizinhos:

$$a_p T_p = \sum a_{viz} T_{viz} + b \quad (3.3)$$

Os coeficientes  $a$  representam as condutâncias térmicas entre o nodo central e os seus vizinhos, com exceção ao termo  $a_p^0$  que representa a capacidade térmica. O termo  $b$  incorpora a taxa de geração de calor no VC, *i.e.*, a parte constante do termo-fonte linearizado ( $S_h = S_P T_P + S_U$ ).

$$a_p = \sum a_{viz} + a_p^0 - S_P \Delta V \quad (3.4)$$

$$b = a_p^0 T_p^0 + S_U \Delta V \quad (3.5)$$

$\Delta V$  corresponde ao volume do VC,  $T_p^0$  é o valor “velho” de  $T_P$  (no instante anterior). Para este problema, recorreu-se a um processo de cálculo iterativo, baseado no algoritmo TDMA (*Tri-Diagonal Matrix Algorithm*) [10], em que a equação de discretização é resolvida para todos os nodos do domínio de cálculo segundo um procedimento linha-a-linha sequencial.

### 3.4. Método da capacidade calorífica efetiva

A capacidade calorífica é uma grandeza que relaciona a quantidade de calor sensível armazenado num corpo e a variação de temperatura que nele ocorre. A quantidade de energia latente absorvida/libertada por um PCM pode ser aproximada à mesma quantidade de energia sensível armazenada/restituída por um material com elevada capacidade calorífica. Posto isto, o *método de capacidade calorífica efetiva* consiste em tratar o calor latente presente na mudança de fase do PCM como se fosse um “falso” calor sensível, aumentando artificialmente o valor da capacidade calorífica na gama de temperaturas onde ocorre a mudança de fase. Consideram-se os seguintes pressupostos:

- A densidade do PCM é igual para ambas as fases;
- O calor específico é diferente para cada fase mas considerado constante para cada fase;
- Ocorre o fenómeno de histerese ( $T_f \neq T_s$ );
- O PCM funde e solidifica numa gama de temperaturas, respetivamente,  $\Delta T_f = [T_{1f}, T_{2f}]$  e  $\Delta T_s = [T_{1s}, T_{2s}]$  (Figura 3.4);
- A condutibilidade térmica do PCM varia linearmente com a temperatura.

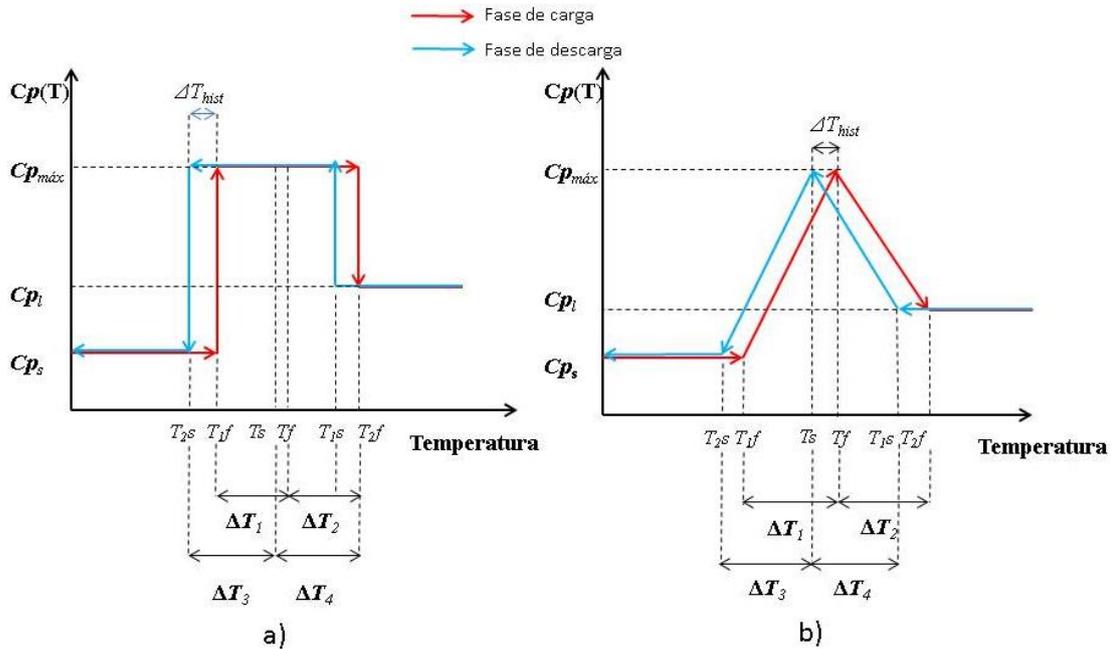


Figura 3.4.- Representação esquemática do método da capacidade calorífica efetiva com diferentes perfis: (a) quadrangular; (b) triangular.

De acordo com a Figura 3.4, o calor sensível artificialmente introduzido no intervalo de mudança de fase permite alguma liberdade na geometria da curva  $Cp(T)$ . Por norma, é atribuído um perfil quadrangular ou triangular. No perfil quadrangular, ocorre um aumento brusco no valor de  $Cp$  mantendo constante a capacidade calorífica máxima durante o intervalo de mudança de fase, enquanto no perfil triangular o valor de  $Cp$  aumenta linearmente até se atingir  $T_f$  ou  $T_s$ , e seguidamente diminui até se atingir a fase sólida ou líquida, respetivamente. Confrontando as duas curvas da Figura 3.4, observa-se que o perfil quadrangular simula um fenómeno mais demorado, devido ao valor constante de  $Cp_{,máx}$  ao longo da mudança de fase. Se este valor corresponder ao “pico” máximo atingido no perfil triangular, a energia total que será necessária para fundir o PCM no perfil quadrangular poderá ser maior do que no perfil triangular. Consequentemente, Antunes [3] propôs um perfil triangular corrigido, no qual se adotou um novo valor de  $Cp_{,máx}$  para o perfil triangular (duplicando o valor do calor latente,  $L$ ) para que a energia armazenada/restituída fosse a mesma para os dois perfis esquematizados na Figura 3.4.

### 3.4.1. Perfil triangular ajustado

Para evitar o eventual défice/excesso de energia causado pelo perfil triangular de forma mais abrangente, e para que o valor da energia seja corretamente ajustado, desenvolveu-se um novo modelo triangular que consiste no cálculo de um valor de  $Cp_{,máx}$

máximo em função dos valores dos intervalos de temperatura  $\Delta T_1$  e  $\Delta T_2$ , e do calor sensível especificado para as fases sólidas e líquidas. A Figura 3.5 representa esquematicamente a implementação do novo modelo triangular – perfil triangular ajustado. Para calcular o valor de  $C_{p\text{máx}}$ , o perfil triangular foi dividido em três áreas como esquematizado na Figura 3.5. O somatório das três áreas terá que ser igual ao valor do calor latente de fusão (Eq. 3.6).

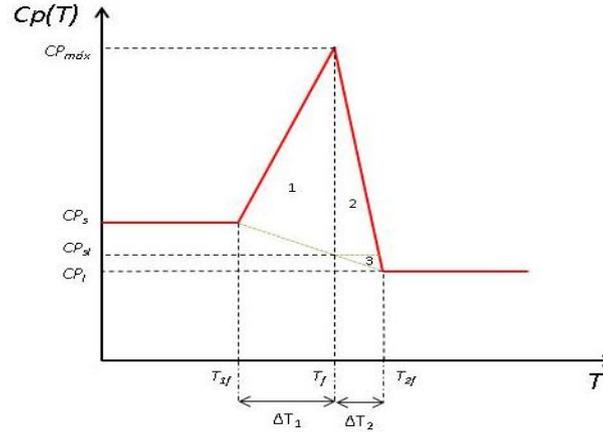


Figura 3.5 – Representação esquemática do perfil triangular ajustado.

$$\sum_{i=1}^3 A_i = L \quad (3.6)$$

com:

$$A_1 = \frac{\Delta T_1 \times [C_{p\text{máx}}(T_f) - (C_{psl}(T_m))]}{2} \quad (3.7)$$

$$A_2 = \frac{\Delta T_2 \times [C_{p\text{máx}}(T_f) - C_{pl}]}{2} - A_3 \quad (3.8)$$

$$A_3 = \frac{\Delta T_2 \times [C_{psl}(T_f) - C_{psl}]}{2} \quad (3.9)$$

Tem-se ainda que:

$$C_{psl} = C_{ps} + \frac{\Delta T_1}{\Delta T_1 + \Delta T_2} \times (C_{pl} - C_{ps}) \quad (3.10)$$

Substituindo o valor de  $C_{psl}$  nas Eqs. 3.7, 3.8 e 3.9, a Eq. 3.6 pode ser desenvolvida para se obter o valor de  $C_{p\text{máx}}$ :

$$C_{p\text{máx}}(T_f) = \frac{\frac{2 \times L}{\Delta T_2} + C_{ps} + f_f \times C_{pl} + f_f \times C_{ps} + C_{ps} \times \frac{\Delta T_1}{\Delta T_2} + f_f \times C_{pl} \times \frac{\Delta T_1}{\Delta T_2} - f_f \times C_{ps} \times \frac{\Delta T_1}{\Delta T_2}}{\left(1 + \frac{\Delta T_1}{\Delta T_2}\right)} \quad (3.11)$$

em que  $f_f = \frac{\Delta T_1}{\Delta T_1 + \Delta T_2}$ .

Adotando o perfil triangular ajustado (ver Figura 3.5), durante a fase de carga, tem-se:

$$C(T) \begin{cases} C_s & T \leq T_{1f} \\ C_s + \frac{C_{m\acute{a}x} - C_s}{T_f - T_{1f}} (T - T_{1f}) & T_{1f} < T \leq T_f \\ C_{m\acute{a}x} + \frac{C_l - C_{m\acute{a}x}}{T_{2f} - T_f} (T - T_f) & T_f < T < T_{2f} \\ C_l & T \geq T_{2f} \end{cases} \quad (3.12)$$

em que,  $C_{m\acute{a}x} = \rho_{PCM} \times c_{pm\acute{a}x}$ . Da mesma forma, para a fase de descarga:

$$C(T) \begin{cases} C_s & T \leq T_{1s} \\ C_s + \frac{C_{max} - C_s}{T_s - T_{1s}} (T - T_{1s}) & T_{1s} < T \leq T_s \\ C_l + \frac{C_l - C_{max}}{T_{2s} - T_s} (T - T_s) & T_s < T < T_{2s} \\ C_l & T \geq T_{2s} \end{cases} \quad (3.13)$$

### 3.4.2. Perfil quadrangular

Adotando um perfil quadrangular (ver Figura 3.4), durante a fase de carga, tem-se:

$$Cp(T) \begin{cases} c_{ps} & T \leq T_{1f} \\ c_{pmax} & T_{1f} < T < T_{2f} \\ c_{pl} & T \geq T_{2f} \end{cases} \quad (3.14)$$

em que,  $c_{pmax} = \frac{L}{T_{2f} - T_{1f}} + \frac{c_{ps} + c_{pl}}{2}$ ;  $T_{1f} = T_f - \Delta T_1$ ;  $T_{2f} = T_f + \Delta T_2$ .

$L$  representa o calor latente de fusão do PCM. A capacidade calorífica efetiva,  $C(T)$  [ $J.m^{-3}.\text{°C}^{-1}$ ], é definida como o produto da densidade,  $\rho$  [ $kg.m^{-3}$ ], por um calor específico,  $c_p(T)$  [ $J.Kg^{-1}.\text{°C}^{-1}$ ], resultando:

$$C(T) \begin{cases} C_s = \rho_{PCMS} c_{ps} & T \leq T_{1f} \\ C_m = \frac{\rho_{PCML} L}{T_{2f} - T_{1f}} + \frac{C_s + C_L}{2} & T_{1f} < T < T_{2f} \\ C_l = \rho_{PCML} c_{pl} & T \geq T_{2f} \end{cases} \quad (3.15)$$

Em que  $C_s$  e  $C_l$  representam, respetivamente, as capacidades caloríficas sensíveis na fase sólida e líquida. Da mesma forma, para a fase de descarga tem-se que:

$$C(T) \begin{cases} C_s = \rho_{PCMS} c_{ps} & T \leq T_{1s} \\ C_m = \frac{\rho_{PCML} L}{T_{2s} - T_{1s}} + \frac{C_s + C_L}{2} & T_{1s} < T < T_{2s} \\ C_l = \rho_{PCML} c_{pl} & T \geq T_{2s} \end{cases} \quad (3.16)$$

com,  $T_s = T_f - \Delta T_{hist}$ ;  $T_{1s} = T_s - \Delta T_3$ ;  $T_{2s} = T_s + \Delta T_4$ .

### 3.5. Método do termo-fonte

Como foi descrito anteriormente no modelo matemático, a equação de conservação de energia tem presente o termo-fonte designado por  $S(f)$ .

$$\frac{\partial(\rho c_p T)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + S(f) \quad (3.17)$$

O *método do termo-fonte* consiste em tratar este termo-fonte da equação de conservação de energia como um calor latente de fusão. A utilização deste método apresenta algumas vantagens: o facto de se utilizar a equação de conservação de energia torna a temperatura a única variável independente a ser determinada; a mesma equação pode ser considerada para ambas as fases, não sendo necessário determinar a posição da frente de fusão *a priori* para se resolver o problema. O termo-fonte,  $S(f)$ , é tratado como uma fonte de calor adicional que serve para contabilizar a taxa de calor latente envolvida na mudança de fase, através da taxa de alteração da fração fundida,  $f(t)$ :

$$S(f) = -\rho \frac{\partial f}{\partial t} L \quad (3.18)$$

Após integração, o termo-fonte será implementado como se segue, na equação de discretização:

$$S(f) \times Vol = -\rho_{i,j} \frac{f_{i,j}^t - f_{i,j}^{t-\Delta t}}{\Delta t} L \times Vol_{i,j} \quad (3.20)$$

em que,  $f_{i,j}^t - f_{i,j}^{t-\Delta t}$ , corresponde à fração fundida atual no nodo para um determinado instante, menos a fração antiga no instante anterior.

### 3.6. Método do *Reverse Cp*

Este método consiste na implementação direta das propriedades do PCM Micronal<sup>®</sup> – DS 5001X no programa, obtidas experimentalmente com a colaboração dos colegas da Engenharia Química da FCTUC. Para tal foram realizados ensaios usando o método do *Reverse Cp* - DSC para medir as principais propriedades do PCM (calor latente de fusão, as temperaturas de fusão/solidificação e o calor específico). A densidade média para ambas as fases medidas pelos colegas da Engenharia Química foi de  $356 \text{ kg m}^{-3}$ . A condutibilidade térmica foi medida usando do método *Transient Plane Source* (TPS) da Hot Disk. A Figura 3.6 representa a variação da condutibilidade térmica em função da temperatura, obtida experimentalmente. A Figura 3.7 representa a evolução do calor específico do PCM em função da temperatura - curva do *Reverse Cp*.

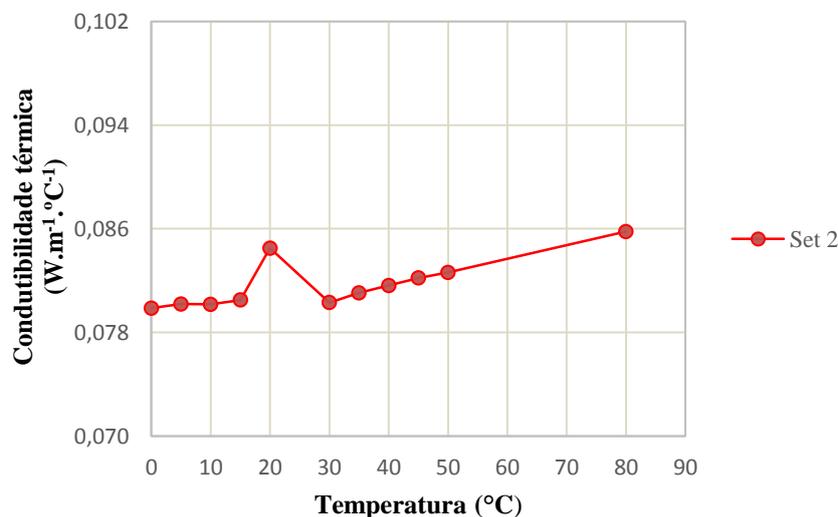


Figura 3.6 – Evolução da condutibilidade térmica de acordo com a temperatura.

