

Modelagem e simulação do comportamento de um microcombustor com degrau direcionado para trás operando com diferentes velocidades de entrada e razões de equivalência

Victor Gabriel Santos Silva*, Éliton Fontana, Luiz Fernando de Lima Luz Jr

1 - Universidade Federal do Paraná – UFPR – PR, victorgssilva92@gmail.com

2 - Universidade Federal do Paraná – UFPR, Curitiba - PR

3 - Universidade Federal do Paraná – UFPR, Curitiba - PR

Resumo - Os combustíveis fósseis possuem muito mais densidade de energia que baterias químicas e um aparato promissor para utilizar esse potencial são as células termofotovoltaicas. Ainda assim, é necessário estudar como tornar esse sistema mais eficiente, como por exemplo o combustor (emissor). Neste trabalho, foi estudado um microcombustor com degrau direcionado para trás e os efeitos da variação da razão de equivalência estequiométrica ($\Phi = 0,2$ a 1) e da velocidade de entrada ($u_0 = 4$ a 16 m/s) na temperatura da parede externa e eficiência de emissão, que podem determinar a quantidade de fótons que é convertida em energia elétrica de fato, por terem energia suficiente. Os resultados mostram que o degrau direcionado para trás pode ser útil em aumentar a temperatura da parede, dado que a velocidade seja alta o suficiente para gerar a turbulência necessária. Entretanto as temperaturas mais altas foram atingidas ao utilizar $\Phi = 1$, onde a formação da chama ocorre antes do degrau.

Palavras-chave: sistemas micro termofotovoltaicos (MTPV); modelagem e simulação, hidrogênio, Fluent

Introdução

O requerimento por alta densidade de energia ou tempo operacional mais longo entre recargas era geralmente bem servido pelas baterias de íon de lítio ou baseadas em níquel, além de fatores ambientais. Existe agora uma pressão crescente em produtores de baterias pelo incremento da densidade de energia para a próxima geração de equipamentos portáteis eletrônicos, que irá requerer muito mais densidade de energia, sendo o equipamento convenientemente portátil, e a tecnologia atual de baterias dificilmente irá acompanhar essa demanda crescente de energia [1].

Uma alternativa promissora às baterias atuais é o sistema termofotovoltaico (TPV) que utiliza combustão, que é um dispositivo sólido de conversão de energia com densidade superior (12 kWh/kg) comparado com baterias químicas ($0,2$ kWh/kg). A alta densidade de energia desses combustíveis amplamente disponíveis permite até que geradores relativamente ineficientes sejam competitivos com baterias. Entretanto, ainda é difícil converter essa energia de forma eficiente e robusta em eletricidade em escala milimétrica [6].

O aparelho micro termofotovoltaico (MTPV) consiste de 4 elementos: a fonte de calor, um tubo de combustor (emissor), um filtro e uma celular fotovoltaica de baixo bandgap, como representado na Fig 1. Um combustível é queimado no microcombustor. Quando o emissor é aquecido a uma temperatura alta o suficiente, emite fótons. Quando os fótons com energia maior que a bandgap da célula PV a atingem, eles geram elétrons

livres e produzem a energia elétrica [4]. Ele não inclui partes móveis, então sua fabricação e montagem é relativamente simples. Como resultado, pode ser utilizado comumente para propósitos comerciais e microdispositivos [5].

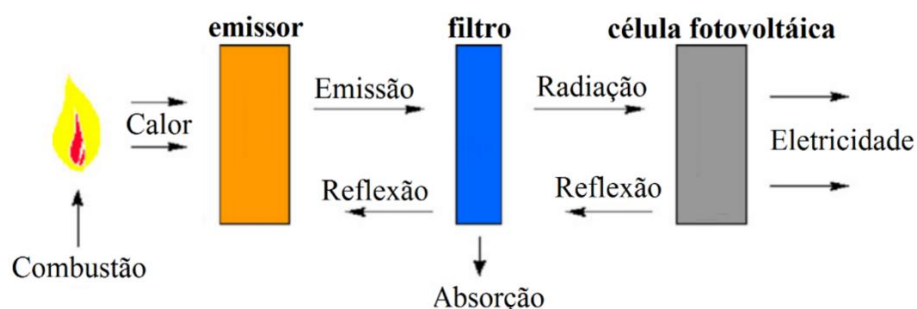


Figura 1 - Esquema simplificado de um dispositivo termofotovoltaico.

O intuito deste trabalho é validar um modelo matemático com base em dados experimentais e então avaliar algumas condições operacionais e seu efeito no desempenho do microcombustor como emissor num MTPV. Considerando que a parede externa precisa chegar a uma certa temperatura para emitir fótons de energia suficiente para gerarem eletricidade, a temperatura da parede externa é uma das variáveis analisadas. Outro fator que vai influenciar o output elétrico é a eficiência do emissor (quanto da energia total é emitida), pois o combustível queimado deve ser aproveitado ao máximo e perdas com combustão incompleta ou calor sendo perdido na saída do tubo não são desejáveis.

