

DETERMINACIÓN DEL ORDEN DE DISCRETIZACIÓN EN SIMULACIONES NUMÉRICAS DE CELDAS DE COMBUSTIBLE DE ÓXIDO SÓLIDO

Edwin Camilo Suárez Sánchez (1), Francisco Elizalde Blancas (2)

¹ [Ingeniería Mecánica, Universidad Santo Tomás de Aquino] | [edwinsuarezs@usantotomas.edu.co]

² [Departamento de Ingeniería Mecánica, División de Ingenierías Campus Irapuato - Salamanca, Universidad de Guanajuato] | [franciscoeb@ugto.mx]

Resumen

En este trabajo se determina el orden de discretización de simulaciones numéricas de una celda de combustible de óxido sólido, llevando a cabo simulaciones con diferentes densidades de malla, desde una malla burda hasta una fina, variando también los criterios de convergencia desde 1×10^{-6} hasta 1×10^{-12} . Además se utilizaron tres valores diferentes de corriente que van desde los 0.025 A hasta 0.125 A, puesto que esto permitió que los valores del orden de discretización fuesen más exactos y el análisis sea de una mayor versatilidad. Con el fin de validar el método por medio del cual se calcula el orden de discretización, se llevó a cabo el análisis de un problema de transferencia de calor en dos dimensiones en 6 densidades de mallado diferentes. En este caso de análisis la temperatura promedio y la transferencia calor fueron los parámetros con los cuales se determina el orden de discretización.

Abstract

In this work the discretization order of numerical simulations of a solid oxide fuel cell is determined carrying out simulations with different grid densities, starting with a coarse grid and ending with a fine grid, varying also the convergence criteria from 1×10^{-6} to 1×10^{-12} . Besides, three different current values ranging from 0.025 A to 0.125 A were used, since this allowed a more accurate calculated discretization and the analysis is therefore more versatile. In order to validate the method use to determine the discretization order, a two-dimensional heat transfer analysis was carried out using six different grid densities. In this case, the average temperature and the heat transfer rate were the parameters used to determine the discretization order.

Palabras Clave

Discretización; orden de discretización; residuales; densidad de malla.

INTRODUCCIÓN

El análisis de celdas de combustión se ha realizado desde hace algunas décadas debido a que es un sistema de generación de energía limpia, puesto que su combustible como tal es hidrógeno y como producto se obtiene vapor de agua, la cual no es contaminante para el medio ambiente. Por lo cual al ser un sistema eficiente para la producción de energía limpia, es necesario tener el conocimiento suficiente de su funcionamiento, aplicabilidad, restricciones, etc. Debido a esto al ser un sistema complejo y de variables difíciles de controlar experimentalmente, se debe proceder a utilizar un software como medio de investigación, necesitando saber qué tan confiables llegan a ser los resultados que se obtienen, que es parte de la información que proporciona el orden de discretización.

Celdas de combustible

Las celdas de combustible están compuestas por dos electrodos, un electrolito y colectores de corriente como se muestra en la Figura 1. Este sistema está compuesto por dos colectores que son los encargados de la transmisión de los electrones entre celdas y así generando un sistema continuo de transferencia de energía [1].

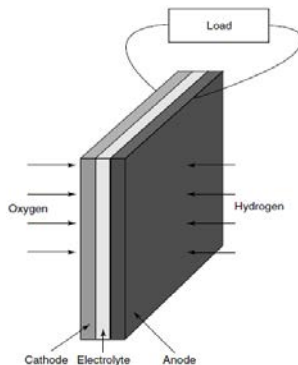


Figura 1. Componentes de una celda de combustible [1].

Funcionamiento de una SOFC (Celda de Combustible de Óxido Sólido)

Las celdas de combustible de óxido sólido son las celdas que soportan las mayores temperaturas de

funcionamiento, por ello se manejan con este tipo de combustible y su funcionamiento es tan similar a las de tipo MCFC (Molten Carbonate Fuel Cell). El material más común para el electrolito es cerámica, para el ánodo es en su mayoría zirconio con cerámica resistente al calor y el cátodo es en estroncio dopado con manganita y lantano. El principio de funcionamiento de una SOFC se encuentra representado en la Figura 2.