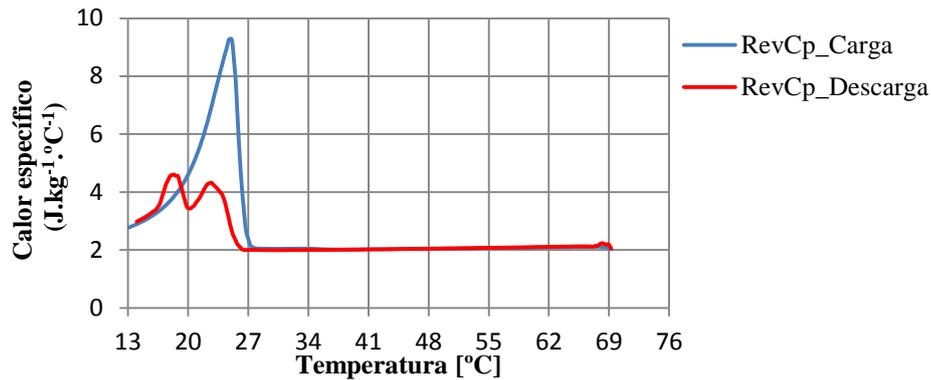


Figura 3.7 – Representação da curva do *Reverse Cp* em função da temperatura para a fase de carga e descarga.

As propriedades mencionadas anteriormente são implementadas de forma direta no programa. A cada instante  $t$  do processo, à medida que a temperatura no domínio do PCM vai evoluindo, os valores da condutibilidade térmica e do calor específico são atualizados de acordo com a temperatura para cada instante  $t$ .

### 3.7. Fração fundida

#### 3.7.1. Método da capacidade calorífica efetiva e método do termo-fonte

Ao contrário do que foi constatado por Antunes[3] a fração fundida ( $FF$ ) de PCM, no momento em que se atinge  $T_f$  e  $T_s$ , não irá corresponder a um valor de 0.5. Isto deve-se ao facto de serem testados diferentes intervalos de temperatura ( $\Delta T_1$  e  $\Delta T_2$ ) com o objetivo de aproximar os resultados numéricos aos valores obtidos experimentalmente. A Figura 3.8 mostra então a evolução da  $FF$  em função da temperatura. Esta evolução é válida para ambos os métodos: *método da capacidade calorífica efetiva* e o *método do termo-fonte*.

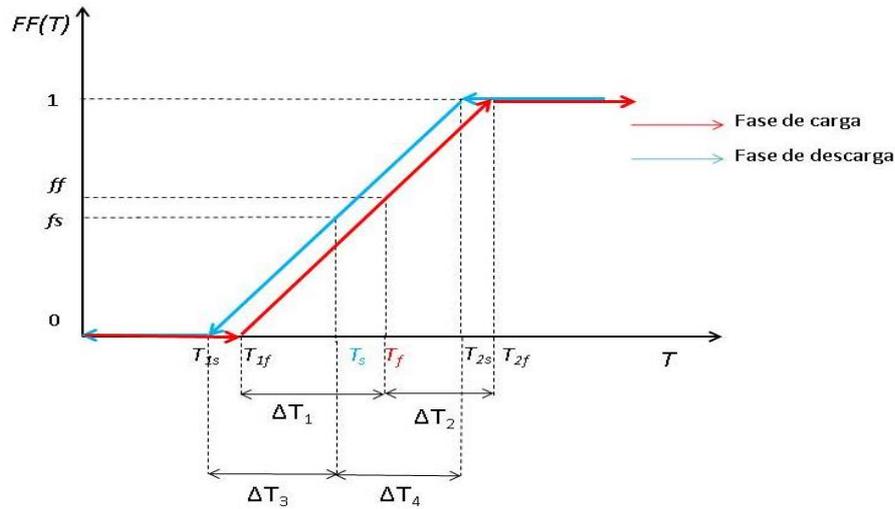


Figura 3.8 – Representação da evolução da fração fundida com a temperatura, para os métodos da capacidade calorífica efetiva e do termo-fonte.

Para a fase de carga tem-se que:

$$FF(T) \begin{cases} 0 & T_{i,j} \leq T_{1f} \\ F_{i,j} = ff \times \frac{(T_{i,j} - T_{1f})}{\Delta T_1} & T_{1f} \leq T_{i,j} \leq T_f \\ F_{i,j} = ff + (1 - ff) \times \frac{(T_{i,j} - T_f)}{\Delta T_2} & T_f \leq T_{i,j} \leq T_{2f} \\ 1 & T_{i,j} \geq T_{2f} \end{cases} \quad (3.21)$$

Por sua vez, para a fase de descarga, tem-se que:

$$FF(T) \begin{cases} 0 & T_{i,j} \leq T_{1s} \\ F_{i,j} = fs \times \frac{(T_{i,j} - T_{2s})}{\Delta T_4} & T_{2s} \leq T_{i,j} \leq T_s \\ F_{i,j} = fs + (1 - fs) \times \frac{(T_{i,j} - T_s)}{\Delta T_3} & T_s \leq T_{i,j} \leq T_{1s} \\ 1 & T_{i,j} \geq T_{2s} \end{cases} \quad (3.22)$$

em que,  $ff = \frac{\Delta T_1}{\Delta T_1 + \Delta T_2}$  e  $fs = \frac{\Delta T_4}{\Delta T_4 + \Delta T_3}$ .

### 3.7.2. Método experimental

Para este método a  $FF$ , sofreu também alterações. Considerando uma dada temperatura  $T_{i,j}$ , a fração fundida é atualizada para cada nodo de acordo com a Eq. 3.23. Este cálculo será feito logo no início do programa até o PCM se encontrar totalmente fundido. O termo  $f_{i,j}^0$ , corresponde ao valor da fração fundida no nodo antecedente que é guardado no programa para cada instante  $t$ .  $T_{i,j}^0$ , é o valor antecedente da temperatura na qual é feito o cálculo da  $FF$ . Por fim,  $cp_{i,j}$ , diz respeito ao calor específico experimental no

nodo a ser avaliado e  $L$  corresponde ao calor latente de fusão. Esta metodologia é válida tanto para a fase de carga como para a fase de descarga, diferenciando apenas, que para a fase de descarga o cálculo é feito até o PCM se encontrar totalmente sólido de novo.

$$ff_{i,j} = f_{i,j}^0 + \frac{cp_{i,j}(T_{i,j} - T_{i,j}^0)}{L} \quad (3.23)$$

### 3.8. Fluxograma

A Figura 3.9 representa o fluxograma do programa de cálculo desenvolvido, em *FORTTRAN* e em dupla precisão. São demonstrados todos os passos para a monitorização da temperatura ao longo do tempo. Partindo da subrotina INIT, onde são definidas as condições iniciais, e após serem impostas as condições de fronteira no domínio, é determinada a distribuição do campo de temperaturas (CALCT). Da mesma maneira é calculada a Fração Fundida de PCM ( $FF$ ) em cada VC (CALCF), e atualizadas as propriedades nos nodos do domínio do PCM (PROPS). O *método da capacidade calorífica efetiva* assim como o *método experimental* estão implementados na subrotina PROPS. No primeiro método é calculado o valor de  $C(T)$  em cada nodo consoante a ocorrência da fase de carga ou descarga do PCM e do valor da  $FF$  em cada VC. O segundo método consiste na atualização dos valores da condutibilidade térmica e do calor específico em função da temperatura ao longo do processo. Por sua vez, o *método do termo-fonte*, é implementado na subrotina CALCT onde são resolvidas as equações algébricas. O termo fonte é calculado através da variação da taxa de  $FF$ , durante a mudança de fase, ao longo do tempo, sendo depois adicionado à equação de conservação de energia.

Assim que se atinge a convergência para um dado instante  $t$ , o programa prossegue para o instante imediato,  $t+\Delta t$ , guardando o valor das variáveis anteriores calculadas ( $T, FF, C$ ). As condições de fronteira são atualizadas a cada instante de tempo, e os processos descritos anteriormente são repetidos até ser atingido os critérios de convergência durante o período de tempo pretendido para cada processo.

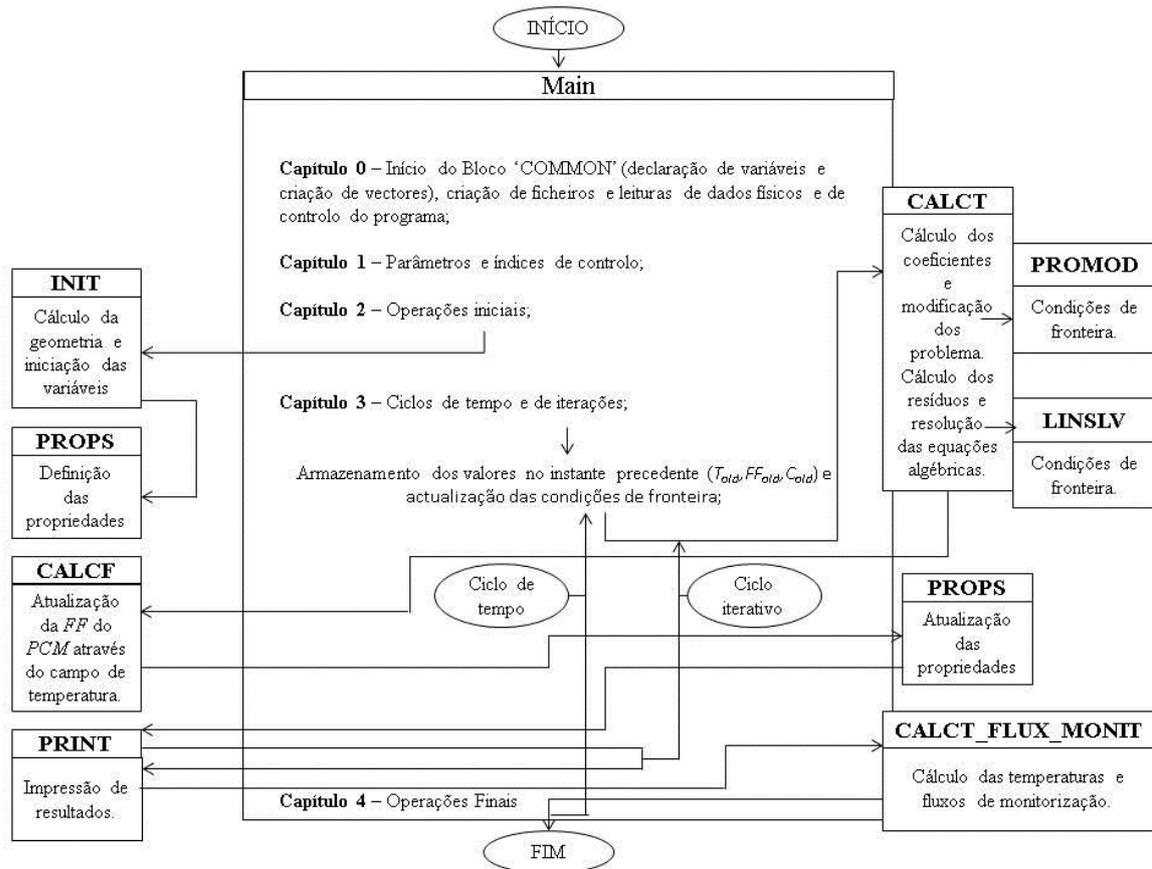


Figura 3.9 – Fluxograma do programa.

### 3.9. Convergência

A convergência para cada instante  $t$  é dependente do grau de convergência ( $SORMAX$ ) que é imposto no programa. Por outras palavras, a convergência é garantida quando a soma dos valores absolutos dos resíduos das equações de discretização for inferior a um determinado valor definido *a priori*. Para tal, foram realizados testes com diferentes ordens de grandeza do  $SORMAX$  para cada método. De acordo com o cálculo de um erro relativo, em relação ao  $SORMAX$  com a maior ordem de grandeza concluiu-se que os valores de  $SORMAX$  para cada método são:  $3 \times 10^{-5}$  para o método da capacidade calorífica efetiva,  $3 \times 10^{-5}$  para o método do termo-fonte e  $3 \times 10^{-6}$  para o método experimental (erros relativos percentuais de 0.12%, 0.13% e 0.15%, respetivamente). A velocidade de convergência irá ter influência na escolha da malha e no incremento temporal a utilizar. Posto isto, no capítulo seguinte é apresentado um estudo feito sobre a influência da malha e do incremento de tempo.

## 4. VALIDAÇÃO DO MODELO NUMÉRICO

Neste capítulo, o modelo numérico descrito anteriormente será validado, mediante a comparação dos resultados numéricos obtidos com os resultados experimentais publicados por Soares *et al.* [1,2], para os três casos de estudo. Será apresentada de forma breve a metodologia experimental descrita nas refs. [1,2], e serão analisados os primeiros resultados numéricos obtidos - testes da influência da malha e da discretização temporal. Posteriormente foram confrontados os diferentes métodos e identificado o método mais eficaz. Finalmente foi feita uma comparação dos resultados obtidos com os resultados publicados por Antunes [3].

### 4.1. Resultados experimentais usados na validação

Os ensaios experimentais realizados por Soares *et al.* [1,2] foram divididos em três grupos, de acordo com o número de cavidades da UAE: 1, 5 e 15 cavidades. Na Figura 4.1, é apresentada uma representação esquemática do ensaio experimental realizado por Soares *et al.*[1], para a obtenção das condições de fronteira, que servirão de *input* para o modelo numérico, e para a monitorização da evolução da temperatura no PCM, que servirá para a validação dos resultados numéricos obtidos.

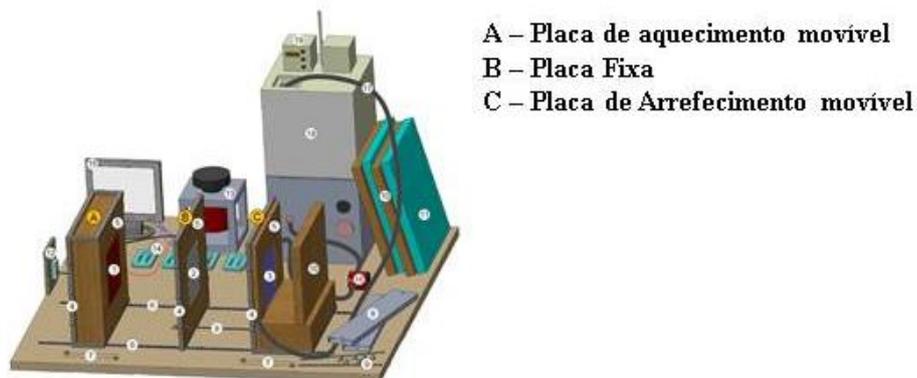


Figura 4.1. – Representação esquemática do ensaio experimental realizado por Soares *et al.* [1].