As variáveis de processo estudadas foram a razão de equivalência ($\Phi = 0,2$ a 1), que influencia na entrada de energia e nas taxas de reação, e a velocidade de entrada ($u_0 = 4$ a 16 m/s), que influencia na turbulência, tempo de residência e também entrada de energia. Para a simulação, é importante a determinação da condutividade térmica, visto que essa propriedade domina o transporte de calor na parede metálica e da emissividade, por esta configurar a capacidade de emissão do combustor.

Experimental

Dados experimentais

Os dados experimentais utilizados foram obtidos pelos autores Li et al. [2]. O aparato experimental utilizado por eles está disposto esquematicamente na Fig 2. O sistema é exposto ao ar atmosférico, consistindo de dois controladores de fluxo de massa, um plenum (para mistura do combustível e do ar), um tubo de conexão, um microcombustor, um termômetro de infravermelho e um PC. O hidrogênio foi escolhido como combustível por conta do seu alto poder calorífico, rápida velocidade de difusão, tempo de reação curto e alta velocidade da chama. O ar é fornecido através de um compressor de ar. A temperatura da parede foi medida usando o termômetro de infravermelho.

O microcombustor usado no experimento é feito de aço inoxidável 316, que suporta altas temperaturas sem degradação significativa. A Fig 3 mostra as características de design do microcombustor cilíndrico. Um degrau direcionado para trás é empregado para fins de estabilização da chama. Considerando a Fig 3, os autores utilizam as medidas $L_{in} = 7$ mm, $d_{in} = 1$ mm, $d = 2$ mm, $t = 0,5$ mm e $s = 0,5$ mm. No total 3 combustores, de 10, 15 e 20 mm foram utilizados. Como as paredes eram oxidadas muito rapidamente, com o intuito de assegurar propriedades estáveis, todos os combustores foram “queimados” (com chama estável dentro) por 2 horas antes de serem feitas as medições. As condições de operação foram razão de equivalência $\Phi = 0,6$ a 1 (pobre em hidrogênio) e velocidade do fluxo $u_0 = 8$ -16 m/s, pois durante os experimentos, uma velocidade menor que o intervalo gerou flashback e uma velocidade maior gerou emissões acústicas excessivas.

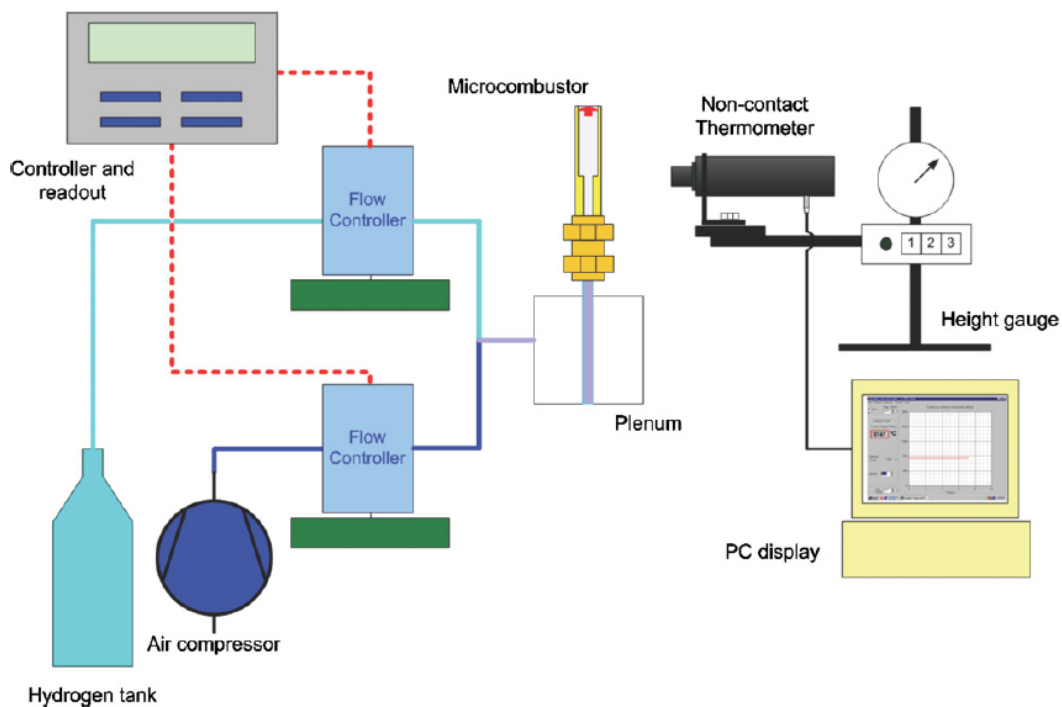


Figura 2 – Esquema do arranjo experimental para a micro combustão [2]