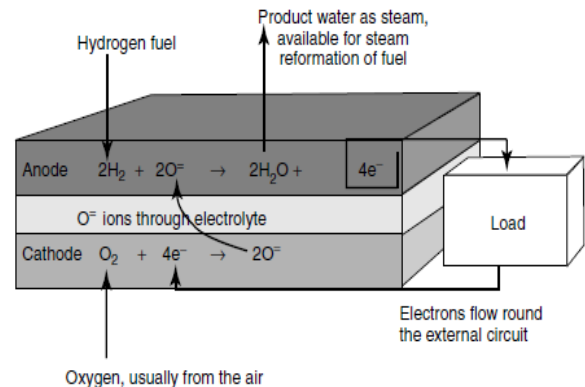


Figura 2. Funcionamiento de una celda de combustible de óxido sólido[1].

MATERIALES Y MÉTODOS

El desarrollo del proyecto se dio gracias al uso de los programas Gambit y Fluent del software ANSYS, donde se llevaron a cabo las simulaciones en el módulo de celdas tipo SOFC. También se utilizó el software Matlab, donde por medio de un código se encontraron los valores del orden de discretización para el grupo de casos analizados, que variaban entre sí por 3 corrientes diferentes de 0.025 A, 0.075 A y 0.125 A y 5 mallas de diferente densidad, desde 16000 elementos hasta uno de 1024000 elementos.

Se construyó inicialmente la geometría en Gambit donde se definen las condiciones de frontera, las propiedades geométricas y las dimensiones (densidad) de la malla. Posteriormente se importa el archivo .msh con el cual se trabaja en Fluent, en donde se define el módulo con el que se trabajará, que en este caso fue el SOFC (Solid Oxide Fuel Cell). En Fluent se definen las condiciones eléctricas del sistema y de operación donde una de las más relevantes es la corriente a

la que trabajará la celda. Se definen también las propiedades de cada uno de los componentes de la celda y las condiciones de porosidad del cátodo y el ánodo.

Luego de que se definieron las condiciones de operación del sistema, las simulaciones numéricas de la SOFC se llevaron a cabo a las tres corrientes antes mencionadas y a tres diferentes criterios de convergencia (10^{-6} , 10^{-9} y 10^{-12}). Además de esto, las simulaciones anteriores se realizaron con esquemas de discretización de primer y segundo orden para los términos convectivos.

El método matemático por medio del cual se determinó el orden de discretización del modelo fue el de la extrapolación de Richardson, el cual necesita del valor de un parámetro de la solución en tres mallas de diferente densidad [2]. En el caso de la SOFC el parámetro con el cual se calcula el orden de discretización es el voltaje de la celda, que se obtiene mediante un proceso de integración. Para el cálculo del orden de discretización es necesario definir un tamaño promedio de la malla, el cual en el caso de problemas tridimensionales se define como

$$h = \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\Delta V_i) \right]^{\frac{1}{3}} \quad (1)$$

en donde N es el número de elementos de la malla y ΔV_i es el volumen del iésimo elemento.

El orden de discretización se calcula por medio de la siguiente ecuación [2]

$$p = \frac{1}{\ln(r_{21})} \left| \ln \left| \frac{\varepsilon_{32}}{\varepsilon_{21}} \right| + q(p) \right| \quad (2)$$

en la cual es necesario calcular la función $q(p)$, definida como

$$q(p) = \ln \left(\frac{r_{21}^p - s}{r_{32}^p - s} \right) \quad (3)$$

donde se debe calcular el valor s, por medio de la función signo. La variable s es función de las diferencias de los valores utilizados en un triplet, y se define como

$$s = 1 * \text{sgn} \left(\frac{\varepsilon_{32}}{\varepsilon_{21}} \right) \quad (4)$$

Para el cálculo de $q(p)$ y de p es necesario definir la relación de dos tamaños promedio pertenecientes al triplet analizado, definida como

$$r_{21} = \frac{h_2}{h_1} \quad (5)$$

Necesariamente se deben calcular los valores de la diferencia entre los valores de los resultados obtenidos para poder calcular s y p, definido como

$$\varepsilon_{21} = \phi_2 - \phi_1 \quad (6)$$

Como se puede apreciar en las Ecs. (2) y (3), se requiere de la solución en tres densidades de malla distinta. En este trabajo se obtuvieron soluciones en 5 diferentes densidades de malla y todas las combinaciones de soluciones en grupos de tres (triplets) fueron analizadas para determinar el orden de discretización

Para encontrar el orden de discretización de las simulaciones numéricas, se resolvió la Ec. (2) mediante el uso de matlab. Para corroborar la solución en algunos casos particulares, se desarrolló un programa en Excel en el cual se buscaba una solución iterativa. Este proceso se llevó a cabo tanto para el análisis de la celda de combustible de óxido sólido, como para un problema de menor complejidad en el cual tan sólo se presentaba transferencia de calor por conducción y convección como se muestra en la Figura 3.