Para cada grupo são analisadas separadamente as fase de carga e descarga da UAE. A fase de carga é imposta através do aquecimento da placa quente (placa A), em contacto com a fronteira quente da UAE, com uma potência elétrica de 34W. Na face direita da UAE, é considerada uma fronteira adiabática, através da introdução de uma placa

isolante. Ao ser atingida a temperatura de 55 °C no PCM, a fase de carga é interrompida, iniciando-se a fase de descarga. Para o efeito, removeu-se a placa quente, que foi prontamente substituída por uma placa de um material isolante, e junto à face da direita da UAE foi colocada uma placa fria (placa B). O arrefecimento é garantido através da circulação de água no interior da placa fria a uma temperatura de 14 °C. Foram distribuídos termopares nas superfícies quente e frias das UAE, com o intuito de monitorizar a evolução da temperatura a cada 30 segundos. Estes dados experimentais serão implementados no modelo numérico - condições de fronteira. Foi também monitorizada a evolução da temperatura no domínio do PCM em 5 pontos diferentes. Para o início da fase de carga foi imposta uma temperatura inicial do domínio de 13 °C. Para a fase de descarga assume-se uma temperatura inicial do domínio de 55 °C

## 4.2. Propriedades Termofísicas do PCM

Na Tabela 4.1 estão representadas as propriedades do PCM- Micronal<sup>®</sup> DS 5001X. Como descrito na secção 3.6, estes valores presentes na Tabela 4.1 foram fornecidos pelos colegas do DEQ. Para o *método da capacidade calorífica efetiva* e o *método do termo-fonte*, foram considerados valores médios para as condutibilidades térmicas, quer na fase sólida quer na fase líquida. Os valores do calor específico para estes métodos foram retirados da curva do *Reverse Cp*, em que para a fase sólida se considerou o valor correspondente aos 13°C (temperatura inicial), e para a fase líquida considerou-se o valor médio correspondente, entre a temperatura no instante final da mudança de fase e o final do ensaio (aproximadamente 27.3-55 °C). Na Tabela 4.2, encontram-se as propriedades do alumínio.

Tabela 4.1. - Propriedades termofísicas do PCM Micronal® DS 5001X, medidas experimentalmente.

Propriedades	Micronal®DS 5001 X
Temperatura de fusão, [°C]	25.7
$\Delta T_{hist}$	1
Densidade, [kg.m <sup>-3</sup> ]	
Fase Sólida	356
Fase Líquida	356
Calor Específico, [J.kg <sup>-1</sup> .°C <sup>-1</sup> ]	
Fase Sólida	2769
Fase Líquida	2045
Condutibilidade Térmica, [W.m <sup>-1</sup> .°C <sup>-1</sup> ]	
Fase Sólida	0.0802
Fase Líquida	0.0823
Calor Latente, [kJ.kg <sup>-1</sup> ]	84.241

Tabela 4.2. - Propriedades do Alumínio

Propriedades	Alumínio
Densidade, [kg.m <sup>-3</sup> ]	2707
Calor Específico, [J.kg <sup>-1</sup> .°C <sup>-1</sup> ]	896
Condutibilidade Térmica, [W.m <sup>-1</sup> .°C <sup>-1</sup> ]	204

### 4.3. Discretização

É importante garantir que os resultados numéricos já não apresentam qualquer variação significativa com refinamentos quer da malha, quer da discretização temporal. Nesse sentido, devem ser realizados testes de influência de malha e discretização temporal. Numa primeira fase, e visto que se trata de um problema puramente difusivo, foi utilizado um modelo 1D para calcular a evolução da temperatura no domínio do PCM (centro da cavidade). O modelo 1D será usado para o caso da UAE com uma só cavidade (Figura 4.2) Para a discretização espacial, apenas se irá alterar o número de nodos horizontais (NI). Os testes apresentados na secção seguinte foram realizados para a fase de carga considerando uma potência elétrica constante de 34 W. No caso do *método da capacidade calorífica equivalente* foi utilizado o perfil triangular ajustado.

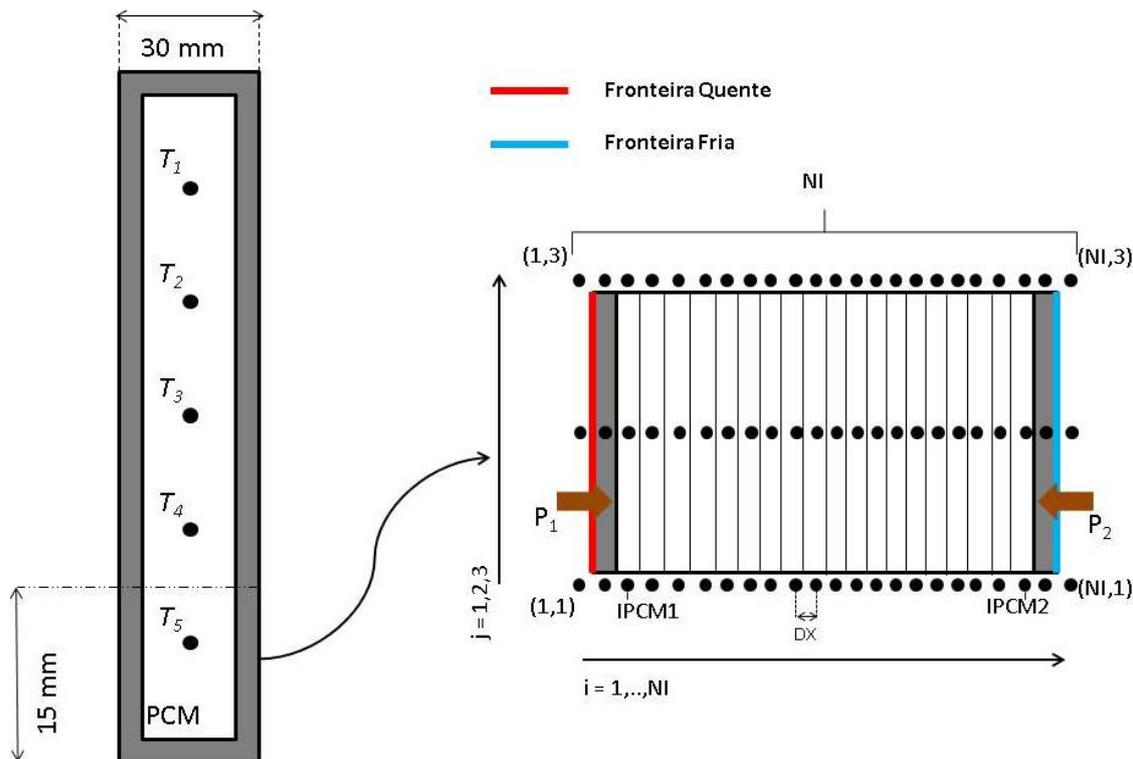


Figura 4.2 - Domínio do modelo 1D considerado para os testes de discretização espacial e temporal.

### 4.3.1. Discretização espacial

Os testes para a influência da malha foram realizados para as seguintes malhas  $NI = 32, 62, 122$  e  $242$ , com um intervalo de tempo,  $\Delta t = 30$  segundos. Os valores de  $TH$  e  $TC$  são condições de fronteira impostas, sendo atualizadas ao longo do tempo a cada  $\Delta t$ . Nas Figuras 4.3, 4.4 e 4.5, estão representadas as evoluções da temperatura no domínio do PCM ao longo do tempo, para diferentes malhas, e para o *método do termo-fonte* (MTF), *método da capacidade calorífica efetiva* (MCCE) e para o *método do “Reverse Cp”*, respetivamente. É também apresentada a distribuição do erro relativo ( $ER$ ), que foi calculado através da malha mais refinada ( $NI = 242$  nodos). Em relação à distribuição temporal da temperatura observamos uma sobreposição das quatro malhas nos diferentes métodos, não existindo qualquer alteração significativa na evolução da temperatura. No que diz respeito ao  $ER$ , para os três métodos observa-se que as malhas de 62 e 122 nodos, já pouco variam em relação à malha mais refinada. Inclusive, apresentam um erro médio muito baixo, inferior a 0,011 % e 0,0083 %, respetivamente. Por outro lado a malha com 32 nodos, apresenta ligeiras diferenças em relação à malha de 242 nodos, o que seria de esperar, visto que o domínio em análise é muito “grosseiro”. O erro médio desta malha de

32 nodos é inferior a 0,35 %, o que acaba por ser também um valor muito baixo, mas em relação às outras duas já é um aumento considerável. Esta diferença de valores deve-se em grande parte aos pontos críticos, que podemos observar no gráfico, correspondentes ao início e fim da fusão do PCM.

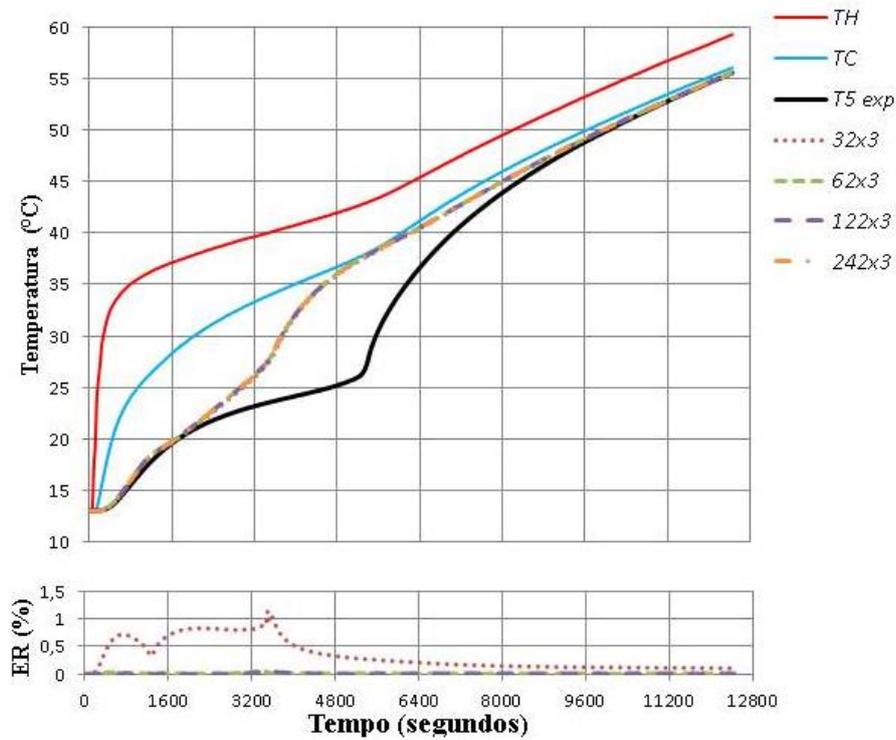


Figura 4.3 – Representação temporal da evolução da temperatura no local do  $T_5$  e do Erro Relativo para diferentes malhas - *método do termo-fonte*.

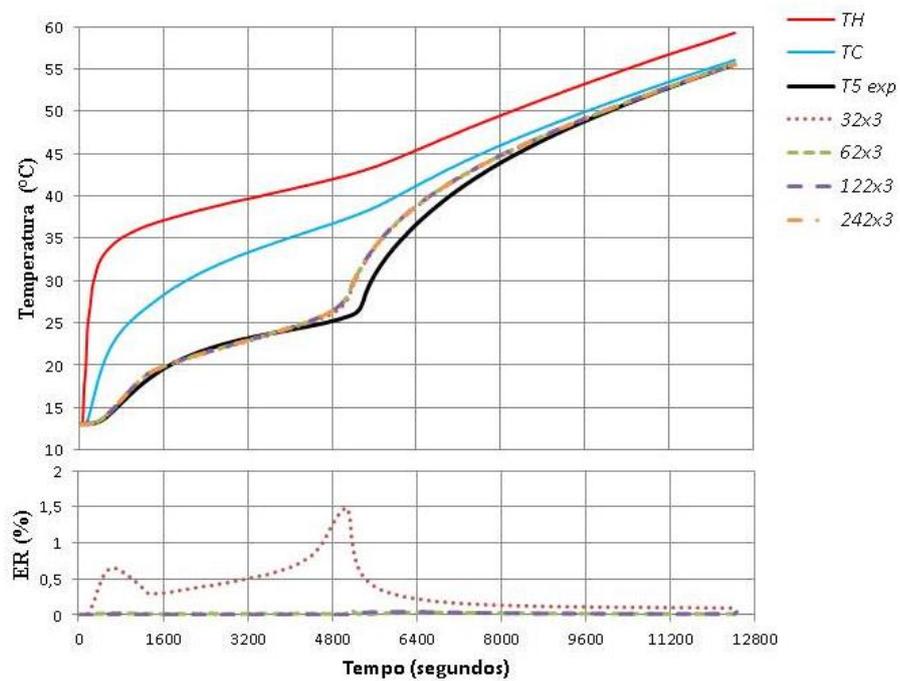


Figura 4.4 – Representação temporal da evolução da temperatura no local do  $T_5$  e do Erro Relativo para diferentes malhas – perfil triangular ajustado do método da capacidade calorífica efetiva.

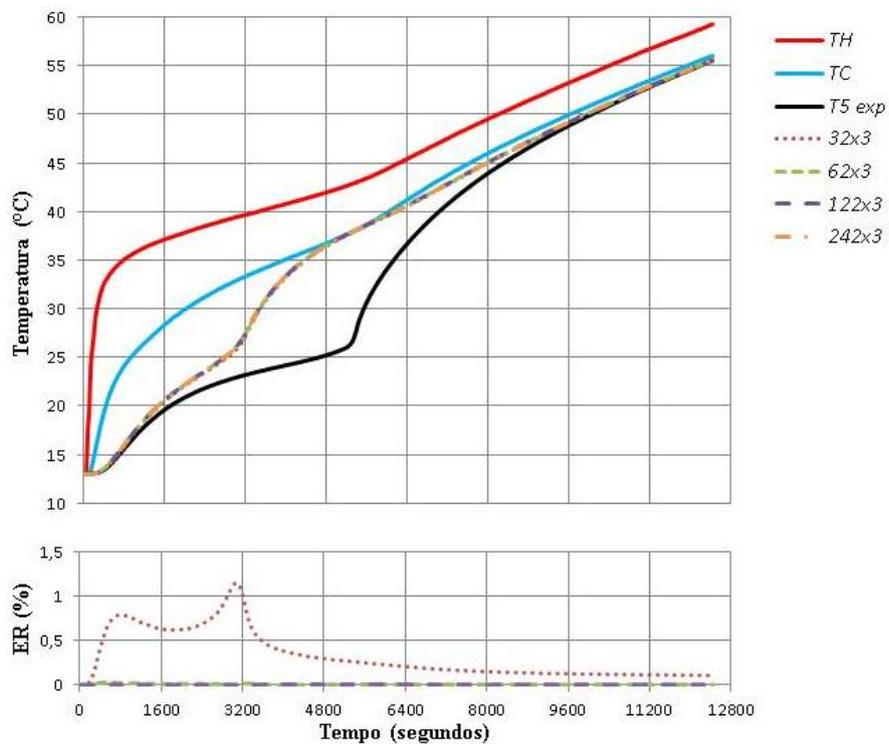


Figura 4.5 – Representação temporal da evolução da temperatura no local do  $T_5$  e do Erro Relativo para diferentes malhas - método do *Reverse Cp*.

### 4.3.2. Discretização temporal

Para os testes de discretização temporal fixou-se a malha, de 62 nodos, e fez-se variar o intervalo de tempo,  $\Delta t = 5, 10, 15, 30$  e  $60$  segundos. Como os valores de  $TH$  e  $TC$  só são conhecidos a cada  $30$  segundos, para os restantes instantes, os valores foram calculados por interpolação linear. As Figuras 4.6, 4.7 e 4.8, mostram a distribuição temporal da temperatura, de acordo com os diferentes intervalos de tempo, para os três métodos em estudo. Verifica-se que existe novamente uma sobreposição da temperatura para os cinco intervalos de tempo considerados, não se observando qualquer alteração significativa. É apresentado também a evolução do  $ER$  (calculado em relação ao  $\Delta t$  menor  $\Delta t = 5$  segundos), na qual já podemos destacar algumas diferenças. Para os três métodos destacam-se dois pontos críticos, correspondentes ao início e final da mudança de fase. Isto seria de esperar uma vez que ao simular testes com diferentes intervalos de tempo, nos intervalos mais pequenos a evolução da temperatura demora mais tempo a processar-se enquanto nos intervalos maiores a evolução é feita de uma forma mais rápida, resultando daí que as temperaturas apresentam valores diferentes no início e no fim da mudança de fase.

