

Modelagem tridimensional de pilhas a combustível de óxido sólido

Andrade, Samuel Tadeu de Paula^I, Bortolus, Marcos Vinicius^{II}, Brant, Márcia Caldeira^I, Domingues, Rosana Zacarias^I, Matencio, Tulio^I

^ILaboratório de Materiais e Pilhas a Combustível – LaMPaC – DQ – UFMG – CEMIG
e-mail: samuelt@ufmg.br, mcbrant@ufmg.br, rosanazd@ufmg.br, tmatencio@ufmg.br

^{II}Departamento de Engenharia Mecânica – DEMEC – UFMG
Av. Antônio Carlos, 6627, 31270-901, Pampulha, Belo Horizonte, MG, Brasil.
e-mail: bortolus@ufmg.br

RESUMO

A modelagem computacional contribui para o projeto, o dimensionamento e, também, para a avaliação do desempenho de pilhas a combustível de óxido sólido. No entanto, essa modelagem é complexa devido a grande quantidade de fenômenos físicos envolvidos. Além dos fenômenos físicos, as dimensões presentes dificultam a validação dos resultados. Neste trabalho, os canais de um interconector adjacente a um anodo foram modelados visando avaliar o escoamento nesse sistema. A validação dos procedimentos e das considerações foi feita de maneira indireta. O escoamento no interconector foi avaliado através das equações de Navier-Stokes e, no anodo, foi utilizada a Lei de Darcy. A técnica de volumes finitos foi empregada para a solução das equações. Foram utilizados valores típicos de permeabilidade, enquanto viscosidade e densidade foram determinadas numericamente, considerando a mistura de hidrogênio e água. Foi considerado regime permanente e isotropia em relação a todas as propriedades físicas determinadas a várias temperaturas. Foram analisadas as influências no escoamento da razão entre porosidade do anodo e viscosidade da mistura H₂ e H₂O; da densidade e; da temperatura. Um estudo de como a densidade da malha afeta os resultados também foi realizado. Foi possível notar que, quando a mistura hidrogênio/água penetra no meio poroso, o escoamento sofre uma redução de velocidade, em relação ao valor médio aplicado na entrada. Já a pressão, nessa situação, não apresenta redução significativa.

Palavras-chaves: PaCOS, interconectores, modelagem, meios porosos.

Tridimensional modeling of solid oxide fuel cells

ABSTRACT

The computational modeling contribute for design, dimensioning and also for performance evaluation of Solid Oxide Fuel Cells. Nevertheless, the modeling is complex due to of large quantity of physics phenomena involved. In addition of physics phenomena, the present dimensions raise difficulties to validate the results. In this work, the interconnect channels adjacent to an anode have modeled aiming evaluate the flowing in this system. The validation of procedures and considerations has done by indirect mode. The flowing at interconnect has been evaluate through the Navier-Stokes equations and at anode it has been used the Darcy's Law. The technique of finite volume has used to solving of equations. It has been used typical values of permeability, while viscosity and density have been numerically determined, considering a mixture of hydrogen and water. It has been considered steady state and isotropy in relation of all physical properties determined at different temperatures. It have been analyzed the influences at the flowing by ratio between the porosity of anode and viscosity of mixture H₂O and H₂O; density and temperature. A study of how the mesh affects the results also has been done. It has been possible the see that, when the mixtures of hydrogen/water enters at porous media, the flowing suffer a reduction of velocity in relation of medium value applied at entering. The pressure, in this situation, does not show significant reduction.

Keywords: SOFC, interconnects, modeling, porous media.

1 INTRODUÇÃO

As pilhas a combustível, também chamadas de células a combustível, são geradores de energia que possuem alta eficiência, são descentralizadas e podem usar combustíveis provenientes de diversas fontes, inclusive das renováveis.

As pilhas são formadas por células unitárias compostas por um eletrólito, um anodo e um catodo e são interligadas por interconectores. Os interconectores para pilhas a combustível de óxido sólido (PaCOS) do tipo planar são placas que possibilitam que cada célula seja ligada à outra, em uma associação em série. Assim, as correntes são somadas e, conseqüentemente, a potência disponível é ajustada para o valor desejado.

Nas PaCOS, os eletrólitos são óxidos sólidos que necessitam de temperaturas acima de 650 °C para apresentar uma condução iônica que permita a operação destes dispositivos. O anodo é submetido a uma atmosfera redutora e o catodo, a uma atmosfera oxidante. Dadas essas condições de operação, os interconectores necessitam de grande atenção em seu projeto. O bom projeto irá garantir que esse irá manter a eficiência do conjunto a partir da sua baixa deterioração e da boa distribuição de gases (ar e hidrogênio).

Diversos fenômenos físico-químicos ocorrem na célula e são diretamente responsáveis pelo desempenho da mesma. Para a compreensão, visualização e análise dos mesmos de forma inter-relacionada o uso da modelagem computacional exerce papel fundamental.

Encontram-se na literatura vários trabalhos que lidam não apenas com geometrias e considerações distintas, como também com diferentes modelos matemáticos para esses fenômenos. Alguns trabalhos consideram, na modelagem, os fenômenos suficientes para prever a potência elétrica da pilha e as demais variáveis de processo [1, 2, 3]. Já outros, focam a modelagem apenas em alguns fenômenos [4, 5, 6]. As geometrias em geral se concentram na planar [7], ou na tubular [8, 9]. No entanto, é possível encontrar trabalhos com geometrias diferentes dessas [2, 10]. Por fim, já há trabalhos modelando toda uma planta de geração de energia baseada em PaCOS [11, 12].

Neste trabalho, buscam-se avaliar propriedades, como velocidade e pressão do escoamento de uma mistura de hidrogênio e água a uma temperatura de 850°C, em um interconector adjacente a um anodo existente.

Para isso, utilizam-se os programas GAMBIT e FLUENT para o pré-processamento, processamento e pós-processamento do modelo. Os procedimentos de validação serão feitos a partir de relações analíticas e de resultados disponíveis na literatura [7].

2 MODELAMENTO E TRATAMENTO NUMÉRICO

2.1 Canais do interconector e anodo

Aqui, está lidando-se com dois domínios de diferente natureza. O primeiro são os canais do interconector, por onde o combustível (ou oxidante, quando for o caso) percorre e o segundo é o anodo, que é um material cerâmico e poroso. Dada essa diferença, é necessário usar um modelo adequado para cada um desses domínios.

O escoamento ao longo dos canais do interconector é modelado através das equações diferenciais parciais não-lineares de Navier-Stokes. Estas equações descrevem a velocidade e a pressão de um fluido no tempo e no espaço. Elas podem ser deduzidas a partir da conservação do momentum e considerando que o fluido é newtoniano, isentrópico e contínuo. Tais equações são escritas para cada direção canônica [13].

$$\rho \frac{Du}{Dt} = \rho g_x - \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \left(2 \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{V} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) \right] \quad (1)$$

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = \rho g_y - \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu \left(2 \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{V} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \right] \quad (2)$$

$$\rho \frac{Dw}{Dt} = \rho g_z - \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu \left(2 \frac{\partial w}{\partial z} - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{V} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) \right] \quad (3)$$

Onde: u, v e w são velocidades [m/s] na direção x, y e z , respectivamente;
 V é o vetor velocidade [m/s];
 μ é viscosidade dinâmica [Pas] do fluído que escoo pelo meio poroso.
 ρ é a densidade do fluido [kg/m³];
 g é a aceleração da gravidade em uma dada direção [m/s²]