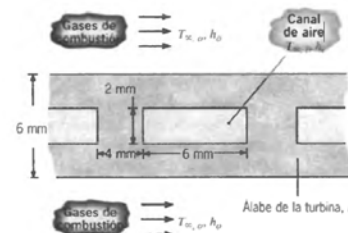


Figura 3. Problema de transferencia de calor[3].

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Inicialmente se procedió a llevar a cabo la búsqueda del orden de discretización del problema simple de transferencia de calor en estado permanente. En este problema de transferencia de calor se generaron 20 grupos de mallas, los 20 grupos están formados por estos 5 tamaños diferentes de mallado: $\Delta x_1 = 1\text{mm}$, $\Delta x_2 = 0.5\text{mm}$, $\Delta x_3 = 0.25\text{mm}$, $\Delta x_4 = 0.125\text{mm}$, $\Delta x_5 = 0.0625\text{mm}$, $\Delta x_6 = 0.03125\text{mm}$. Los valores analizados para determinar el orden de discretización fueron la transferencia de calor en la superficie y la temperatura promedio de la superficie como se

muestra en la Figura 4. Al ser un problema con dos ejes de simetría se decidió simplificar al máximo el problema, por lo que se analizó una cuarta parte de la superficie (ver Figura 4).

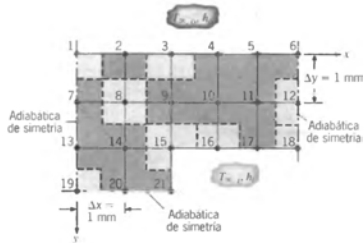


Figura 4. Dominio de cómputo del problema de transferencia de calor [3].

En este caso los resultados fueron muy aproximados a 2 para el valor encontrado del calor transferido, de manera ascendente desde el grupo de las 3 mallas menos finas (4-5-6) hasta el de las 3 más finas (1-2-3), como se puede ver en la Tabla 1, en donde se presentan solamente los resultados en 6 de los 20 triplets conformados. Para la temperatura promedio se obtuvo una disminución del orden de discretización (p), el cual se alejaba gradualmente de 2 conforme el grupo de tres mallas se integra de las mallas más densas. La diferencia principal entre la transferencia de calor y la temperatura promedio, es que la segunda se calcula mediante un proceso de integración, lo que seguramente ocasiona la reducción del orden de discretización.

Tabla 1. Resultados problema de transferencia de calor.

Grupo de mallas	Valor de p para T_{prom}	Valor de p para Q
1-2-3	2,000	1,891
1-3-5	1,782	1,912
1-4-6	1,611	1,918
2-3-4	1,637	1,922
2-4-6	1,429	1,923
4-5-6	1,129	1,928

Con el desarrollo del proyecto se busca determinar el orden de discretización para las simulaciones con diferentes condiciones de operación y densidades de malla en una SOFC. Los valores que se buscaban de cada simulación fueron los de voltaje, utilizando tres residuales diferentes que son 10^{-6} , 10^{-9} y 10^{-12} en 5 mallas diferentes que consistieron de 16000, 54000, 128000, 432000 y

1024000 elementos, 3 corrientes diferentes de 0.025 A, 0.075 A y 0.125 A y se utilizaron esquemas de discretización tanto de primero como de segundo orden para el caso de un criterio de convergencia de 10^{-9} debido a que se observó que los cambios más notorios en los resultados se presentaban hasta el criterio de convergencia de 10^{-9} . Las voltajes obtenidos de las simulaciones numéricas tuvieron un comportamiento totalmente monótonico, como podemos observar en la Tabla 2 y la Figura 5 en donde es notorio el aumento de los valores debido al cambio de que los criterios de convergencia pasaran de primer orden a segundo orden.

Tabla 2. Voltajes de la SOFC para una corriente de 0.025 A, asumiendo los diferentes criterios de convergencia.