Verifica-se que os  $\Delta t = 10$  e  $15$  s apresentam o menor  $ER$  em todos os métodos variando entre valores médios de  $0.022\%$  e  $0.085\%$ . Por sua vez, o  $\Delta t = 30$  s, apresenta também um valor médio de  $ER$  baixo, cerca de  $0.098\%$  para o MTF,  $0.20\%$  para o MCCE e  $0.15\%$  para o *Reverse Cp*. Por fim, o  $\Delta t = 60$  segundos, foi o teste com maior  $ER$  em todos os métodos, e também onde é atingido o maior “pico” correspondente dos pontos críticos, aproximadamente de  $1.3\%$  para o MTF no início da fusão,  $2.6\%$  no final da fusão para o MCCE e  $2.1\%$  para o *Reverse Cp* no início da fusão.

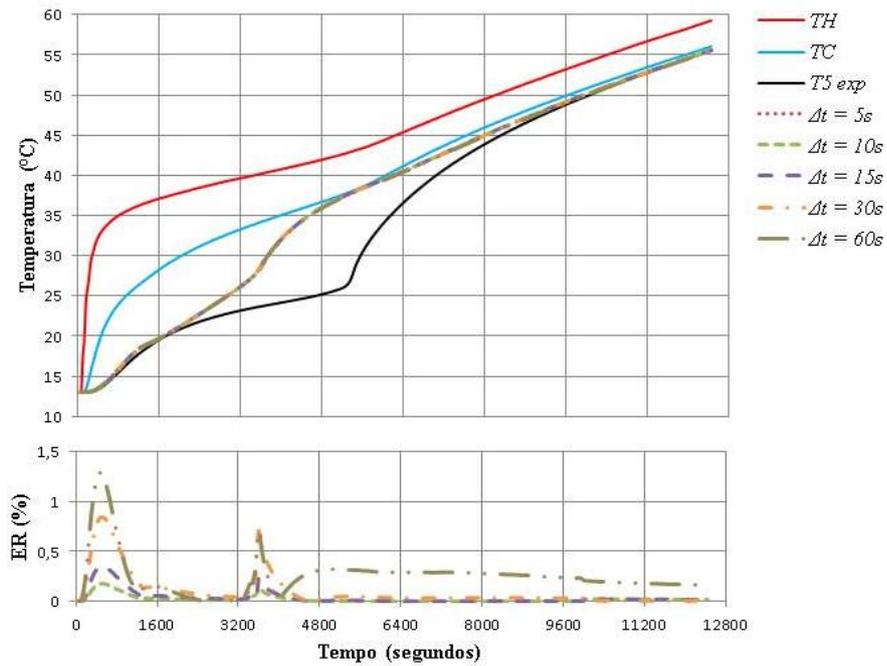


Figura 4.6 – Representação temporal da evolução da temperatura no local  $T_5$  e do Erro Relativo para diferentes  $\Delta t$  - método do termo-fonte.

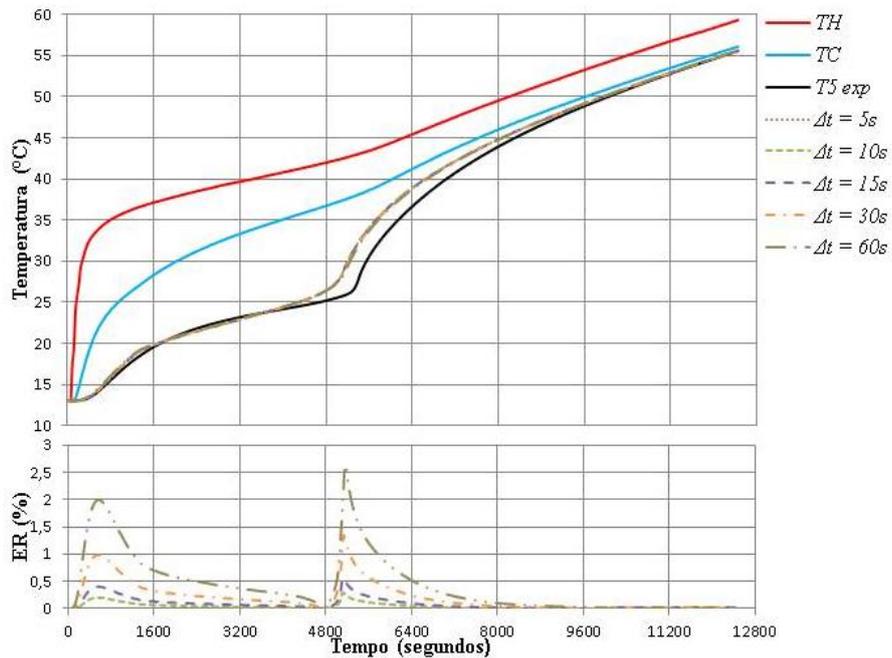


Figura 4.7 – Representação temporal da evolução da temperatura no local do  $T_5$  e do Erro Relativo para diferentes  $\Delta t$  - perfil triangular ajustado do método da capacidade calorífica efetiva.

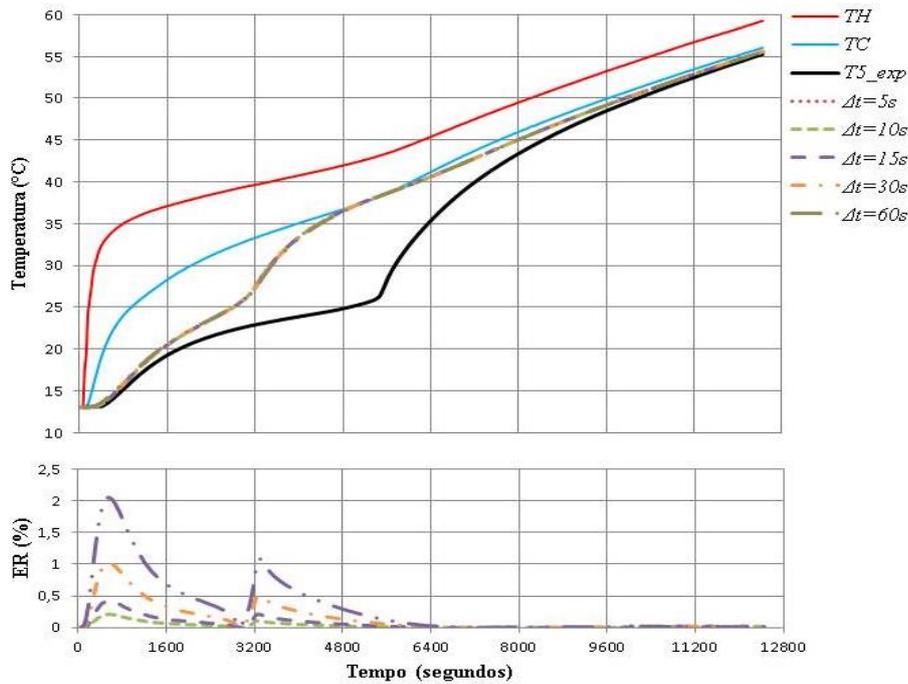


Figura 4.8 – Representação temporal da evolução da temperatura no local do  $T_5$  e do Erro Relativo para diferentes  $\Delta t$  – método do *Reverse Cp*.

#### 4.3.3. Escolha da malha e da discretização temporal

Considerando os resultados apresentados nas duas secções anteriores, considerou-se adequado o uso de uma malha com 62 nodos e um intervalo de tempo,  $\Delta t$  de 30 segundos. As malhas com 122 e 242 nodos eram também boas escolhas, uma vez que os resultados não oscilavam muito, tendo contudo a escolha da malha em conta a velocidade de cálculo, pois quanto mais refinada é uma malha, mais tempo irá demorar a processar os cálculos. Posto isto, para uma cavidade retangular a ser estudada, será utilizada uma malha de 62 x 602 nodos (VC de 0.5 mm x 0.5 mm).

#### 4.4. Comparação dos métodos

Na Figura 4.9 é apresentado um estudo comparativo dos diferentes métodos, considerando o mesmo modelo 1D. A curva a preto representa os resultados experimentais (curva de referência). Verifica-se que o MTF e o método experimental *Reverse Cp* apresentam-se muito afastados da curva de referência, originando tempos de fusão muito rápidos. Este curto intervalo de fusão, no MTF, pode ser explicado pelo facto de na Eq. 3.18, o termo fonte ser tratado como um calor adicional que contabiliza a taxa de calor latente através da taxa de alteração da fração fundida, originando assim um período de

fusão muito rápido. No caso do *Reverse Cp*, uma vez que os valores da capacidade calorífica e da condutibilidade térmica são lidos e atualizados de acordo com os resultados dos ensaios laboratoriais feitos no DEQ, o processo de fusão respeita esses mesmos valores de acordo com a evolução da temperatura, podendo resultar numa mudança de fase muito prematura. De toda a maneira, mais trabalho tem que ser desenvolvido futuramente para tentar compreender melhor se este desfasamento, entre as curvas experimental e numérico, poderá ser causado por alguma falha na implementação dos próprios modelos numéricos.

Relativamente ao MCCE, os dois perfis, triangular ajustado e quadrangular, já se aproximam mais da curva experimental, resultando assim numa mudança de fase mais satisfatória. Podemos ainda concluir que o perfil triangular ajustado se destaca do perfil quadrangular, resultando num processo mais eficaz. Posto isto, e uma vez que os primeiros dois métodos apresentam resultados prematuros, doravante será apenas feita a análise para o método mais eficaz, o método da capacidade calorífica efetiva com um perfil triangular ajustado.

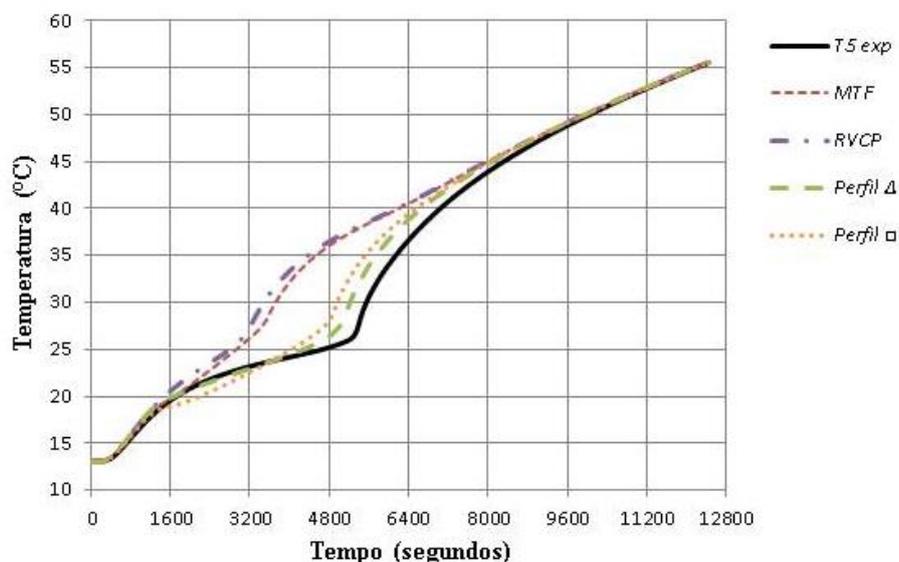


Figura 4.9 – Análise da evolução da temperatura em  $T_5$  ao longo do tempo para os diferentes métodos.

#### 4.5. Influência da densidade e dos valores de $\Delta T_1$ e $\Delta T_2$

Antes de avançar para o modelo 2D foram realizados testes para avaliar a influência da densidade do PCM e dos valores de  $\Delta T_1$  e  $\Delta T_2$  (usados na implementação do método do perfil triangular ajustado)

Considerando o valor da densidade apresentado na Tabela 4.1, notou-se um afastamento significativo dos resultados numéricos em relação à curva experimental. Porém, conclui-se através de alguns testes que o aumento da densidade aproximaria os resultados numéricos aos experimentais. Este aumento da densidade é justificado através dos resultados obtidos por Pais [23] para um ensaio com uma UAE com 5 cavidades, em que o valor calculado para a massa volúmica do PCM era de  $489 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ . A medição foi feita de acordo com a Figura 4.10, no qual foi retirado o valor do volume das canetas BIC, que serviam de suporte físico para garantir o posicionamento dos termopares no centro geométrico das cavidades. Isto comprova que para uma UAE com uma só cavidade, em que o grau de compactação do PCM microencapsulado é maior, podemos realmente considerar valores superiores para a densidade do PCM, em comparação com os valores apresentados na Tabela 4.1.

Massa de PCM + AL	kg	3,162
Massa de Al (provetes vazios)	kg	2,127
Massa de PCM	kg	1,035
Volume PCM	$\text{m}^3$	2,1549E-03
Massa volúmica	$\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$	480
Volume das canetas	$\text{m}^3$	3,64425E-05
Volume PCM sem canetas	$\text{m}^3$	2,1184E-03
Massa volúmica	$\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$	489

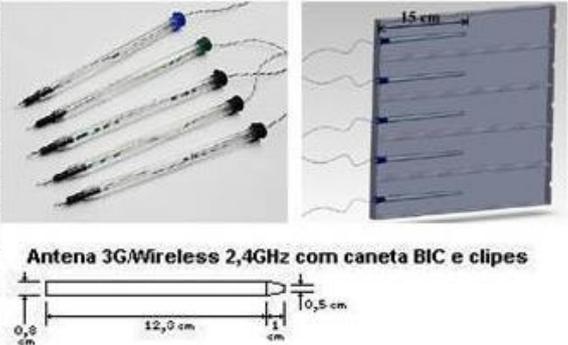


Figura 4.10 – Cálculo da massa volúmica presente numa UAE com 5 cavidades (adaptado da ref. [23]).

Antes de serem apresentados os testes de influência da densidade, terá que se ajustar os valores do  $\Delta T_1$  e  $\Delta T_2$ , para que, de acordo com o estudo feito e mencionado na secção 3.4, o valor do  $Cp_{máx}$  seja devidamente ajustado.

A Figura 4.11 mostra a influência de  $\Delta T_1$  e  $\Delta T_2$ . Estes valores podem ser escolhidos tendo por base a curva experimental do *Reverse Cp* (Figura 3.7). Verifica-se que o valor do  $\Delta T_1$  terá que ser superior ao do  $\Delta T_2$ . Para este estudo fixou-se um valor para a densidade do PCM de  $\rho = 489 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ .

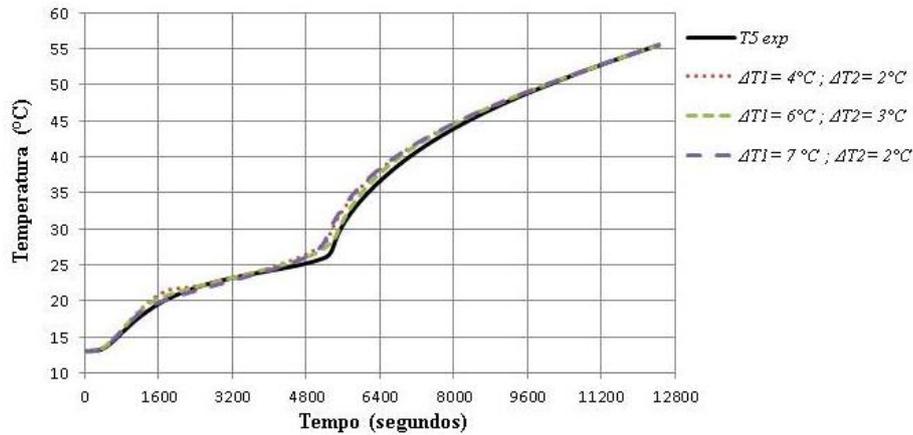


Figura 4.11 – Estudo da influência de  $\Delta T_1$  e  $\Delta T_2$  no perfil triangular ajustado do método da capacidade calorífica efetiva.