O escoamento de fluidos através de meios porosos é de grande complexidade. Ele pode ser quantificado pela Lei de Darcy [14, 15]. Essa possui a característica de não tentar descrever o escoamento ao longo da cadeia de poros, já que isso acarretaria um custo computacional enorme. Ela tenta homogeneizar todo o domínio em torno de um comportamento médio e pode ser descrita por:

$$\vec{u} = -\frac{k}{\mu} \nabla P + \rho g \quad (4)$$

Onde: u é vetor velocidade [m/s] na direção x ;
 k é permeabilidade [m²] do meio poroso;
 μ é viscosidade dinâmica [Pas] do fluído que escoo pelo meio poroso.
 ρ é a densidade do fluido [kg/m³];
 g é a aceleração da gravidade [m/s²]

2.2 Viscosidade e Densidade

Para o cálculo da viscosidade são utilizados dois modelos, o primeiro chamado de VHS (Variable Hard Sphere) e o segundo, de Lei de Wilke. O modelo VHS é usado para prever a viscosidade de gases e a expressão matemática usada é [16]:

$$\mu = \frac{15}{8} \sqrt{\left(\frac{R \times M \times T_r}{\pi}\right)} \times \frac{\left(\frac{T}{T_r}\right)^{VHS}}{(3,5 - VHS) \times (2,5 - VHS) d^2} \quad (5)$$

Onde: R é a constante do gás em questão;
 M é massa molar;
 T_r é temperatura de referência, no caso 273 K;
 T é a temperatura em que se deseja avaliar a viscosidade;
 d é um diâmetro característico da substância em questão;

Os coeficientes VHS são definidos para cada tipo de substância. Para o H₂, esse coeficiente é igual 0,67 e para a H₂O, esse coeficiente é 0,75;

Calculado a viscosidade de cada substância, usa-se a Lei de Wilke para prever a viscosidade de uma mistura composta por “n” substâncias [16, 17]. Essa é definida por:

$$\mu_{mistura} = \frac{\sum_{i=1}^n X_i \mu_i}{\sum_{j=1}^n X_j \Phi_{ij}} \quad (6)$$

Onde Φ_{ij} e X_i são estabelecidos como:

$$\Phi_{ij} = \frac{\left(1 + \sqrt{\frac{\mu_i}{\mu_j} \times \frac{M_j}{M_i}}\right)^2}{\sqrt{8 + 8 \times \left(\frac{M_j}{M_i}\right)}} \quad (7)$$

$$X_i = \Phi_{ij} \times \frac{M}{M_i} \quad (8)$$

2.3 Volumes finitos

A técnica de volumes finitos foi desenvolvida, originalmente, por Suhas Patankar. Sua formulação está fortemente baseada nas equações diferenciais parciais para um dado fenômeno físico, nas interpretações físicas das mesmas e no conceito de volume de controle. Essa técnica visa discretizar os domínios e as equações diferenciais, transformando-as em equações algébricas. A descrição detalhada desse método está presente em MALALASEKERA, 1995 e PATANKAR, 1980 [18, 19].

3 METODOLOGIA

3.1 Validação

Para comparar resultados obtidos numericamente, é necessário que existam resultados analíticos, experimentais e/ou numéricos de outros autores. A área de modelagem em pilhas a combustível carece de resultados dos três tipos. Os resultados encontrados na literatura são geralmente de densidade de corrente e potência e, portanto, os resultados numéricos de modelagem são validados apenas com os resultados experimentais elétricos de uma célula unitária ou de uma pilha. Ou seja, os resultados numéricos dos outros fenômenos físicos (escoamento dos fluidos, transferência de massa e calor) são validados de forma indireta, já que os resultados elétricos são dependentes desses.

Para possibilitar a realização deste trabalho e de uma análise crítica dos resultados, foram adotados dois procedimentos de validação. O primeiro é analítico e permitiu a compreensão do escoamento em meios porosos. A solução analítica foi comparada com a numérica. E o segundo foi a reprodução de resultados numéricos publicados.

Pôde-se prever analiticamente a velocidade do escoamento para a situação esboçada pela Figura 1. Nela, têm-se valores prescritos de pressão nas extremidades de um domínio poroso homogêneo. Um fluido (hidrogênio mais água) foi posto para escoar nesse domínio sob uma temperatura de 750°C.

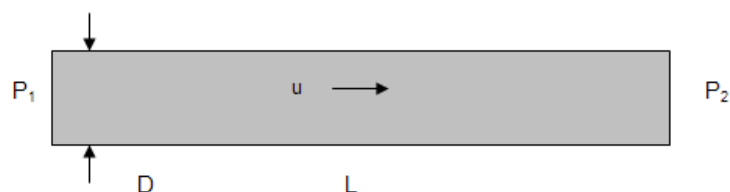


Figura 1: Situação hipotética.

As propriedades desta situação são dadas na Tabela 1.

Tabela 1: Propriedades aplicadas no cálculo analítico.

P_1 [Pa]	150000
P_2 [Pa]	101325
μ [Pa s]	3,66092e-05
k [m ²]	12,19e-15
ρ [kg/m ³]	0,1763
D [m]	0,1
L [m]	1

Com o uso da Lei de Darcy, chegou-se a um resultado analítico. Posteriormente, a mesma situação descrita foi implementada através do software FLUENT e seus resultados comparados.

Para compreender como se comporta o escoamento em meio livre, acoplado ao meio poroso, foi feita a segunda validação. Essa procurou reproduzir os resultados numéricos de YAKABE et al [7].

Este artigo, entretanto, não fornece alguns dados geométricos, algumas propriedades de substâncias e as condições de contorno utilizadas. Os valores de densidade e viscosidade não são apresentados. A permeabilidade é obtida através de meios experimentais. O experimento foi realizado sob pressão atmosférica, com gás N₂ e à temperatura ambiente. Essa temperatura não reflete as condições de trabalho das PaCOS, que, em sua maioria, operam em torno de 850°C. É fornecida a razão entre a permeabilidade e a viscosidade do fluido que escoar no meio poroso.

As condições de contorno foram inferidas. Para tornar mais simples a descrição das condições de contorno aplicadas e dos domínios de cálculo são mostradas a Figura 2, a Figura 3 e a Figura 4, todas relacionadas à Tabela 2. Note que da Figura 2 para a Figura 3 houve um giro de 180° para permitir a visualização do outro lado da geometria.

Tabela 2: Condições de contorno inferidas.

	Condição Aplicada	
Contorno	Escoamento em meio poroso - Anodo	Escoamento livre – Canais / interconector
$\partial\Omega_1$	Simetria	N/A
$\partial\Omega_2$	Isolado	N/A
$\partial\Omega_3$	Isolado	N/A
$\partial\Omega_4$	N/A	Simetria
$\partial\Omega_5$	N/A	$u_{navier-stokes}$ = perfil parabólico com máximo de 2 m/s
$\partial\Omega_6$	$u_{darcy}=u_{navier-stokes}$ $v_{darcy}=v_{navier-stokes}$ $w_{darcy}=w_{navier-stokes}$	$u_{darcy}=u_{navier-stokes}$ $v_{darcy}=v_{navier-stokes}$ $w_{darcy}=w_{navier-stokes}$
$\partial\Omega_7$	N/A	Não deslizamento
$\partial\Omega_8$	Isolado	N/A
$\partial\Omega_9$	N/A	Fluxo difusivo igual a zero
$\partial\Omega_{10}$	N/A	Não deslizamento
$\partial\Omega_{11}$	Isolado	N/A
$\partial\Omega_{12}$	Isolado	N/A

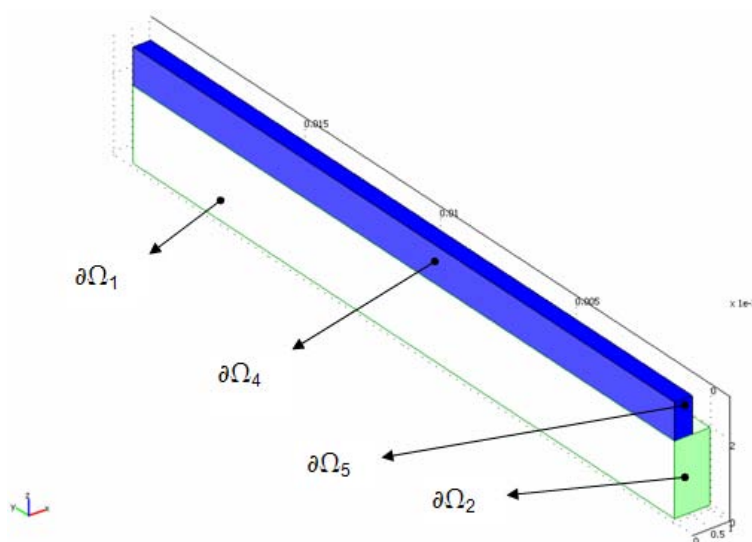


Figura 2: Condições de contorno – Vista 1.