0.025 A	Primer Orden (P.O.)			Segundo Orden(S.O.)
	1,00E-06	1,00E-09	1,00E-12	1,00E-09
# de elementos				
16000	0,87659341	0,87659341	0,87659341	0,87718594
54000	0,87678838	0,87678838	0,87678838	0,87725448
128000	0,87708193	0,87708193	0,87708193	0,87733317
432000	0,87729895	0,87729895	0,87729895	0,87749279
1024000	0,87742954	0,87742949	0,87742949	0,87757027

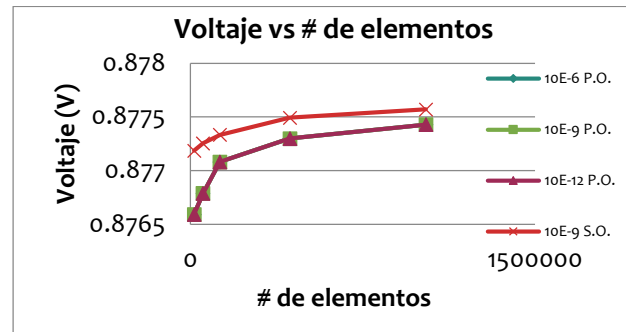


Figura 5. Voltaje de la SOFC para diferentes densidades de malla operando a una corriente de 0.025 A, con discretizaciones de primer y segundo orden.

Posteriormente al observar que los valores del orden de discretización encontrados para el voltaje no eran muy concluyentes, se analizaron los valores de la transferencia de calor a la entrada y salida de aire, a la entrada y salida de combustible y el calor neto transferido, con residuales de 10^{-9} . El orden de discretización para los casos antes descritos se muestran en la Tabla

3. Para el caso de la celda los valores del orden de discretización oscilaron entre 0,01 y 6,34, variando aleatoriamente, sin que se pudiese definir algún tipo de patrón que caracterizara los resultados obtenidos.

Tabla 3. Orden de discretización para el voltaje y la transferencia de calor neta con residual de 10^{-9} , corriente de 0.025 A, donde G.D.M.P. (Grado de densidad de mallado de la tripleta).

G.D.M.T.	P (voltaje)	P(Calor Neto)
1	3,54575	3,46252
2	0,525494	0,50552
4	0,48366	0,49509
6	0,47758	0,48523
8	1,52652	1,52667
10	0,47084	0,47426

Al analizar el orden de discretización de la SOFC, se puede observar que éstos son muy poco concluyentes, puesto que los valores son muy oscilatorios (Tabla 3), a pesar de que el orden de discretización entre diferentes valores analizados tenga valores muy similares; en comparación con los órdenes de discretización definidos para el problema de transferencia de calor, estos no entregan ningún patrón de análisis. La posible razón por la cual los valores de p son poco concluyentes en el caso de las simulaciones de la celda de combustible de óxido sólido, se puede atribuir a que es un problema de mayor complejidad al resolver una gran cantidad de ecuaciones como lo son: continuidad, energía, momento en sus tres direcciones, conservación de especies (H_2 , H_2O y O_2).

CONCLUSIONES

- El desarrollo del proyecto permitió demostrar cómo el orden de discretización para problemas de baja complejidad, son mucho más concluyentes.
- A pesar de que los resultados de voltaje y transferencia de calor obtenidos tienen tendencias congruentes, no se pueden considerar como resultados concluyentes, debido a que los valores de orden de discretización mostraron un

comportamiento aleatorio y sin algún patrón de análisis.

AGRADECIMIENTOS

Agradezco de antemano a la Universidad de Guanajuato que me apoyó económicamente y me permitió participar de una actividad tan enriquecedora, tanto académica como personalmente, agradezco al Dr. Francisco Elizalde Blancas quien fue mi asesor en el desarrollo del proyecto y quien me apoyó en el paso a paso de su desarrollo, y por último a la Universidad Santo Tomás por permitirme representarle en un convocatoria como ésta.

REFERENCIAS

- [1] A. Dicks and J. Larminie, *Fuel Cell Systems Explained*, Segunda. 2003.
- [2] F. E. Division, E. P. Statement, N. Accuracy, A. J. F. Eng, F. Engineering, E. Policy, N. Accuracy, and A. J. F. Eng, "Procedure for Estimation and Reporting of Uncertainty Due to Discretization in CFD Applications," *J. Fluids Eng.*, vol. 130, no. 7, p. 078001, 2008.
- [3] F. P. Incropera and D. P. DeWitt, *Fundamentos de Transferencia de Calor*, Cuarta Edi. 1999.