É notória a influência dos valores  $\Delta T_1$  e  $\Delta T_2$ , provocando uma oscilação no declive das curvas numéricas. Revelam-se como valores mais adequados  $\Delta T_1 = 7^\circ C$  e  $\Delta T_2 = 2^\circ C$ . A Figura 4.12 apresenta o estudo da influência da densidade do PCM para  $\Delta T_1 = 7^\circ C$  e  $\Delta T_2 = 2^\circ C$ . Os valores da densidade foram alterados de acordo com um fator multiplicativo inicial de 1.373 (razão entre o valor medido para 5 cavidades e o valor obtido no DEQ). De seguida foi utilizado um fator de 1.4 e por fim de 1.5. Conforme mencionado anteriormente, o valor da densidade do PCM influencia bastante os resultados numéricos, aproximando-os melhor aos resultados experimentais. Doravante será utilizado um valor de  $\rho = 489 \text{ kg.m}^{-3}$ .

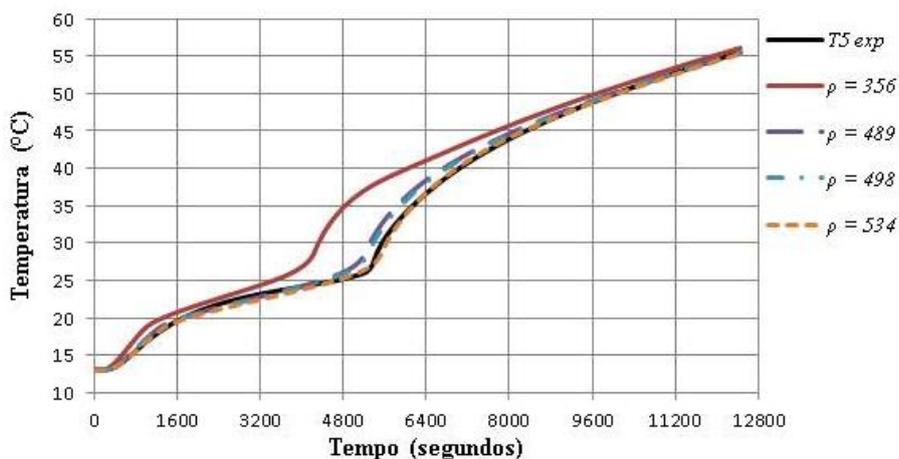
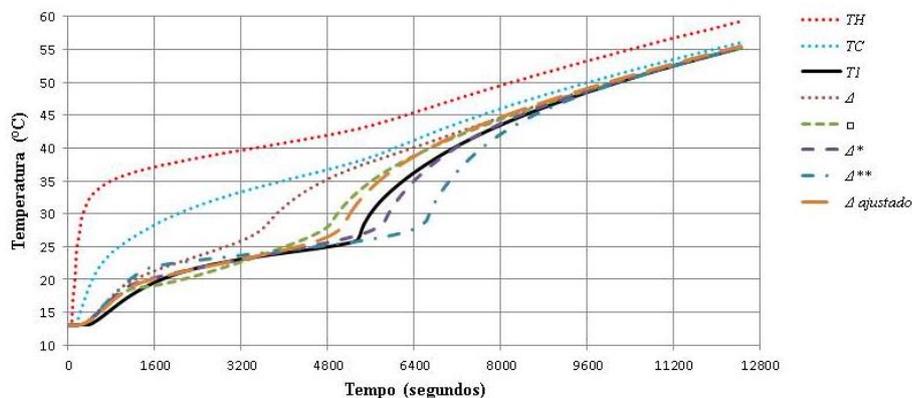


Figura 4.12 – Estudo da influência da densidade do PCM para  $\Delta T_1 = 7^\circ C$  e  $\Delta T_2 = 2^\circ C$  - método da capacidade calorífica efetiva com perfil triangular ajustado.

## 4.6. Comparação com resultados antigos

Nesta secção será feita a comparação entre os resultados numéricos obtidos (modelo 1D) e os resultados obtidos por Antunes [3] de modo a demonstrar a melhoria dos resultados através da correção do perfil triangular. Foram feitos testes usando os diferentes perfis mencionados anteriormente: triangular, quadrangular, triangular corrigido e o novo *perfil triangular ajustado* (Figura 3.5). Nestes testes, as propriedades utilizadas foram as mesmas mencionadas anteriormente (ver Tabela 4.1), exceto o valor do calor específico, em que, foi considerado um valor médio dos resultados apresentados pelo DEQ, de  $2260 \text{ J.kg}^{-1}.\text{°C}^{-1}$ . A Figura 4.13 mostra a comparação dos diferentes perfis, para a fase de carga a uma potência de 34 W.



**Figura 4.13 – Comparação dos resultados numéricos obtidos considerando diferentes perfis na implementação do método da capacidade calorífica efetiva..**

A diferença dos diferentes perfis é evidente. Ao comparar o perfil triangular ( $\Delta$ ) com o triangular ajustado ( $\Delta_{\text{ajustado}}$ ), evidencia-se uma discrepância enorme. Em relação ao perfil triangular com  $\Delta T_1 = 7 \text{ °C}$  e  $\Delta T_2 = 2 \text{ °C}$  ( $\Delta^*$ ), notamos que aumentando o calor latente o comportamento da curva se aproxima dos resultados experimentais igualando o perfil quadrangular ( $\square$ ), em termos de energia armazenada. No entanto este ajuste já não é adequado considerando, por exemplo, um  $\Delta T_1 = 4 \text{ °C}$  e  $\Delta T_2 = 2 \text{ °C}$ , representado como o modelo ( $\Delta^{**}$ ), afastando os resultados numéricos dos experimentais. Por outro lado, o *perfil triangular ajustado* corrige automaticamente, não só o défice de energia, mas também a evolução temporal da temperatura. Pelo referido, a duplicação do valor do calor latente no perfil triangular, para corrigir o défice de energia armazenada/restituída em relação ao perfil quadrangular, apenas resulta para certos valores de  $\Delta T_1$  e  $\Delta T_2$ . Consequentemente deverá ser usado o perfil triangular ajustado ( $\Delta_{\text{ajustado}}$ ) que corrige o défice de energia resultante do perfil triangular e evidencia uma melhor distribuição da temperatura.

Assim, foi calculada a energia armazenada para os diferentes perfis, através da integração da potência fornecida ao PCM por metro de profundidade ( $\Delta z = 1\text{m}$ ), ao longo do tempo, de forma a comprovar o que foi explicado anteriormente. A potência corresponde à soma de  $P_1$  e  $P_2$  (Figura 4.2), obtidos através das equações (4.1) e (4.2) para a interface adjacente ao nodo  $IPCM1$  e  $IPCM2$ , respetivamente:

$$P_1 = \frac{T(IPCM1 - 1,2) - T(IPCM1,2)}{\frac{0.5 \times DX}{k(IPCM1,2) \times 1 \times 0.03} + \frac{0.5 \times DX}{k(IPCM1 - 1,2) \times 1 \times 0.03}} \quad (4.1)$$

$$P_2 = \frac{T(IPCM2 + 1,2) - T(IPCM2,2)}{\frac{0.5 \times DX}{k(IPCM2,2) \times 1 \times 0.03} + \frac{0.5 \times DX}{k(IPCM2 + 1,2) \times 1 \times 0.03}} \quad (4.2)$$

Na Tabela 4.3 são expostos os valores da energia armazenada para cada perfil, o  $ER$  do resultado numérico em relação aos resultados experimentais, e ainda o  $ER$  da energia tendo por base o valor teórico da energia calculado através da Eq. 4.3.

$$E_{teórica} = \rho_{PCM} \times V_{PCM} \times [C_{ps} \times (T_f - T_{inicial}) + L + C_{pl} \times (T_{final} - T_f)] \quad (4.3)$$

**Tabela 4.3. – Comparação dos valores de energia teórica armazenada com os valores obtidos numericamente e  $ER$  de temperatura e energia para os diferentes perfis.**

$E$ =[kJ]; $ER$ = [%]	Perfis				
	$\Delta$	$\square$	$\Delta^*$	$\Delta^{**}$	$\Delta_{ajustado}$
<b>Energia armazenada</b>	7.72	10.12	11.41	12.44	9.45
<b>Energia teórica</b>	9.76				
<b><math>ER</math> energia</b>	20.9	3.7	16.95	27.53	3.11
<b><math>ER T_{Inum}</math></b>	10.39	4.42	2.0	5.35	3.4

Como se pode observar o perfil triangular ajustado é o que apresenta valores mais baixos de  $ER$ , face à distribuição da temperatura e face ao valor teórico de energia armazenada. De acordo com os valores presentes na Tabela 4.3 concluímos mais uma vez que, para o perfil triangular corrigido, apresentado por Antunes [15] se ajustam apenas para os ensaios realizados pelo mesmo.

## 5. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste capítulo serão apresentados os resultados obtidos com modelo 2D para o método mais eficaz, o perfil triangular ajustado do *método da capacidade calorífica efetiva*. Também é feita uma análise paramétrica para avaliar o impacto da incorporação de alhetas no seio do PCM: serão estudadas UAE com 1, 5 e 15 cavidades. A fase de carga é simulada para uma potência elétrica de 34 W e os testes de descarga considerando a água do banho termostatzado a 14 °C.

### 5.1. Monitorização do domínio 2D

Com o objetivo de comparar os resultados numéricos com os resultados experimentais, foi calculada a evolução da temperatura nos pontos  $T_{1num}$ ,  $T_{2num}$ ,  $T_{3num}$ ,  $T_{4num}$  e  $T_{5num}$ , conforme se demonstra na Figura 5.1. Estes pontos correspondem aos locais de monitorização da temperatura no domínio do PCM medidos experimentalmente. A potência fornecida ao PCM,  $P_{TOT}$ , na interface PCM-Alumínio foi também calculada. Através da sua integração ao longo do tempo, foi calculada a energia armazenada pelo PCM, na fase de carga e a energia restituída durante o processo de descarga. A potência foi determinada, através do cálculo das resistências térmicas entre os nodos (de VCs de materiais diferentes).

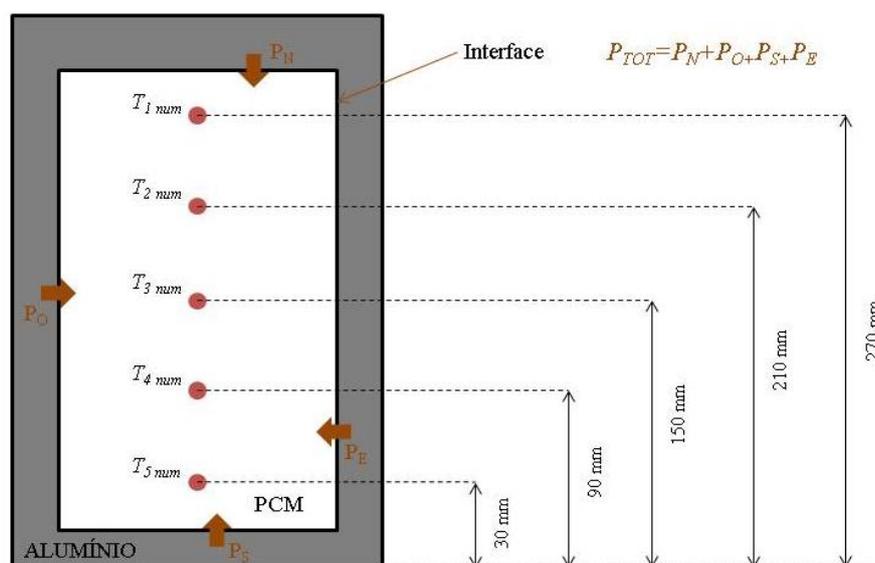


Figura 5.1 – Representação esquemática da localização dos pontos de monitorização da temperatura e da potência calculada.

## 5.2. UAE com uma só cavidade

De modo a simplificar a apresentação dos resultados, apenas foi apresentada a evolução da temperatura relativa ao terceiro ponto de monitorização ( $T_{3num}$ ). Os resultados para os restantes pontos de monitorização são bastante semelhantes. A evolução da temperatura medida experimentalmente na mesma posição foi usada como curva de referência ( $T_3$ ).

### 5.2.1. Fase de carga

Na Figura 5.2 estão representados os resultados numéricos e experimentais para uma potência constante de 34 W. A evolução da  $FF$  encontra-se também representada na mesma figura. Verifica-se que a mudança de fase é iniciada sensivelmente ao mesmo tempo para ambos os estudos, numérico e experimental. Em contrapartida, no momento em que o PCM se encontra totalmente fundido, ocorre um ligeiro atrasado em relação ao experimental, chegando a atingir uma diferença máxima de 5.4 °C ao fim de 5460 segundos. Foi calculado o  $ER$  médio de  $T_{3num}$ , entre os 2000 e 6000 segundos (intervalo onde ocorre a mudança de fase - experimental), resultando num valor de 5.30 %. O motivo pelo qual ocorre este desvio pode ser explicado pela influência do valor da densidade do PCM. Conforme mencionado na secção 4.4, o valor da densidade usado foi medido experimentalmente para uma UAE com 5 cavidades, mas acredita-se que o valor para uma UAE de uma só cavidade possa ser maior, devido ao grau de compactação do PCM. De forma a comprovar este fundamento, foi aumentado o valor da densidade em cerca de 10%, passando para 538 kg.m<sup>-3</sup> (Figura 5.3).

Conforme previsto, e por observação da Figura 5.3, é perfeitamente admissível considerar valores da densidade maiores uma vez que se demonstra uma perfeita evolução da temperatura de acordo com os resultados experimentais. No intervalo referido anteriormente, o  $ER$  médio foi de 1.99%, diminuindo em relação aos resultados da Figura 5.2. A diferença máxima para este teste foi de 1.15 °C. O tempo de fusão para este teste, como seria de esperar, aumentou cerca de 280 segundos em relação ao primeiro. Doravante, irá ser utilizado este último valor da densidade.

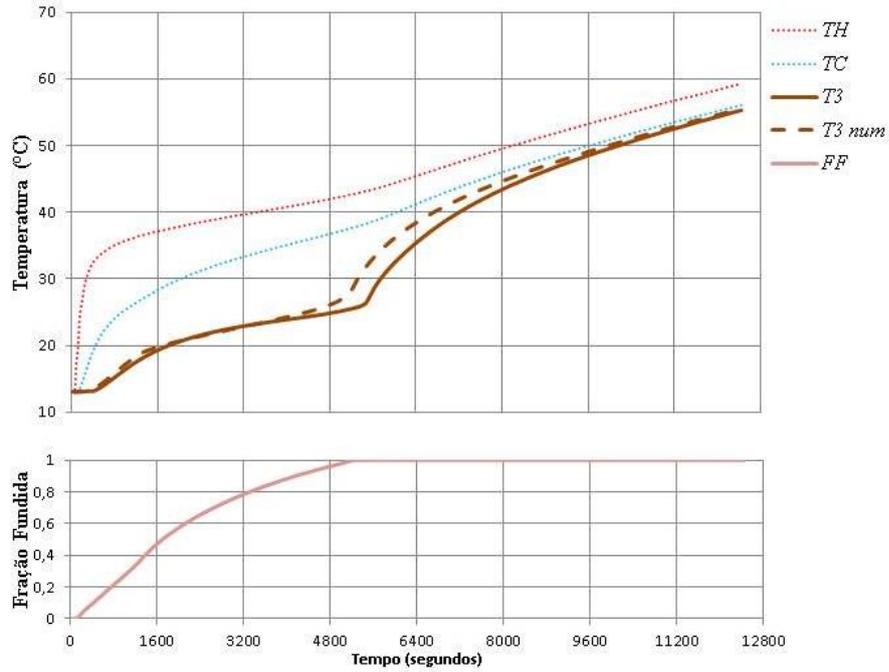


Figura 5.2 – Evolução temporal da temperatura obtida numérica e experimentalmente na UAE de uma só cavidade, durante a fase de aquecimento com uma potência de 34 W, considerando uma densidade de  $489 \text{ kg.m}^{-3}$ . Em baixo encontra-se a evolução temporal da FF total de PCM.