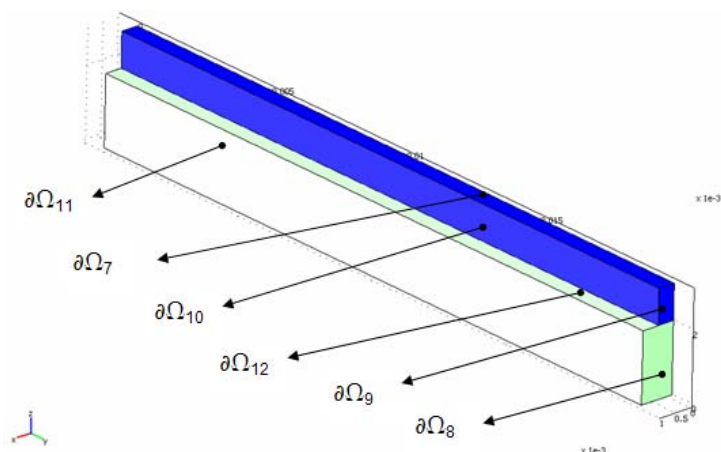


Figura 3: Condições de contorno – Vista 2.

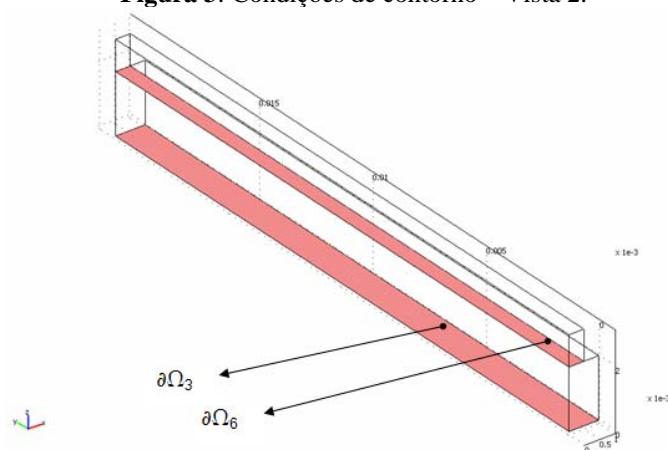


Figura 4: Condições de contorno – Vista 3.

A influência da densidade de malha, nos resultados, foi avaliada para dimensões de aresta do volume cúbico, variando de 1 mm até 0,08 mm. Essa avaliação foi feita através do GAMBIT, usando-se o algoritmo MAP e realizando-se a geração da malha, simultaneamente, nos dois domínios de cálculo (interconector e anodo).

Posteriormente, cada um dos modelos, com diferentes densidades de malha, foi resolvido no FLUENT. As propriedades de material consideradas para este estudo estão dadas na Tabela 3.

Tabela 4: Propriedades de material usado no estudo da influência da malha.

ρ [kg/m ³]	6,190E-02
k [m ²]	2,18E-14
μ [kg/m s]	2,41820E-05
Razão	9,00E-10
Temperatura [°C]	750
Umidade	20% de H ₂ O, 80% de H ₂
Pressão [kPa]	101

Após a determinação da densidade de malha adequada, foi estudada a influência da razão k/μ no acoplamento entre o escoamento no canal e no meio poroso. Assim, nove casos foram calculados onde a permeabilidade foi variada, de tal forma, a causar uma variação na razão k/μ que vai de 1×10^{-10} até 9×10^{-10} .

Em seguida, foi feita uma comparação entre os resultados obtidos por YAKABE et al, (1999) [7] e os obtidos através do modelo implementado no FLUENT. Foram usados os mesmos valores para condições de contorno e propriedades de material, como mostra a Tabela 5.

Tabela 5: Propriedades de material.

	Valor	Observação
ρ [kg/m ³]	6,190E-02	Calculado numericamente
k [m ²]	4,11E-15	Inferido
μ [kg/m s]	2,41820E-05	Calculado numericamente
Razão	1,70E-10	Fornecido pelo autor
Temperatura [°C]	750	Fornecido pelo autor
Umidade	20% de H ₂ O, 80% de H ₂	Fornecido pelo autor

A permeabilidade k foi inferida a partir do cálculo da viscosidade e da densidade. Para isso, considerou-se a mistura descrita na Tabela 5 a uma pressão de 101kPa. Com o valor da viscosidade determinado, obteve-se a permeabilidade k, através do produto entre a razão fornecida e o valor da viscosidade calculado numericamente.

3.2 Caso prático

Nesta seção procurou-se modelar um interconector e um anodo reais. Esse é um primeiro passo em direção à aplicabilidade da modelagem computacional em PaCOS, visando o estudo do desempenho das mesmas em função das propriedades de material, geometria e variáveis de processo.

A Figura 5 apresenta as dimensões de interconector e anodo típicos. Todas as medidas estão em milímetros.

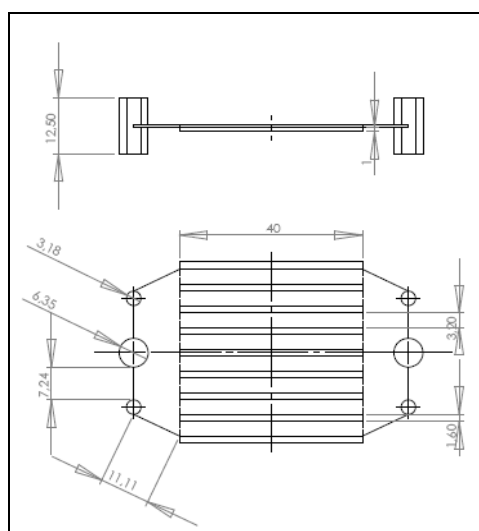


Figura 5: Dimensões de interconector e anodo típicos.

Optou-se, então, por modelar a geometria em questão no software SolidWorks 2006 e importar o modelo para o GAMBIT. Por fim, foi feito um corte no sentido longitudinal, ou seja, no sentido em que o fluido escoar. Esse corte foi feito para que a domínio de cálculo fosse reduzido à metade.

Na Figura 6, está destacada a face cuja condição de simetria é aplicada. O uso desta condição foi possível, pois a configuração possui simetria geométrica e de fenômenos físicos.

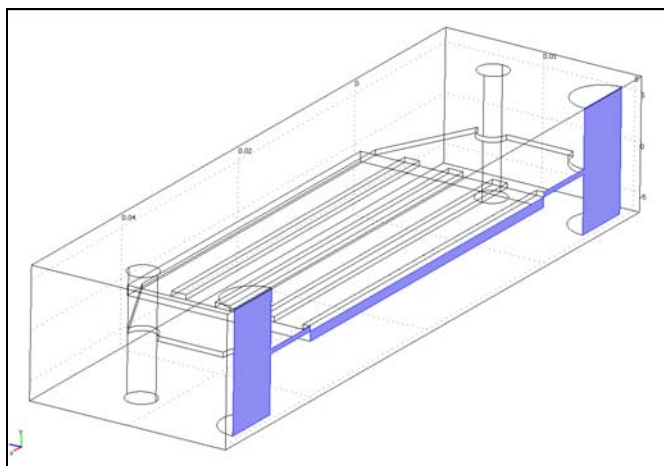


Figura 6: Condição de simetria.