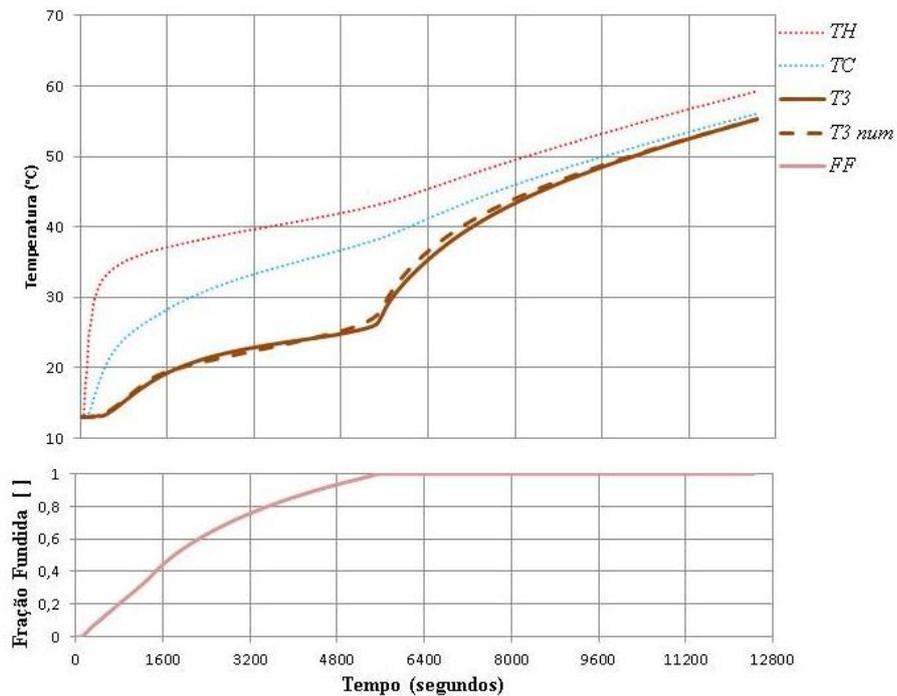


Figura 5.3 – Evolução temporal da temperatura obtida numérica e experimentalmente na UAE de uma só cavidade, durante a fase de aquecimento com uma potência de 34 W, considerando uma densidade de  $538 \text{ kg.m}^{-3}$ . Em baixo encontra-se a evolução temporal da FF total de PCM.

As Figuras 5.4 e 5.5 representam, respetivamente, a evolução da distribuição de temperatura ( $T$ ) e da fração fundida ( $FF$ ) de PCM, para o ensaio com uma potência de 34 W, durante o processo de fusão. Aos 600 segundos, nota-se que a fusão se inicia nas zonas mais próximas da fronteira quente, como seria de esperar. Em contrapartida, do lado da fronteira fria a fusão avança de forma mais lenta, levando a que o material localizado na zona central, mais próximo dessa fronteira, seja o último a fundir, conforme se pode observar aos 4200 segundos. Na fronteira norte e sul, ainda é visível, para cada instante, uma influência significativa das paredes de alumínio, coincidindo com a fusão rápida do material que lhe é adjacente.

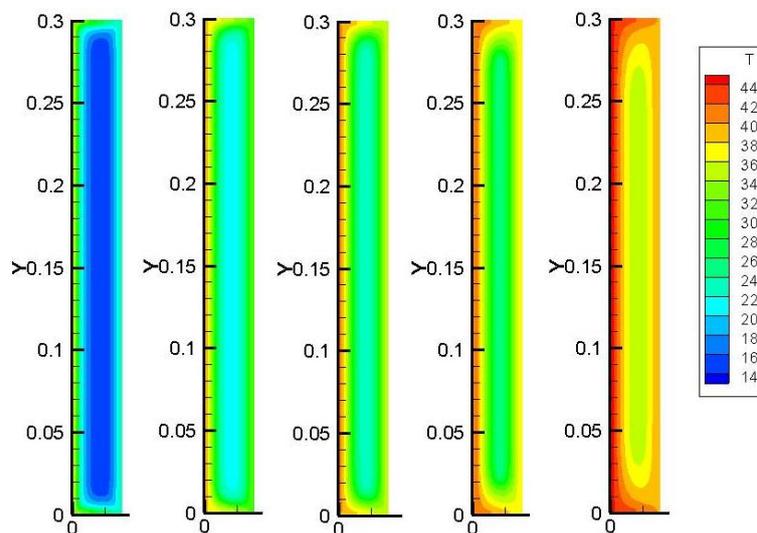


Figura 5.4 – Distribuição da temperatura em °C aos 600, 2400, 3000, 4200 e 6000 segundos.

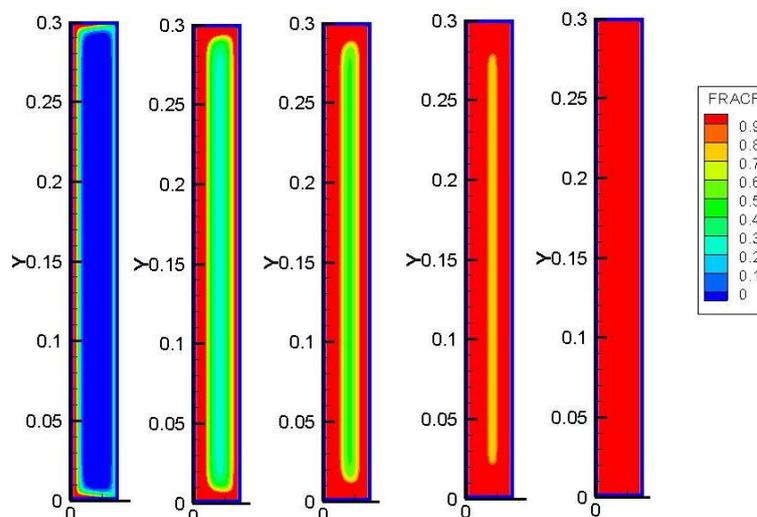
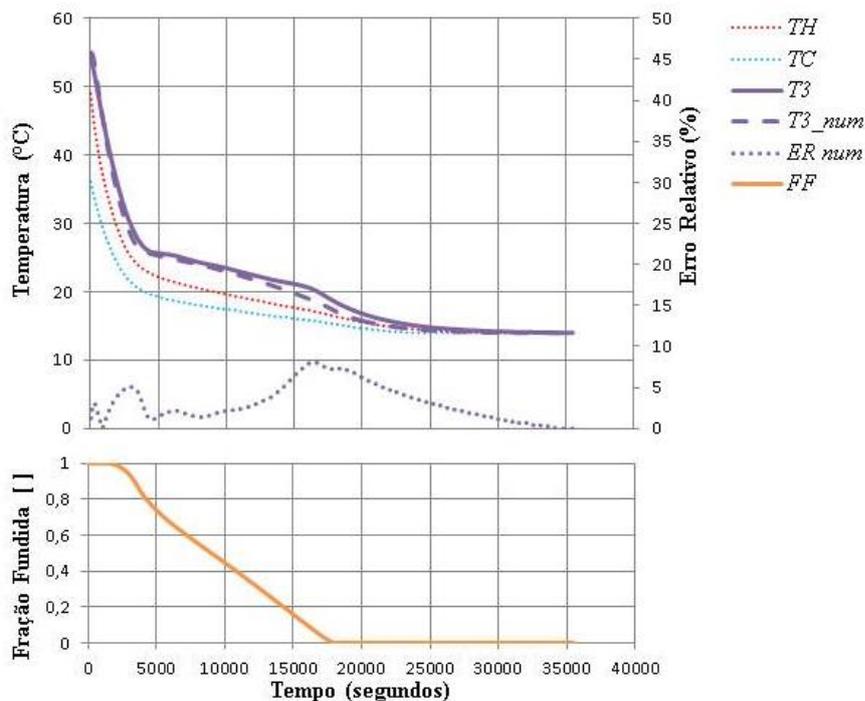


Figura 5.5 – Distribuição da  $FF$  de PCM aos 600, 2400, 3000, 4200 e 6000 segundos.

### 5.2.2. Fase de descarga

Foram realizados testes para simular a fase de descarga, em que o PCM é arrefecido até uma temperatura de 14 °C. Os resultados são expostos na Figura 5.6. Para estes ensaios, recorreu-se à Figura 3.7 admitindo um  $\Delta T_{hist} = 1.5$  °C através da interpretação das duas curvas correspondentes às fases de carga e de descarga. O *ER* que se observa na Figura 5.6 é perfeitamente aceitável, uma vez que durante o processo de solidificação, sensivelmente entre os 3000 e 17000 segundos, o erro médio é inferior a 3.7%. No restante processo de descarga (à exceção de um ponto crítico onde existe um erro máximo de 8% correspondendo a uma diferença de 1.6 °C), o *ER* médio dos resultados numéricos é também pequeno não chegando a ultrapassar os 3.7 %. No entanto, poderiam ser feitos alguns ajustes nos valores de  $\Delta T_1$  e  $\Delta T_2$  com o objetivo de reduzir o *ER*, nomeadamente no ponto crítico, que corresponde ao final do processo de solidificação.



**Figura 5.6 - Evolução temporal da temperatura obtida numérica e experimentalmente na UAE de uma só cavidade, durante a fase de descarga a uma temperatura de 14 °C. No eixo secundário encontra-se o *ER* de  $T_{3num}$ . Em baixo é representada a evolução da *FF* de PCM.**

Nas Figuras 5.7 e 5.8 são apresentadas as evoluções de *T* e *FF* até ao momento em que o PCM se encontra totalmente solidificado. Conforme observado anteriormente, o início da solidificação volta a ser notório na camada de PCM que se encontra junto da fronteira fria. Da mesma forma, do lado oposto, o material que se encontra na zona central e mais próxima da fronteira quente, é o último a solidificar. A influência das fronteiras de

alumínio no topo e na zona inferior voltam a ser significantes, solidificando de forma mais rápida o material que lhes está adjacente

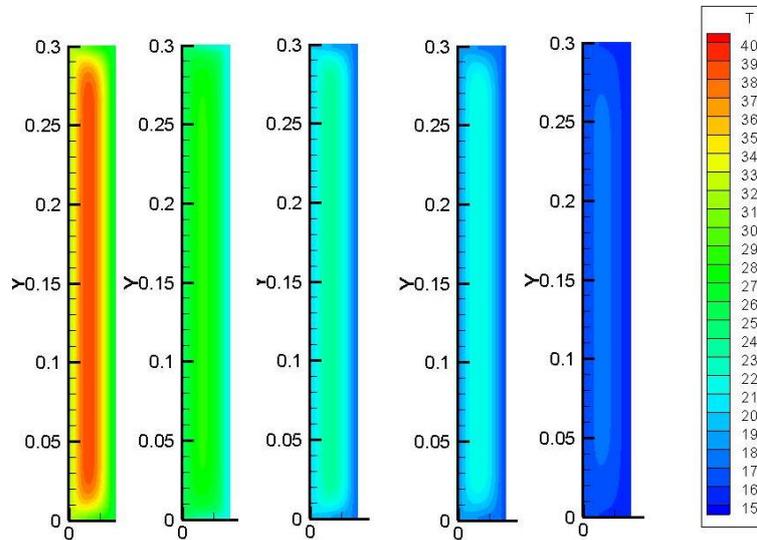


Figura 5.7 – Distribuição da temperatura em °C aos 1500, 3000, 9000, 12000 e 18000 segundos.

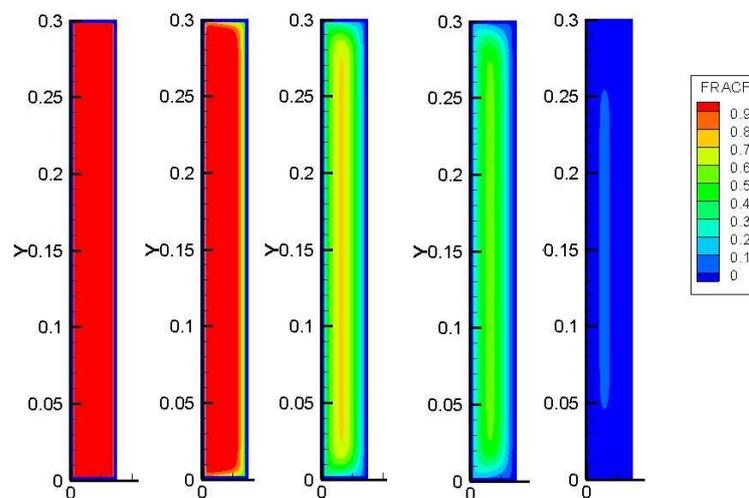


Figura 5.8 – Distribuição da FF de PCM aos 1500, 3000, 9000, 12000 e 18000 segundos.

### 5.3. UAE com 5 e 15 cavidades

De forma análoga à secção anterior, para os testes das UAE com 5 e 15 cavidades, apenas serão apresentadas as evoluções da temperatura relativa ao terceiro ponto de monitorização ( $T_{3num}$ ). Os resultados para os restantes pontos de monitorização são bastante semelhantes.

#### 5.3.1. Fase de carga

Na Figura 5.9 mostram-se os resultados obtidos para a fase de carga do PCM numa UAE com 5 cavidades. Para este ensaio foram utilizados valores de  $\Delta T_1=7\text{ }^\circ\text{C}$  e  $\Delta T_2=0.5\text{ }^\circ\text{C}$ . Verifica-se uma sobreposição quase perfeita dos resultados numéricos com os experimentais. Isto deve-se ao facto de o valor da densidade utilizada para estes ensaios corresponder ao valor medido experimentalmente para uma UAE com 5 cavidades. O  $ER$  médio de  $T_{3num}$  corresponde a 1.71% atingindo o seu maior pico no final da mudança de fase, sensivelmente aos 4920 segundos, correspondendo a uma diferença máxima de temperaturas de  $1.36\text{ }^\circ\text{C}$ .

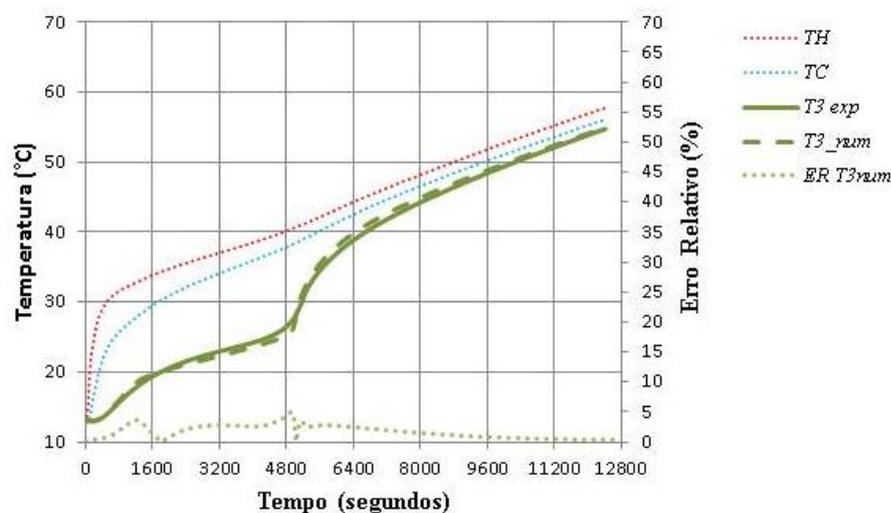


Figura 5.9 – Evolução temporal da temperatura obtida numericamente e experimentalmente para uma UAE com 5 cavidades, durante a fase de carga com uma potência de 34 W. No eixo secundário, à direita, encontra-se o  $ER$  de  $T_{3num}$ .

Através da Figura 5.10, onde é feita a comparação das UAE com e sem alhetas, podemos observar que apesar da UAE com 5 cavidades completar primeiro o processo de fusão, a diferença do tempo necessário para fundir o PCM é de 600 segundos. É certo que as unidades de armazenamento têm a mesma potência de aquecimento, pelo que o tempo

de fusão não deve diferir muito. No entanto, com a incorporação de 4 alhetas metálicas e consequente redução do volume de PCM a diferença do tempo de fusão devia ser um pouco maior.

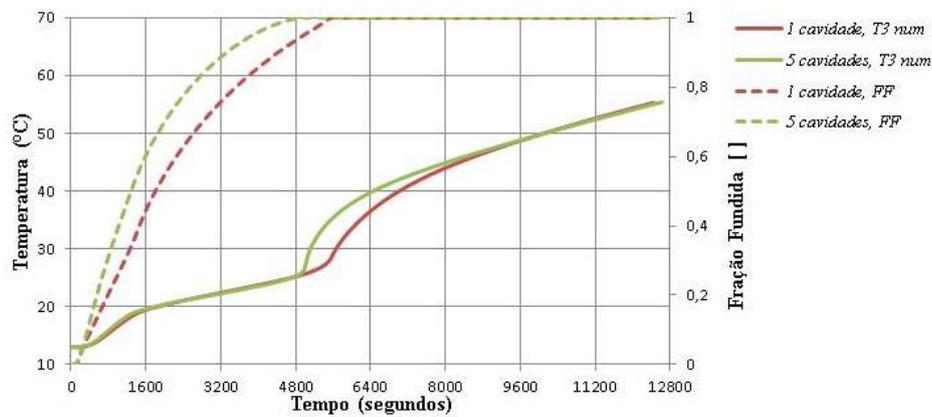


Figura 5.10 – Comparação da evolução temporal de  $T_{3num}$  obtida numericamente para UAE com 1 e 5 cavidades durante a fase de carga a 34 W. No eixo secundário apresenta-se a evolução da FF de PCM para as diferentes UAE.

Na Figura 5.11 são representados os resultados para uma UAE com 15 cavidades

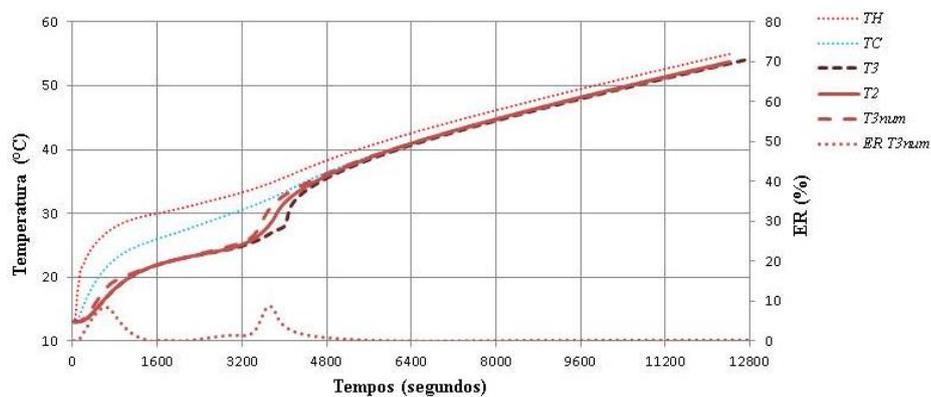
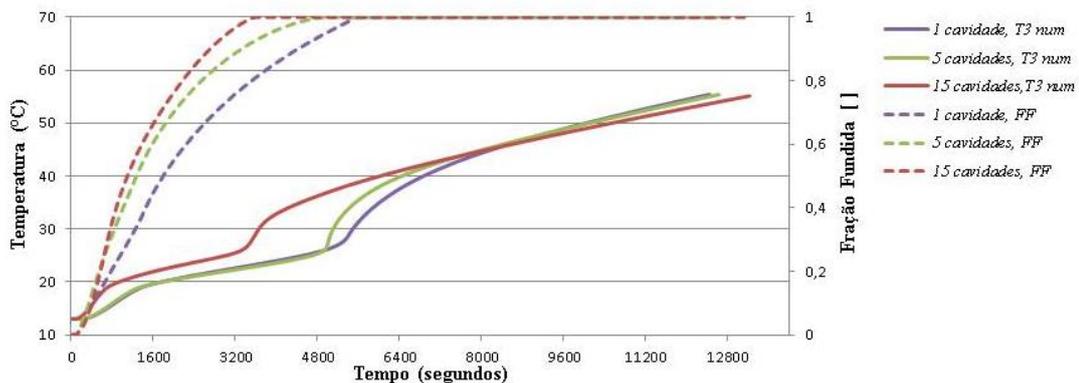


Figura 5.11 – Evolução temporal da temperatura obtida numericamente e experimentalmente para uma UAE com 15 cavidades, durante a fase de carga com uma potência de 34 W. No eixo secundário, à direita, encontra-se o ER de  $T_{3num}$ .

É notório o ligeiro atraso inicial da mudança de fase assim como o momento em que o PCM funde por completo, face aos resultados experimentais, correspondendo aos picos máximos do ER. Importa mencionar que os ensaios experimentais podem ter erros associados, nomeadamente a pouca precisão da localização dos termopares no interior das cavidades. Por esse mesmo motivo, o resultado numérico foi comparado com duas

medições experimentais ( $T_2$  e  $T_3$ ), comprovando o facto na aproximação à curva  $T_2$  experimental. O  $ER$  máximo, em relação ao ponto de monitorização experimental  $T_2$ , correspondente ao pico de mudança de fase, é cerca de 8.7 % (resultando numa diferença máxima de 2.5 °C), enquanto que para o ponto  $T_3$  o valor do  $ER$ , e correspondente diferença máxima, é cerca do dobro.

No que diz respeito ao tempo de fusão, em relação aos restantes testes das UAE com 1 e 5 cavidades, a influência da incorporação de 14 alhetas metálicas foi significativa, permitindo que o PCM esteja completamente fundido sensivelmente aos 3480 segundos. De facto, segundo a Figura 5.12, onde são confrontados os resultados obtidos para as UAE com diferentes cavidades, observamos um processo de fusão muito mais rápido para uma unidade de armazenamento com 15 cavidades. Relativamente à UAE com uma só cavidade, o PCM funde 1950 segundos mais cedo, cerca de 3 vezes inferior ao tempo de fusão de uma unidade com 4 alhetas.



**Figura 5.12 – Comparação da evolução temporal de  $T_{3num}$  obtida numericamente para UAE com 1, 5 e 15 cavidades durante a fase de carga a 34 W. No eixo secundário apresenta-se a evolução da FF de PCM para as diferentes cavidades.**

A Figura 5.13 e Figura 5.14 mostram a evolução de  $T$  e  $FF$ , respetivamente, para unidades de armazenamento de energia com 5 e 15 cavidades, até ao momento em que o PCM se encontra totalmente fundido.

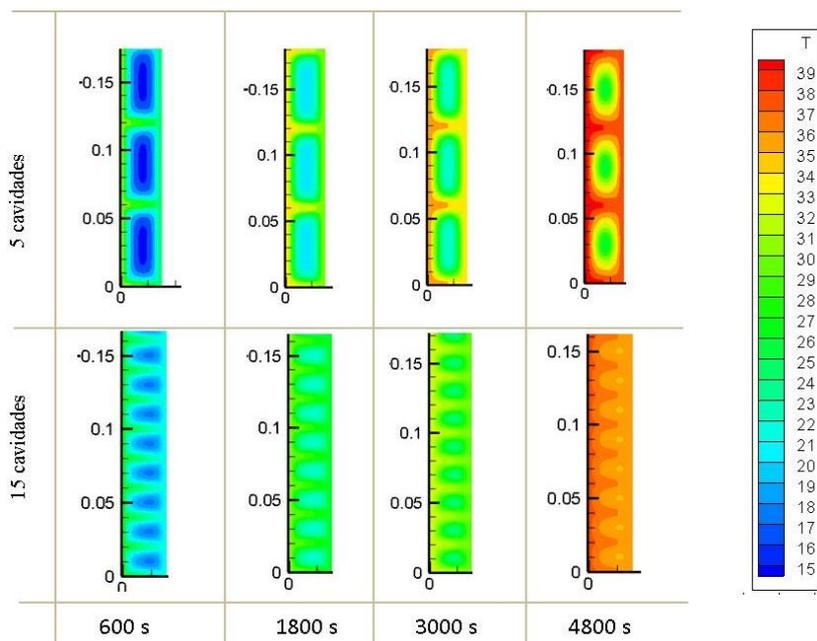


Figura 5.13 – Distribuição da temperatura em °C aos 600, 1800, 3000 e 4800 segundos para a UAE com 5 e 15 cavidades.

Da Figura 5.13 podemos concluir que a incorporação de 4 e 14 alhetas metálicas levou à distribuição de temperatura de forma mais uniforme ao longo do tempo, comprovando a perfeita semelhança das 5 temperaturas monitorizadas. Promovendo, com a incorporação das alhetas, uma distribuição uniforme e mais rápida da temperatura.

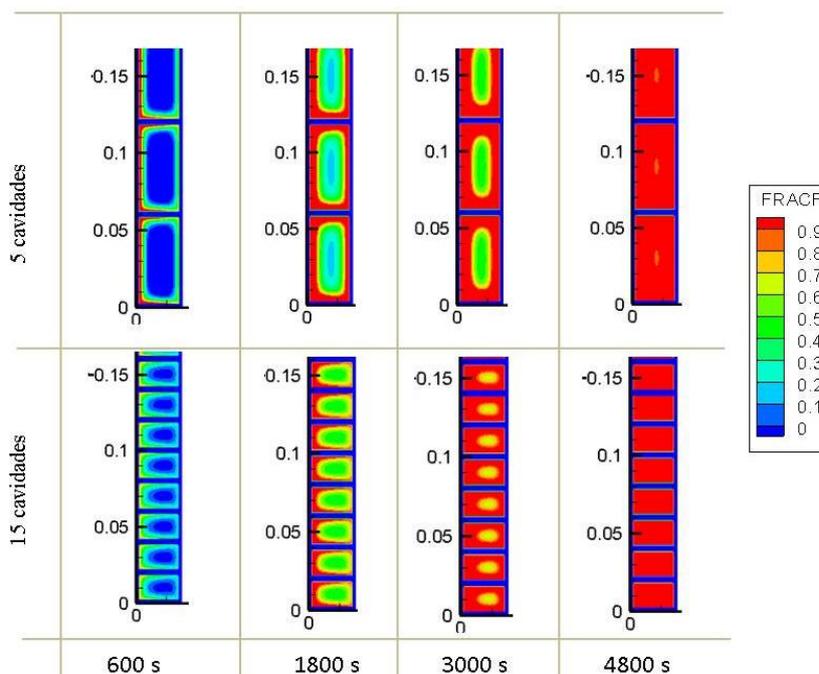


Figura 5.14 – Distribuição da FF de PCM aos 600, 1800, 3000 e 4800 segundos para a UAE com 5 e 15 cavidades.

A Figura 5.14 volta a demonstra uma uniformização da  $FF$  nas diferentes cavidades. Evidencia-se também que o último material a fundir completamente, encontra-se numa zona mais central, devido ao efeito das alhetas metálicas, promovendo um avanço idêntico da frente de fusão.

### 5.3.2. Fase de descarga

De igual modo à fase de arrefecimento para a UAE com uma só cavidade foi considerado que  $\Delta_{hist} = 1.5 \text{ }^\circ\text{C}$ .

Na Figura 5.15 são expostos os resultados numéricos e experimentais obtidos para a fase de descarga de uma UAE com 5 cavidades. A sobreposição quase perfeita dos resultados numéricos e experimentais volta a ser visível para a UAE com 5 cavidades. O  $ER$  ajuda a exemplificar isso mesmo, mostrando valores muito baixo, inferiores a 3%, exceto no instante final de mudança de fase onde os resultados numéricos se afastam dos experimentais, atingindo uma diferença máxima de  $1.3 \text{ }^\circ\text{C}$ .

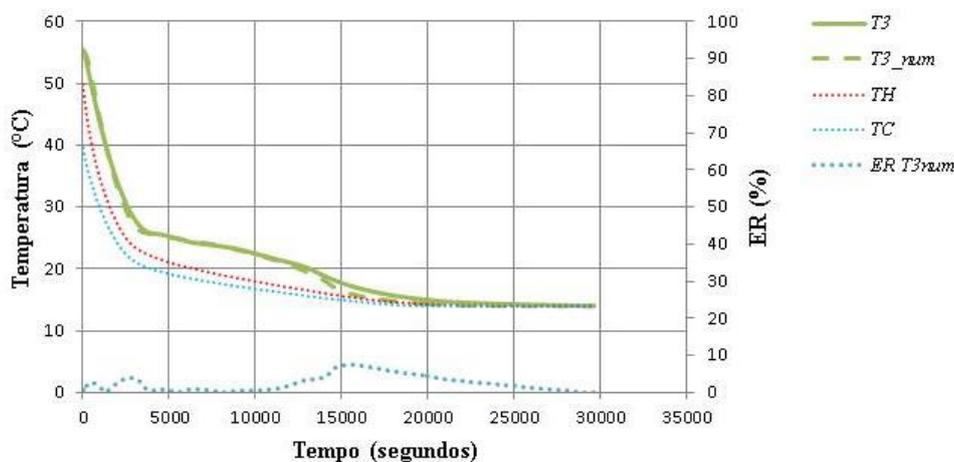


Figura 5.15 – Evolução temporal da temperatura obtida numericamente e experimentalmente para uma UAE com 5 cavidades, durante a fase de descarga a uma temperatura de  $14 \text{ }^\circ\text{C}$ . No eixo secundário, à direita, encontra-se o  $ER$  de  $T_{3num}$ .

Na Figura 5.16 são expostos os resultados numéricos e experimentais para uma UAE com 15 cavidades. Pela mesma razão explicada anteriormente na fase de carga, os resultados experimentais podem conter erros, nomeadamente associados à localização dos termopares, pelo que é exposto a comparação do resultado numérico com a temperatura monitorizada experimentalmente no ponto  $T_2$  e  $T_3$ .

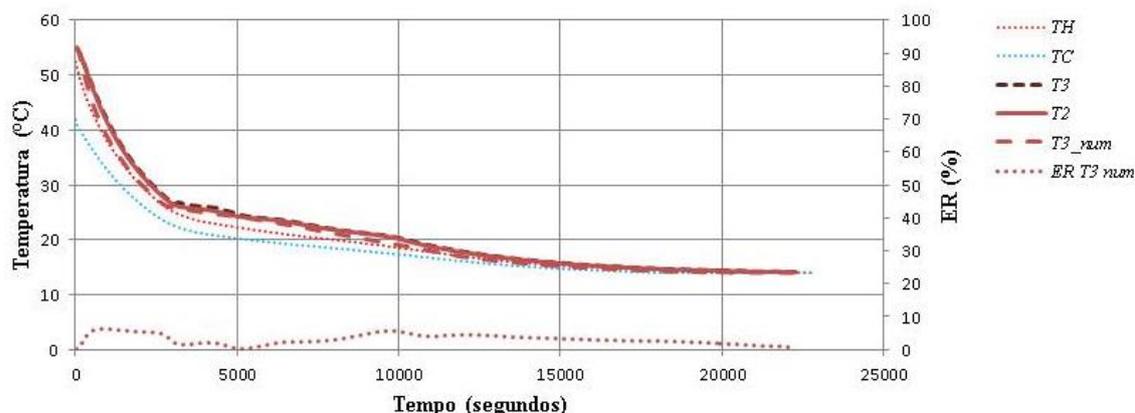


Figura 5.16 – Evolução temporal da temperatura obtida numericamente e experimentalmente para uma UAE com 15 cavidades, durante a fase de descarga a uma temperatura de 14 °C. No eixo secundário, à direita, encontra-se o ER de  $T_{3num}$ .

Conforme se observa, existe uma maior aproximação do resultado numérico à curva experimental medida no ponto 2 de monitorização. Em termos de  $ER$  médio o resultado numérico apresenta uma diminuição quando comparado com a curva  $T_2$  (cerca de 3 %) em relação à curva  $T_3$  (cerca de 3.82 %), justificando o erro derivado dos resultados experimentais devido à localização incerta dos termopares. Desprezando os instantes iniciais onde os resultados numéricos têm uma maior discrepância em relação aos experimentais, o período crítico do  $ER$  volta a ser de novo no instante final da mudança de fase, atingindo uma diferença máxima de 1.15 °C, aos 9780 segundos. É assim um resultado numérico concordante com o  $ER$  admissível.