A Figura 7 apresenta, em vermelho, as seções de admissão e exaustão do modelo. Na admissão aplica-se a condição de velocidade pré-escrita (*inlet velocity*). Já na exaustão adotou-se a condição de fluxo difusivo igual zero (*outflow*). Isto significa que os efeitos de difusão viscosa são desprezados de um elemento para outro. Ou seja, que a derivada segunda da velocidade em uma da direção canônica é igual à zero.

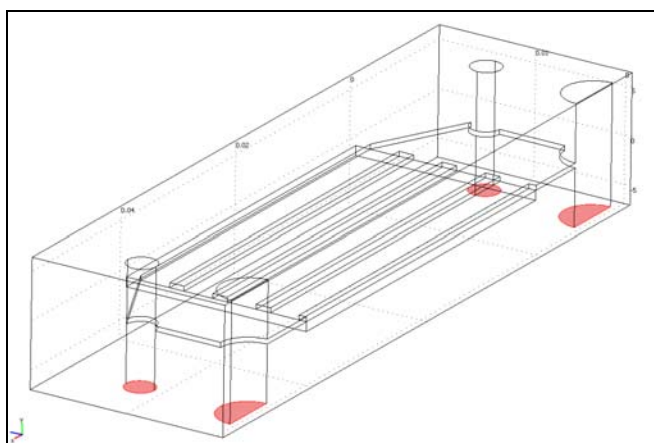


Figura 7: Em destaque seções de admissão e de exaustão.

A Figura 8 mostra as faces realçadas, em que existe a junção entre os dois domínios de cálculo. Nestas considerou-se que as velocidades são iguais, como considerado por BOVE [1]

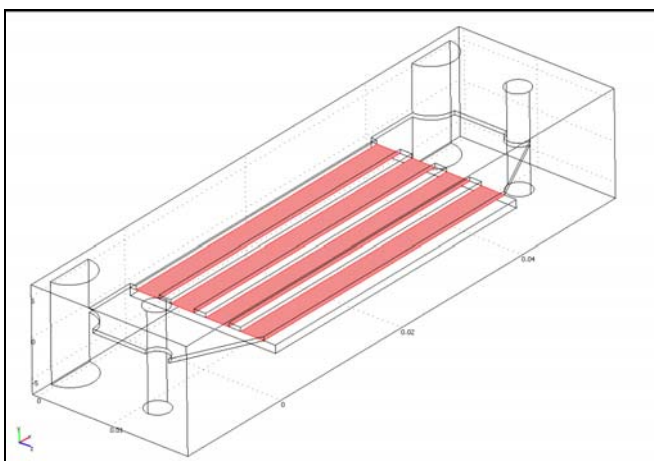


Figura 8: Interface interconector/anodo em destaque.

Em todos os demais contornos, foi usada a condição de contorno de parede, ou seja, velocidade igual à zero.

Após a modelagem geométrica, foi feito, novamente, um estudo da influência da malha nos resultados. Devido a limitações de equipamento, não foi possível usar elementos hexaédricos, como no modelo anterior. Foram utilizados elementos tetraédricos e prismáticos. Para tal, foi necessário o uso do algoritmo de discretização “TGrid”.

O procedimento de discretização foi simultâneo para os dois domínios e as arestas dos elementos foram variadas de 0,25 mm até 0,15 mm. Não foi possível utilizar elementos de arestas de comprimentos superiores, pois a altura do canal do interconector é de apenas 0,5 mm.

Na Tabela 6, são mostrados os valores das propriedades de material usadas neste estudo.

Tabela 6: Propriedades de material usadas no estudo da influência da malha.

ρ [kg/m ³]	6,190E-02
k [m ²]	4,11E-15
μ [kg/m s]	2,41820E-05
Razão	1,70E-10
Temperatura	750°C
Umidade	20% de H ₂ O, 80% de H ₂

Após o estudo de influência da malha, foi feita uma análise do escoamento na geometria em questão sob uma possível condição de trabalho. Adotaram-se valores de permeabilidade encontrados na literatura TIETZ et al, (1999) [20]. Foram estudados sete tipos de anodos. A permeabilidade e a condutividade desses anodos, após a redução dos mesmos, estão descritas na Tabela.

Tabela 7: Permeabilidade e condutividade de vários anodos [20].

	Permeabilidade k [cm ²]	Condutividade σ [S cm ⁻¹]
Anodo 1	7,71	894
Anodo 2	4,57	702
Anodo 3	0,35	3990
Anodo 4	6,9	447
Anodo 5	9,96	657
Anodo 6	12,19	78
Anodo 7	3,18	300

Procurou-se um anodo que apresentasse elevada condutividade e também boa permeabilidade. Observou-se então que o “Anodo 1” e o “Anodo 5” são os que possuem as melhores relações entre essas duas propriedades. Para efeito de análise, escolheu-se o Anodo 5, cujo valor de permeabilidade foi usado na modelagem.

A Tabela 8 resume os valores das demais propriedades, usando 3% de H₂O e operando a 850 °C.

Tabela 8: Propriedades usadas na modelagem de caso prático.

ρ [kg/m ³]	0,027
k [m ²]	9,96E-4
μ [kg/m s]	2,2483E-5
Razão	4,43E+1
Temperatura [°C]	850
Umidade	3% de H ₂ O, 97% de H ₂

A Tabela 9 mostra os parâmetros de maior significância, as configurações e os valores usados na solução de todos os modelos desenvolvidos neste trabalho.

Tabela 9: Parâmetros e configurações usados no FLUENT.

“Solver”	Modo de solução		Segregado
	Formulação		Implícita
	Tempo (Regime)		Permanente
Solução	Esquema de interpolação do momentum		“Power-Law”
	Discretização da Pressão		“PRESTO!”
	Esquema de acoplamento velocidade-pressão		“SIMPLE”
	Coeficientes de sub-relaxação	Pressão	0,3
		Densidade	1
Forças de corpo		1	
Momentum		0,7	
Critério de parada	Resíduo da velocidade no sentido X		0,001
	Resíduo da velocidade no sentido Y		0,001
	Resíduo da velocidade no sentido Z		0,001
	Resíduo da Equação da continuidade		0,001

4 RESULTADOS

4.1 Validação

Tomando-se como base a lei de Darcy e empregando os valores na Tabela, tem-se:

$$\vec{u} = -\frac{k}{\mu} \nabla P \quad (9)$$

$$\vec{u} = -\frac{k}{\mu} \frac{\partial P}{\partial x} \quad \text{discretizando} \quad (10)$$

$$\vec{u} = -\frac{k}{\mu} \frac{\Delta P}{\Delta x} \quad (11)$$

$$\vec{u} = 5,0 \times 10^{-5} \left[\frac{m}{s} \right]$$

É importante observar que, durante a discretização, foi imposto um gradiente constante de pressão ao longo de todo o domínio.

A modelagem, para a mesma situação, através do software FLUENT levou, praticamente, ao mesmo resultado.

A malha gerada é homogênea, com elementos quadrilaterais de aresta 0,001, conduzindo a um domínio discretizado em 100.000 volumes de controle.

A Figura 9 apresenta curvas dos valores de velocidade do escoamento, realizado em quatro seções com espaçamentos de 0,2 metros, ao longo do domínio de cálculo. Repare que todas as quatro curvas estão sobrepostas, pois a velocidade é a mesma ao longo de todo o domínio, tal como previsto.

Ocorreu uma redução linear da pressão ao longo do domínio de cálculo. O gradiente de velocidade manteve-se, praticamente, constante e próximo de zero (com pequenas oscilações pontuais). Foi, portanto, mantida a coerência entre a solução analítica e a numérica, obtida através do FLUENT.

A reprodução dos resultados de YAKABE et al, (1999) [7] iniciou-se com os resultados do estudo da influência da malha. Para tal, escolheu-se uma linha de amostragem para a velocidade, que passa exatamente no centro do anodo.

A Figura 10 fornece os valores de velocidade, ao longo da linha de amostragem, para cada tipo de malha.

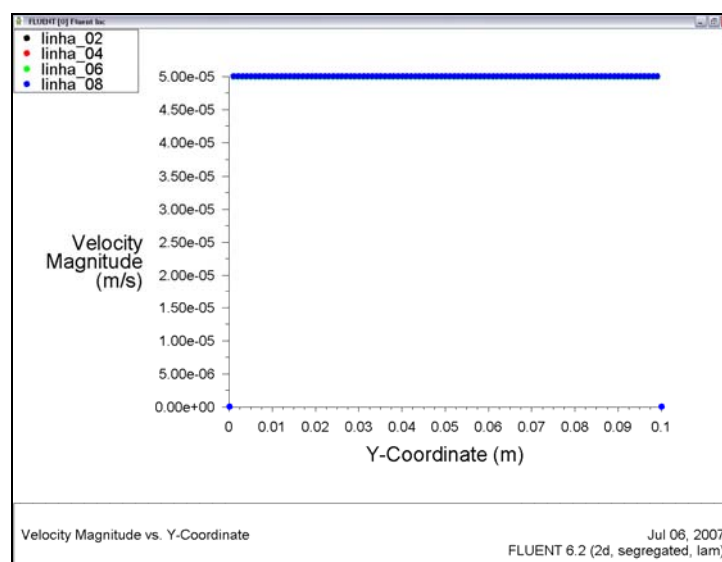


Figura 9: Curvas de velocidade de cinco seções feitas no meio poroso.

Note que a variação do valor da velocidade foi intensa para malhas de maior aresta (menor densidade) e que, à medida que o valor da aresta do hexaedro foi reduzido, a diferença desses valores tendeu a diminuir.

Os valores de velocidade do escoamento foram bem menores nas bordas do anodo, quando comparados aos valores centrais, os quais permaneceram relativamente constantes. Esta constância está de acordo com a Lei de Darcy.

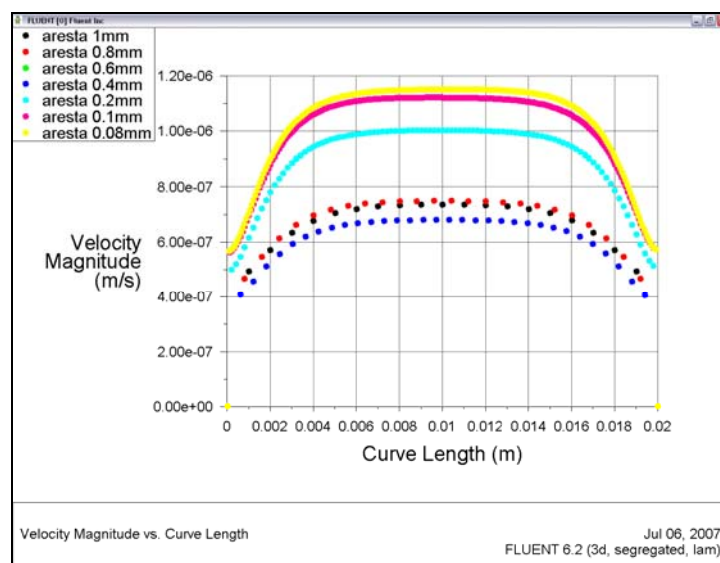


Figura 10: Valores de velocidade ao longo da linha de amostragem para diversas densidades de malha.

A Tabela 12 mostra o erro relativo do valor médio da velocidade de cada linha de amostragem, em relação ao valor médio, utilizando a malha com hexaedros de 0,08 mm.

A diferença entre os resultados para malhas com arestas de 0,1 mm para 0,08 mm foi pouco significativa. Sendo assim, foi usada a aresta de 0,1 mm para o estudo da influência k/μ .

Tabela 12: Tabela com erros relativos

Comprimento da aresta [mm]	Número total de hexaedros	Valor médio da velocidade [m/s]	Erro em relação à malha mais densa [%]
1	100	0,0545	41,68
0,8	175	0,0554	40,67
0,6	264	0,0542	41,97
0,4	264	0,0542	41,97
0,2	7500	0,0805	13,85
0,1	50000	0,0917	1,87
0,08	100750	0,0934	N/A

A Figura 11 mostra os valores de velocidade ao longo da linha de amostragem para cada uma das razões k/μ utilizadas. É possível notar que, a partir da razão $3e^{-10}$, o valor da velocidade variou de forma cada vez mais acentuada ao longo da linha de amostragem, na medida em que o valor da razão também aumentou. Os pontos em que a velocidade tendeu a ser constante permaneceram relativamente próximos, sendo esses iguais a 0,04 mm e 0,16 mm. Além disso, a diferença da velocidade, dentro desta região, entre duas curvas adjacentes, foi da mesma ordem de grandeza do acréscimo na razão k/μ , ou seja, $1e^{-10}$, mantendo a coerência com a Lei de Darcy.

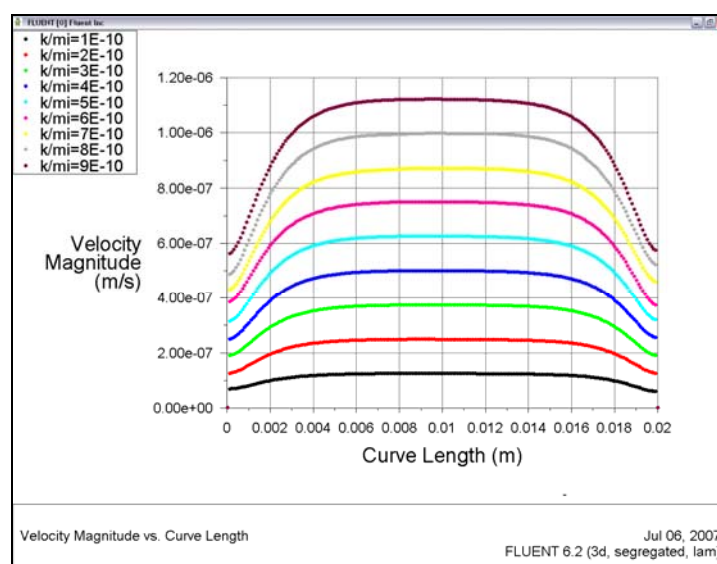


Figura 11: Valores de velocidade ao longo da linha de amostragem para diferentes valores de k/μ .

Finalmente, foi feita a comparação entre os resultados publicados por YAKABE et al, (1999) [7] e aqueles reproduzidos através do FLUENT.

YAKABE et al (1999) [7] apresentam seus resultados para a modelagem do escoamento apenas em um espectro de cores, dificultando a identificação de valores com diferenças expressivas na ordem de grandeza. Entretanto, esses autores observam que, ao passar do canal para o meio anodo, o fluido sofre uma variação na velocidade em seis ordens de grandeza (10^{-6}). Essa observação condiz, parcialmente, com os valores de velocidade obtidos ao longo da linha de amostragem que percorre perpendicularmente ao escoamento e passa pelo meio dos domínios de cálculo. Esses valores estão representados na Figura 12.