Na Figura 5.17 compararam-se os tempos de solidificação para as diferentes configurações da UAE. É evidente a redução do tempo de solidificação com a incorporação de alhetas, diminuindo 3660 segundos para a UAE de 5 cavidades e 6720 segundos para a UAE de 15 cavidades, em comparação com os resultados para UAE com uma só cavidade.

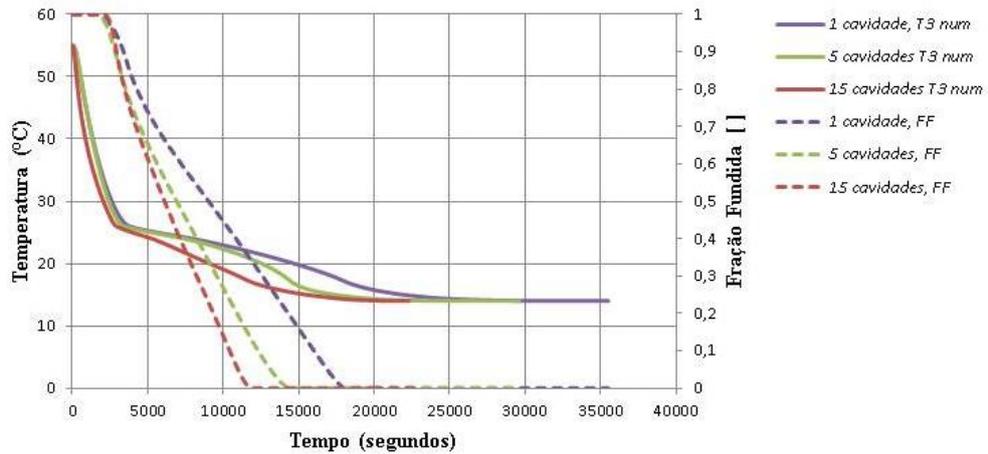


Figura 5.17 – Comparação da evolução temporal de  $T_{3num}$  obtida numericamente para UAE com 1, 5 e 15 cavidades durante a fase de descarga a 14 °C. No eixo secundário apresenta-se a evolução da FF de PCM para as diferentes cavidades.

A Figura 5.18 mostra a comparação da distribuição de  $T$  e da  $FF$  de PCM no processo de descarga para a UAE com 5 e 15 cavidades

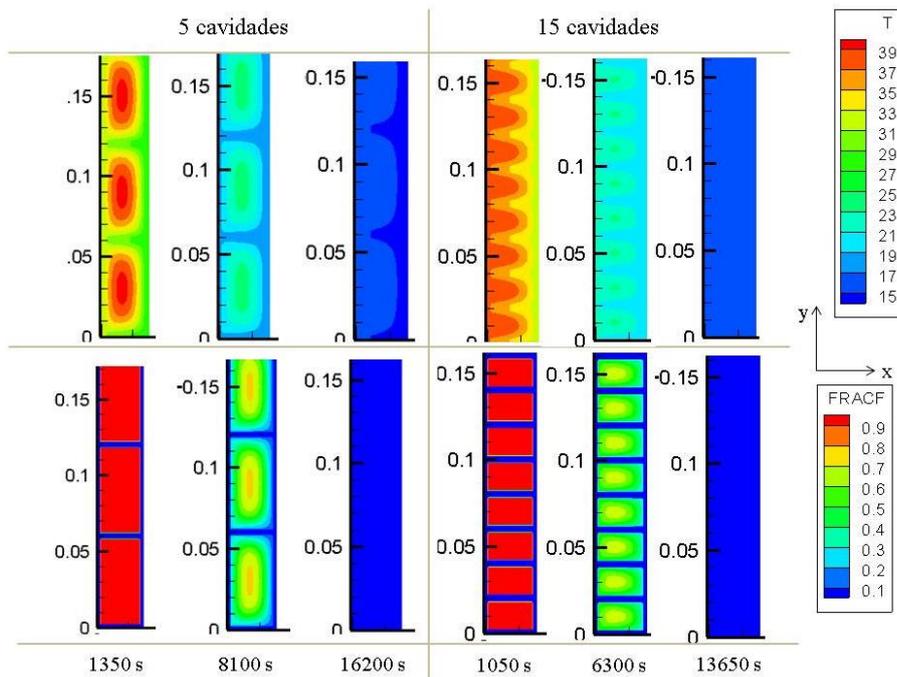


Figura 5.18 – Distribuição da temperatura em °C e da FF de PCM para a UAE com 5 e 15 cavidades.

A influência das alhetas volta a ser evidente, apresentando uma uniformização na evolução da temperatura e da FF de PCM ao longo do processo de solidificação. Novamente é observado que o último material a solidificar se encontra numa zona mais central, contrariamente ao apresentado para uma só cavidade, devendo-se o facto

essencialmente à incorporação das alhetas metálicas que promovem a solidificação de uma forma mais uniforme.

#### **5.4. Energia armazenada/restituída**

Conforme mencionado na secção 5.1, foi feito o cálculo da potência na interface PCM-alumínio (Figura 5.1), com o objetivo de obter a energia armazenada e restituída, nas fases de carga e descarga, respetivamente, através da integração temporal do valor  $P_{TOT}$ . O cálculo das potências consiste num modelo semelhante ao apresentado na secção 4.5. A energia teórica armazenada/restituída foi calculada da mesma maneira que se apresenta na Eq. 4.3.

Na Tabela 5.1 são apresentados os valores obtidos para a energia armazenada e restituída para as diferentes UAE, assim como os respetivos tempos de fusão/solidificação e ainda o *ER* do resultado numérico em relação ao teórico. Os resultados obtidos mostram uma perfeita concordância do perfil triangular ajustado, uma vez que o *ER* apenas ultrapassa os 2% para a UAE com apenas uma cavidade. De salientar que, nas restantes, a UAE com 5 cavidades apresenta o *ER* abaixo dos 1%. De facto, nota-se que na fase de carga, o *ER* tende a baixar à medida que se diminui o volume de PCM, enquanto na fase de descarga ocorre o oposto. No entanto, observa-se que existe um decréscimo da energia armazenada/restituída, que é proporcional ao aumento do número de cavidades, uma vez que o volume ocupado pelo PCM é muito menor.

Da Tabela 5.1 é ainda possível realçar que os valores de energia teórica quer da fase de carga, quer da fase de descarga, são diferentes. Isto deve-se ao facto de se terem considerado valores de temperaturas finais diferentes, para as diferentes fases, de acordo com a Eq.4.3, resultando assim em valores diferentes de Energia teórica.

Tabela 5.1 - Comparação dos valores da energia teórica armazenada/restituída com os valores obtido numericamente, tempos de fusão/solidificação do PCM, para as diferentes UAE.

$E=[\text{kJ}]$ ; $ER=[\%]$ ; $t=[\text{s}]$	<b>Fase de Carga</b>				<b>Fase de descarga</b>			
	Energia armazenada	Energia teórica	$ER$	$t_{\text{fusão}}$	Energia restituída	Energia teórica	$ER$	$t_{\text{solidificação}}$
1 cavidade	225.1	219.8	2.43	5430	198.0	195.9	1.1	16500
5 cavidades	190.7	189.0	0.93	4830	188.4	185.3	1.70	12840
15 cavidades	164.6	162.0	1.60	3480	161.8	158.8	1.9	9780



## 6. CONCLUSÃO

### 6.1. Notas conclusivas

Nesta dissertação foram desenvolvidos modelos numéricos com base no *método da capacidade calorífica efetiva*, no *método do termo-fonte* e na curva da variação do calor específico efetivo com a temperatura obtida experimentalmente – *Reverse C<sub>p</sub>*. Estes modelos tinham como objetivo avaliar o comportamento térmico de UAE com diferentes geometrias, e preenchidas com um PCM microencapsulado - Micronal<sup>®</sup> DS 5001 X. Foi desenvolvido um estudo para o perfil triangular do *método da capacidade calorífica efetiva*, com o objetivo de ajustar o déficit de energia resultante deste perfil observado por Antunes [3]. Verificou-se que o perfil triangular corrigido apresentado por Antunes [3] apenas resolvia o déficit de energia para o seu caso específico em estudo, sendo por isso, o perfil triangular ajustado o mais adequado a utilizar para correções do déficit de energia resultante do perfil triangular. Pela comparação dos diferentes métodos, concluiu-se que o triangular ajustado apresenta o menor *ER*, tendo sido utilizado apenas este perfil no modelo bidimensional.

No modelo bidimensional em regime transiente, onde a condução é o único mecanismo de transferência de calor, concluiu-se que a incorporação de alhetas metálicas, durante a fase de aquecimento, pouco afeta o tempo de fusão entre uma UAE com uma só cavidade ou com 5 cavidades. Porém, ao aumentar-se o número de cavidades para 15, o tempo de fusão já se reduz em cerca de 1950 segundos, sendo três vezes inferior do que a UAE com 5 cavidades.

Para a fase de arrefecimento, verificou-se uma diminuição progressiva do tempo de solidificação do PCM quando incorporadas alhetas metálicas (redução de 3660 segundos para UAE de 5 cavidades e 6720 segundos em UAE de 15 cavidades).

Foi verificado ainda um decréscimo da energia armazenada/restituída que foi diretamente proporcional ao aumento do número de alhetas incorporadas. Da mesma observação se concluiu que o *ER* diminui aproximando-se do valor teórico da energia.

Em conclusão, ocorreu uma concordância bem sucedida entre os resultados numéricos e os experimentais propostos por Soares *et al.*[1,2].

## 6.2. Trabalhos futuros

Nesta dissertação foi apenas simulado o comportamento térmico de PCMs microencapsulados em UAE com cavidades retangulares de alumínio, onde a condução é o único mecanismo de transferência de calor. Será importante estender o estudo à análise da transferência de calor com mudança de fase em cavidades retangulares de alumínio preenchidas com PCMS livres, onde o efeito da convecção natural tem que ser considerado.

Outra questão que poderá ser avaliada num estudo futuro é melhorar o ajuste numérico do *método do termo-fonte* e do método experimental *Reverse  $C_p$* , com o objetivo de poderem ser utilizados num futuro modelo bidimensional, para posterior análise paramétrica.

---

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] N. Soares, A. Gaspar, P. Santos, and J. J. Costa, “Experimental evaluation of the heat transfer through small PCM-based thermal energy storage units for building applications,” *Energy Build.*, vol. 116, no. February, pp. 18–34, 2016.
- [2] N. Soares, A. Gaspar, P. Santos, and J. J. Costa, “Experimental study of the heat transfer through a vertical stack of rectangular cavities filled with phase change materials,” *Appl. Energy*, vol. 142, no. March, pp. 192–205, 2015.
- [3] P. F. Antunes, “Estudo numérico de unidades de armazenamento de energia térmica com materiais de mudança de fase para a termorregulação de painéis fotovoltaicos.” Relatório de concurso para estudantes do segundo ciclo da UC - Uma Onda EfS na formação da UC - Departamento de Engenharia Mecânica - Universidade de Coimbra, 2016.
- [4] S. E. Kalnæs and B. P. Jelle, “Phase change materials and products for building applications: A state-of-the-art review and future research opportunities,” *Energy and Buildings*, vol. 94, no. 7491. Elsevier B.V., pp. 150–176, 2015.
- [5] F. Kuznik, D. David, K. Johannes, and J. J. Roux, “A review on phase change materials integrated in building walls,” *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 15, no. 1. pp. 379–391, 2011.
- [6] A. Sharma, V. V Tyagi, C. R. Chen, and D. Buddhi, “Review on thermal energy storage with phase change materials and applications,” *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 13, no. 2. pp. 318–345, 2009.
- [7] Y. Cui, J. Xie, J. Liu, and S. Pan, “Review of Phase Change Materials Integrated in Building Walls for Energy Saving,” in *Procedia Engineering*, 2015, vol. 121, pp. 763–770.
- [8] N. Soares, “Thermal energy storage with phase change material (PCMs) for the improvement of the energy performance of buildings,” Tese de Doutoramento em Sistemas de Energia Sustentável. Departamento de Engenharia Mecânica - Universidade de Coimbra, 2015.
- [9] L. F. Cabeza, H. Mehling, Belén Zalba and José M<sup>a</sup> Marín, "Review on thermal energy storage with phase change : materials , heat transfer analysis and applications", *Appl. Therm. Eng.*, vol.23, pp. 251-283, 2003.

- [10] S. Patankar, *Numerical heat transfer and fluid flow*, CRC Press, 1980.
- [11] P. F. R. Antunes, “Estudo numérico de unidades de armazenamento de energia térmica com materiais de mudança de fase para a termorregulação de painéis fotovoltaicos,” Tese de Mestrado na especialidade de Energia e Ambiente. Departamento de Engenharia Mecânica - Universidade de Coimbra, 2016.
- [12] C. Y. Zhao and G. H. Zhang, “Review on microencapsulated phase change materials (MEPCMs): Fabrication, characterization and applications,” *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 15, no. 8. Elsevier Ltd, pp. 3813–3832, 2011.
- [13] P. Schossig, H. M. Henning, S. Gschwander, and T. Haussmann, “Micro-encapsulated phase-change materials integrated into construction materials,” in *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 2005, vol. 89, no. 2–3, pp. 297–306.
- [14] G. Ferrer, A. Solé, C. Barreneche, I. Martorell, and L. F. Cabeza, “Corrosion of metal containers for use in PCM energy storage,” *Renew. Energy*, vol. 76, pp. 465–469, 2015.
- [15] A. Vasu *et al.*, “Corrosion effect of phase change materials in solar thermal energy storage application,” *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 76, no. March. Elsevier Ltd, pp. 19–33, 2017.
- [16] M. Lachheb, Z. Younsi, H. Naji, M. Karkri, and S. Ben Nasrallah, “Thermal behavior of a hybrid PCM/plaster: A numerical and experimental investigation,” *Appl. Therm. Eng.*, vol. 111, pp. 49–59, 2017.
- [17] W. Libeer, F. Ramos, C. Newton, M. Alipanahrostami, C. Depcik, and X. Li, “Two-phase heat and mass transfer of phase change materials in thermal management systems,” *Int. J. Heat Mass Transf.*, vol. 100, pp. 215–223, 2016.
- [18] M. J. Huang, P. C. Eames, B. Norton, and N. J. Hewitt, “Natural convection in an internally finned phase change material heat sink for the thermal management of photovoltaics,” *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, vol. 95, no. 7, pp. 1598–1603, 2011.
- [19] W. B. Ye, D. S. Zhu, and N. Wang, “Fluid flow and heat transfer in a latent thermal energy unit with different phase change material (PCM) cavity volume fractions,” *Appl. Therm. Eng.*, vol. 42, pp. 49–57, 2012.
- [20] M. Costa, D. Buddhi, and A. Oliva, “Numerical simulation of a latent heat thermal energy storage system with enhanced heat conduction,” *Energy Convers. Manag.*, vol. 39, no. 3–4, pp. 319–330, 1998.
- [21] P. Lamberg, R. Lehtiniemi, and A. M. Henell, “Numerical and experimental

- investigation of melting and freezing processes in phase change material storage,” *Int. J. Therm. Sci.*, vol. 43, no. 3, pp. 277–287, 2004.
- [22] P. D. Silva, L. C. Gonc, and L. Pires, “Transient behaviour of a latent-heat thermal-energy store : numerical and experimental studies,” *Appl. Energy*, vol. 73, pp. 83–98, 2002.
- [23] P. A. F. B. Pais, “Desenvolvimento e testes de uma instalação laboratorial para o estudo do comportamento térmico de materiais de mudança de fase (PCM),” Tese de Mestrado na especialidade de Energia e Ambiente. Departamento de Engenharia Mecânica - Universidade de Coimbra, 2013.