Note que os valores obtidos estão cerca de uma ordem de grandeza menores do que o de YAKABE et al (1999) [7]. Essa discrepância em termos quantitativos é considerável. No entanto, do ponto de vista qualitativo e considerando a pouca informação fornecida por YAKABE et al (1999) [7], tais como condições de contorno e de propriedades dos materiais, o resultado é aceitável.

Com isso, mostra-se a importância do desenvolvimento de procedimentos experimentais para a avaliação dessa grandeza e, também, de estabelecer-se de forma precisa todas as considerações utilizadas na modelagem de um fenômeno.

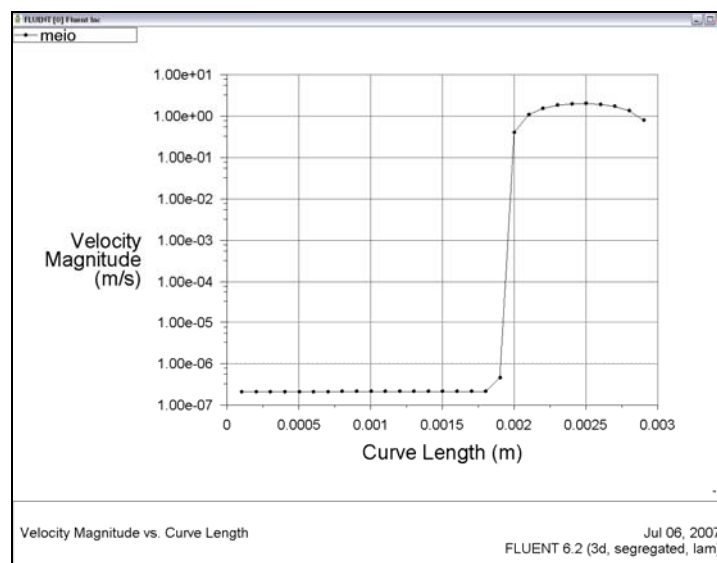


Figura 12: Curva para a velocidade ao longo de uma linha de amostragem.

Observa-se também na Figura 12, o quão abrupta foi a redução de velocidade na interface entre o canal e o anodo. Além disso, nota-se um perfil parabólico na região pertencente ao canal, assim como um valor praticamente constante de velocidade na região do anodo. Esses dois fatos demonstram coerência entre os resultados e a teoria da mecânica dos fluídos e a Lei de Darcy.

4.2 Caso prático

Para o estudo da influência da malha nos resultados, para a geometria de um interconector adjacente a um anodo, definiu-se uma linha de amostragem. Essa linha passa, longitudinalmente, pelo meio do anodo; e está a 7,2 mm do plano de simetria.

A Tabela 13 mostra o erro relativo do valor médio da velocidade de cada linha de amostragem, em relação ao valor médio.

Tabela 13: Erro relativo entre as diversas malhas.

Comprimento da aresta [mm]	Número total de hexaédros	Valor médio da velocidade [m/s]	Erro em relação à malha mais densa [%]
0,25	396257	0,1359	24,27
0,2	767922	0,1568	12,65
0,15	1887312	0,1795	N/A

Dados os recursos computacionais, não foi possível continuar refinando a malha a ponto da diferença do valor médio entre duas malhas ser desprezível. Sendo assim, optou-se por usar a malha com arestas de 0,15 mm, por ser a malha que apresenta maior densidade de elementos e pelo fato do seu comprimento de aresta aproximar-se mais daquele usado na geometria anterior (0,1 mm).

Note que, quando a aresta de 0,2 mm foi usada, o perfil de velocidade sofreu alterações relativamente bruscas, quando comparado aos demais perfis (Figura 13). Isso ocorreu porque o critério de

convergência para o resíduo da equação da continuidade não foi satisfeito. O processo iterativo foi interrompido, pois o valor do resíduo assumiu um valor assintótico.

No geral, os comportamentos dos perfis de velocidade se assemelharam muito aos da geometria anterior, não quantitativamente, mas qualitativamente. Com isso, as observações feitas para este tipo de estudo na geometria anterior, também se tornam válidas aqui.

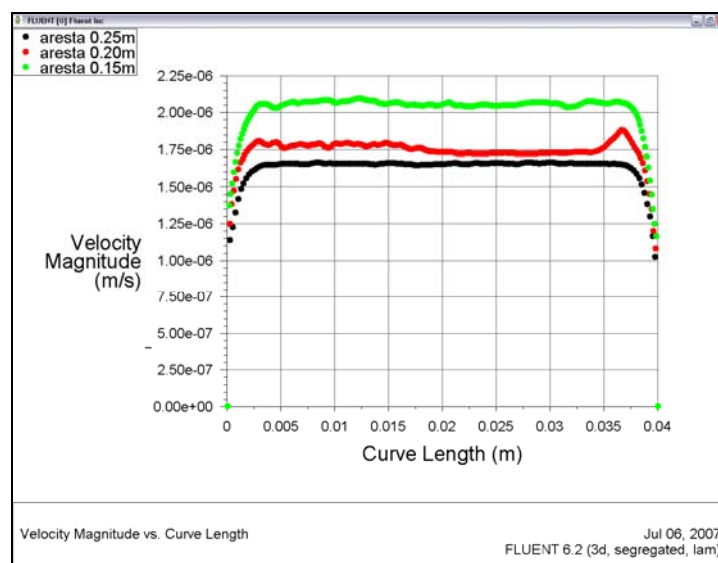


Figura 13: Perfis de velocidade avaliados na linha de amostragem.

Os resultados foram analisados considerando-se a velocidade e a pressão absoluta. A primeira seqüência de resultados apresenta os valores de velocidade e pressão avaliados nas linhas de amostragem. Existem dois grupos de linhas, o primeiro está contido no interconector e as linhas que o compõem passam, longitudinalmente, pelo meio de cada canal e estão distanciadas do plano de simetria, respectivamente, a 2,4 mm, 7,2 mm, 12 mm e a 16,8 mm. O segundo grupo de linhas é uma projeção do primeiro no plano que passa pela metade do anodo. O comprimento de todas estas linhas é de 40 mm, ou seja, do comprimento do anodo.

A Figura 14 mostra os perfis de velocidade para as linhas de amostragem presentes nos canais do interconector. Note que o escoamento apresentou valores acentuados de aceleração e desaceleração, respectivamente, nas saídas e entradas dos canais.

Ao longo dos canais, sobretudo nas porções medianas, os valores de velocidade mantiveram-se relativamente próximos. Isto reduz assimetrias de condições de operação ao longo da célula. Essas assimetrias podem causar, por exemplo, um aumento da geração de calor localizado, ocasionando, então, dilatações diferenciadas e, conseqüentemente, trincas no eletrodo.

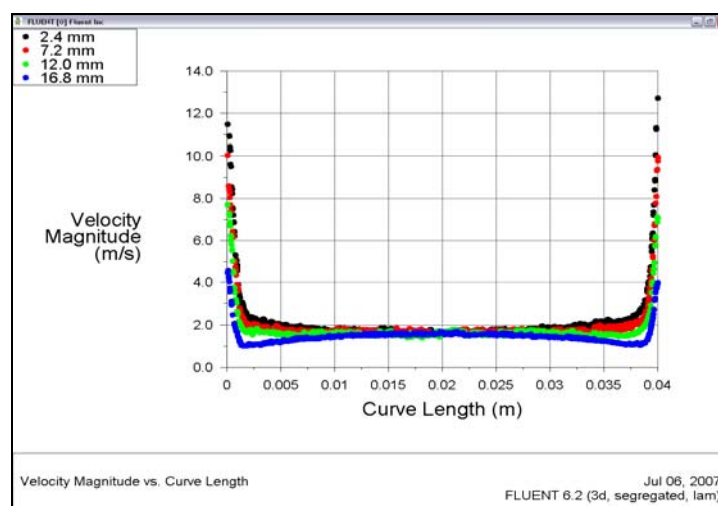


Figura 14: Perfis de velocidade ao longo dos canais do interconector.

A Figura 15 apresenta os perfis de velocidade para o anodo. Note que, a relativa homogeneidade obtida nos canais é perdida, sobretudo, no anodo e nas bordas do eletrodo, o que poderá ocasionar assimetrias de operação.

Os perfis mais próximos do plano de simetria apresentaram valores de velocidade maiores do que os mais distantes. Esse efeito foi, muito provavelmente, ocasionado pela condição de contorno de parede.

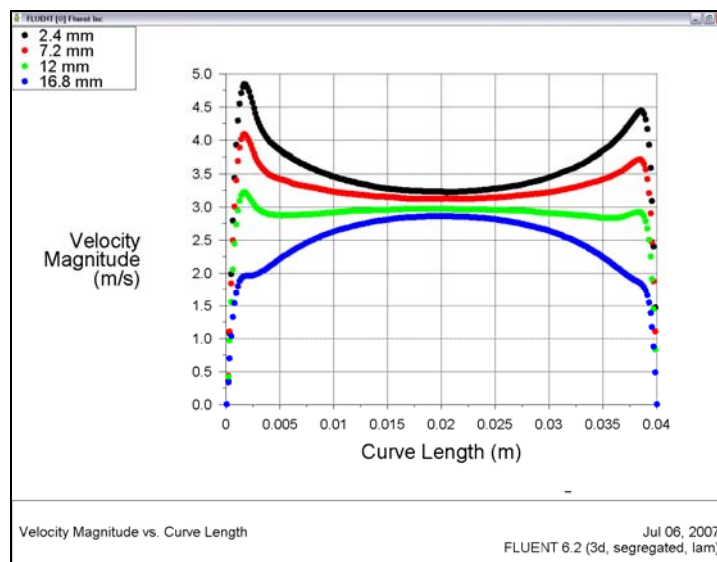


Figura 15: Perfis de velocidade ao longo do anodo.

A Figura 16 mostra as linhas de amostragens perpendiculares ao plano X-Z que atravessam tanto o interconector, quanto o anodo. Essas estão a 7,2 mm do plano de simetria e possuem incrementos de 10 mm, no sentido X, a partir da borda do anodo. Elas foram usadas para avaliar a transição do escoamento entre o interconector e o anodo.

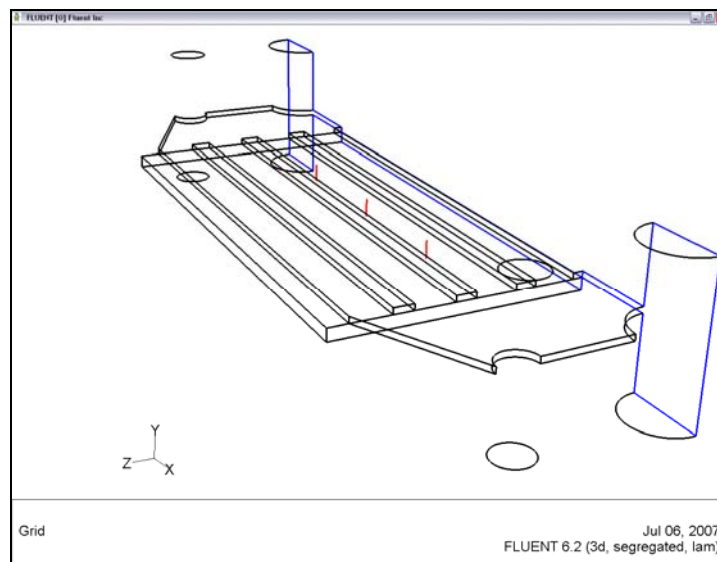


Figura 16: Linhas de amostragem perpendiculares.

A Figura 17 apresenta os perfis de velocidade para as linhas de amostragem definidas na Figura 16. Note que, ao contrário do mostrado na Figura 12, não ocorreram reduções abruptas de velocidade. Esse efeito é devido, principalmente, ao aumento em onze ordens de grandeza do valor da permeabilidade.

A transição do canal para o anodo ocorre na posição “0,001 m”. Repare que o padrão de solução é mantido no anodo, onde a malha é homogênea e hexaédrica. No canal, a malha é tetraédrica e piramidal.

Como não há redução abrupta na interface, o perfil manteve-se, praticamente, parabólico ao longo de todas as linhas de amostragem.

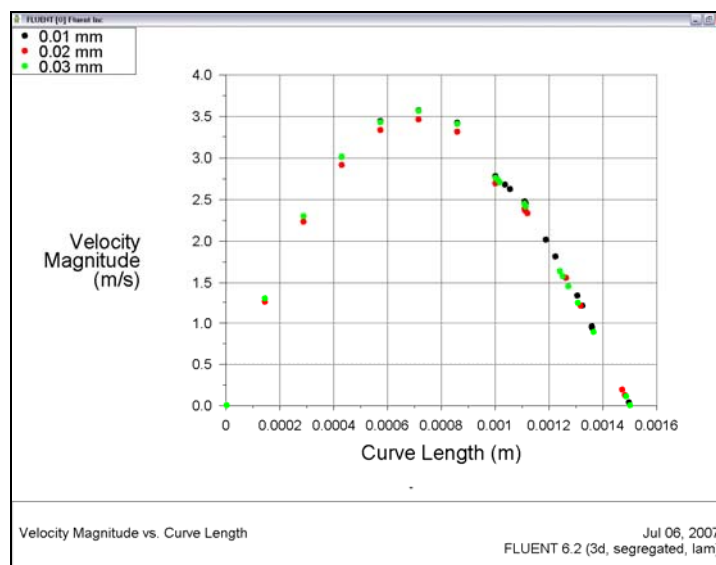


Figura 1: Perfis de velocidade no sentido perpendicular.

Observou-se que as quedas de pressão ao longo tanto do anodo, como do interconector foram pequenas. Isso ocorreu porque o comprimento do domínio de cálculo foi curto e as rugosidades do eletrodo e do interconector foram desprezadas. A queda de pressão no anodo seguiu um comportamento linear, estando de acordo com a Lei de Darcy. Essas observações podem ser bem visualizadas na Figura 18 e na Figura 19.

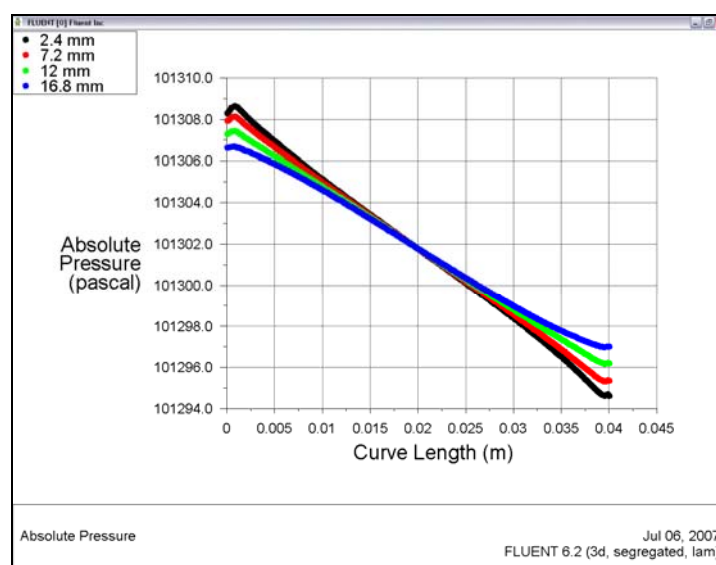


Figura 18: Valores de pressão ao longo das linhas de amostragem no anodo.

Desta forma, pode-se destacar que o procedimento de validação foi, qualitativamente, adequado, que a permeabilidade do meio poroso interfere decisivamente na transição do escoamento entre o canal e o eletrodo e que, além disso, a não homogeneidade da velocidade do escoamento no anodo pode vir a causar uma assimetria nas condições de operação (temperatura e concentração, por ex.) do anodo.

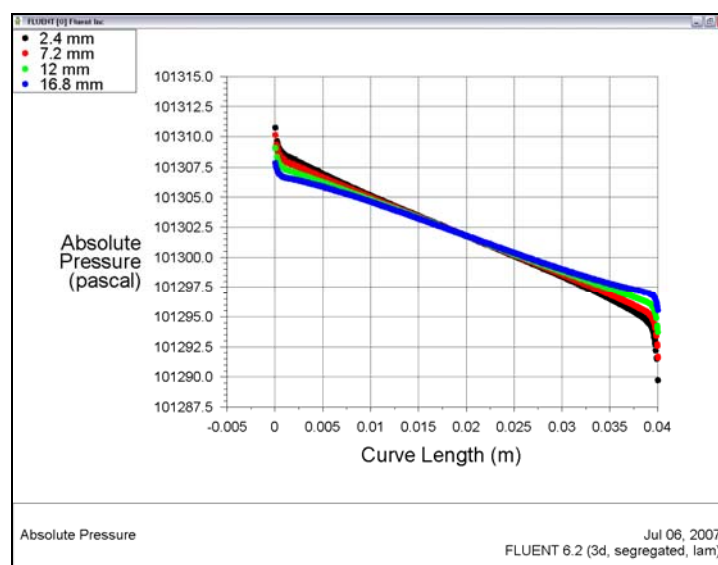


Figura 19: Valores de pressão ao longo das linhas de amostragem no interconector.

5 CONCLUSÕES

O procedimento de validação possibilitou uma validação qualitativa da modelagem de interconectores adjacentes a eletrodos e os resultados obtidos se mostram coerentes com os publicados na literatura.

A geometria de interconector utilizada permite uma homogeneidade no campo de velocidade ao longo dos canais. No entanto, o mesmo não ocorre ao longo do anodo. Uma possível melhoria na geometria do interconector pode ser considerada futuramente, quando os demais fenômenos físicos estiverem atrelados ao modelo.

Outro detalhe a observar-se, seria a mudança de estratégia na geração da malha, na região do interconector, de forma que a maior parte dessa, senão toda, seja discretizada, através do uso de hexaedros. Dessa maneira, um comportamento mais padronizado nos resultados será obtido.

É necessário o refinamento da malha aplicada ao modelo do caso prático, para que haja uma certificação de que a densidade da mesma não esteja influenciando nos resultados.

Foi possível estabelecer uma plataforma para avaliação pré-liminar de interconectores e de eletrodos desenvolvidos para PaCOS, no que se refere à influência dos mesmos no escoamento dos gases.

6 BIBLIOGRAFIA

- [1] BOVE, R., UBERTINI, S., “Modeling solid oxide fuel cell operation: Approaches, techniques and results”, *Journal of Power Sources*, v. 159, pp. 543a-559a, 2006.
- [2] DANG, Z., IWAI, H., SUZUKI, K., “Numerical modeling of disk shape planar SOFC”, In: *Proceedings of Fuel Cell Science, Engineering and Technology*, pp. 361-368, Rochester, Junho, 2004.
- [3] AUTISSIER, N., LARRAIN, D., VAN HERLE, J., FARAT, D., “CFD simulation tool for solid oxide fuel cells”, *Journal of Power Source*, v. 131, pp. 313-319, 2004.
- [4] ABBASPOUR, A., NANDAKUMAR, K., LUO, J., CHUANG, K. T., “A novel approach to study the structure versus performance relationship of SOFC electrodes”, *Journal of Power Source*, v. 161, pp. 965-970, 2006.
- [5] HUSSAIN, M.M., LI, X., DINCER, I., “Multi-component mathematical model of solid oxide fuel cell anode”, *International Journal of Energy Research*, v. 29, pp. 1083-1101, 2005.
- [6] CHENG, C.H., CHANG, Y.W., HONG, C.W., “Multi-scale analysis of transport phenomenon inside the SOFC using MD and CFD techniques”, In: *Proceedings of Fuel Cell Science, Engineering and Technology*, pp. 347-351, Rochester, Junho, 2004.

- [7] YAKABE, H., HISHINUMA, M., URATANI, M., MATSUZAKI, Y., YASUDA, I., “Evaluation and modeling of performance of anode-supported solid oxide fuel cell”, *Journal of Power Sources*, v. 86, pp. 423-431, 2000.
- [8] NISHINO, T., IWAI, H., SUZUKI, K., “Numerical investigation on the strategies for reducing the cell temperatures gradient of an indirect internal reforming tubular SOFC”, In: *Proceedings of Fuel Cell Science, Engineering and Technology*, pp. 353-360, Rochester, Junho, 2004.
- [9] LI, P., CHYU, M.K., “Simulation of the chemical/electrochemical reactions and heat/mass transfer for a tubular SOFC in a stack”, *Journal of Power Sources*, v. 124, pp. 487-498, 2003.
- [10] LU, Y., SCHAEFER, L., LI, P., “Numerical simulation of heat transfer and fluid flow of a flat tube high power density solid oxide fuel cell”, In: *Proceedings of Fuel Cell Science, Engineering and Technology*, pp. 369-374, Rochester, Junho, 2004.
- [11] ZITNEY, S.E., PRINKEY, M.T., SHAHNAM, M. et al, “Coupled CFD and process simulation of a fuel cell auxiliary power unit”, In: *Proceedings of Fuel Cell Science, Engineering and Technology*, pp. 339-345, Rochester, Junho, 2004.
- [12] MILEWSKI, J., MILLER, A., “Mathematical model of SOFC (solid oxide fuel cell) for power plant simulations”, In: *Proceedings of ASME Turbo Expo 2004*, Vienna, Junho, 2004.
- [13] FOX, R.W., MCDONALD, A.T. *Introdução à mecânica dos fluidos*, Rio de Janeiro: LTC – Livros Técnicos e Científicos, 2001, pp. 504.
- [14] LISBOA, E.F.A., *Uma abordagem multi-escala para o cálculo da permeabilidade longitudinal de meios porosos fibrosos randômicos*, M.Sc, UFRJ/COPPE, Rio de Janeiro, RJ, 2000.
- [15] VAFAI, K. *Handbook of Porous Media*. Boca Raton: Taylor and Francis Group, pp. 742, 2005
- [16] ALEXEENKO, A. Gás Dynamics Toolbox, <http://web.ics.purdue.edu/~alexeenk/GDT/index.html>. Acessado em junho de 2007.
- [17] KAURINKOSKI, P., *Numerical determination of the flow of an arbitrary mixture of gases*, Dissertação, Licenciado em Tecnologia, Engenharia Mecânica, Helsinki University of Technology, Helsinki, 1995.
- [18] MALALASEKERA, W., VERSTEEG, H.K. *An introduction to computational fluid dynamics. The finite volume method*, Harlow: Prentice Hall, pp. 1995. 257.
- [19] PATANKAR, S.V. *Numerical heat transfer and fluid flow*. New York: Hemisphere Publishing Corporation, pp. 197, 1980.
- [20] TIETZ, F., DIAS, Fr.J., SIMWONIS, D., STÖVER, D., “Evaluation of commercial nickel oxide powders for components in solid oxide fuel cells”, *Journal of the European Ceramic Society*, v. 20, pp. 1023-1034, 2000.