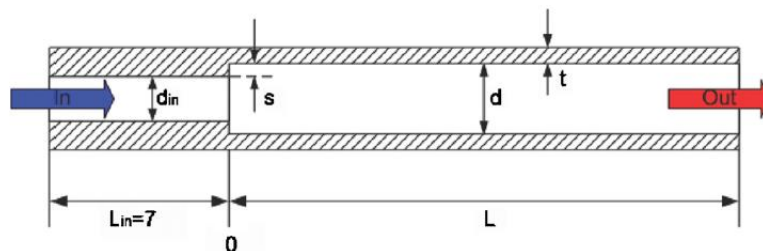


Figura 3 – Características de design do microcombustor cilíndrico [2]

A emissividade da parede é uma variável necessária para o termômetro de infravermelho medir a temperatura, portanto ela precisou ser determinada, visto que poderiam haver divergências da literatura pesquisada, pelo fato de ser um tubo cilíndrico, a parede não ser uniforme e haver influência de comprimentos de onda secundários. Como a determinação precisa da emissividade não foi escopo do trabalho, eles a fizeram

calibrando a leitura do termômetro a partir de gizes de cera com pontos de liquefação conhecidos, chegando ao intervalo de 0,8 a 0,9. Essa emissividade pode não ser a real, pois reflete a influência de fatores como ângulo de visão, temperatura e condição da superfície e considerando que corresponde ao comprimento de onda principal ($1,6 \mu\text{m}$) do termômetro. Calculou-se o erro devido à incerteza da emissividade da parede sendo próximo a 2% da magnitude da temperatura (em °C).

Simulação

Após avaliação de vários modelos utilizando 5, 10 e 20 W/m-K, os autores Li et al. [2] chegaram à conclusão de que a condutividade térmica que melhor representa os dados experimentais é $k_s = 5 \text{ W/m-K}$. A utilização de um modelo de turbulência (no caso, o modelo $k-\varepsilon$) foi essencial, pois leva em consideração a transferência de calor do centro do combustor à parede externa, gerando resultados de temperatura na parede externa mais altos e próximos do experimental. Quando considerado o modelo laminar, a temperatura de saída é superestimada, pois parte dessa energia que deveria ter sido dispersada é perdida na saída do combustor. A emissividade por definição, comparada a um corpo negro de mesma temperatura, obtida pelas avaliações dos modelos com 0,4, 0,6 e 0,8 foi de $\varepsilon = 0,6$.

Neste trabalho, o modelo cinético de combustão aplicado foi o mecanismo de fase gás para oxidação de hidrogênio descrito por Warnatz et al. [3], que contém 19 reações e 9 espécies químicas. Foram utilizados o valor de condutividade térmica $k_s = 5 \text{ W/m-K}$ e o modelo de turbulência $k-\varepsilon$. Já para a emissividade que melhor se adequou aos dados experimentais foi $\varepsilon = 0,4$, portanto este valor foi adotado.

A Fig 3 e as dimensões descritas foram utilizadas como base para o esquema do domínio computacional do microcombustor, sendo que a geometria foi simplificada utilizando uma seção 2D e o plano de simetria na linha central. O comprimento escolhido para as simulações foi $L = 20 \text{ mm}$, que maximiza a eficiência do emissor, por ter maior área superficial (embora tenha menor temperatura média).

As equações governantes utilizadas foram as equações padrão de conservação da massa, momento, energia e espécie química, sendo estas discretizadas em uma malha estruturada contendo aproximadamente 60.000 elementos. Diferentes tamanhos de malha foram avaliados e determinou-se que este número de elementos foi suficiente pra atingir uma precisão de 10^{-6} . As equações foram resolvidas com o uso do software Fluent 16.0, onde o método de volumes finitos é aplicado para a discretização. O método SIMPLE foi utilizado para resolver o acoplamento pressão-velocidade e fatores de sobre-relaxação adequados foram utilizados para manter a solução estável.

Como condições de contorno, definiu-se valores constantes para a velocidade, composição e temperatura (300 K) na entrada. Na parede externa, foi assumida uma condição de troca térmica mista, considerando convecção e radiação, sendo que o coeficiente de troca térmica foi definido como $10 \text{ W/m}^2 \text{ K}$, a temperatura externa como 300 K e a emissividade 0,4. Na saída, considerou-se pressão ambiente e nas fronteiras internas foi considerado continuidade do fluxo de calor. Para a ignição da reação, o sistema foi inicializado com uma temperatura elevada ($\sim 1000 \text{ K}$).

Resultados e discussão

Na Fig 4, podemos ver que os resultados obtidos com o modelo cinético e emissividade utilizados nesse trabalho se adequam bem aos dados experimentais, estando com um ajuste superior aos dos autores utilizados como base para o artigo [2].

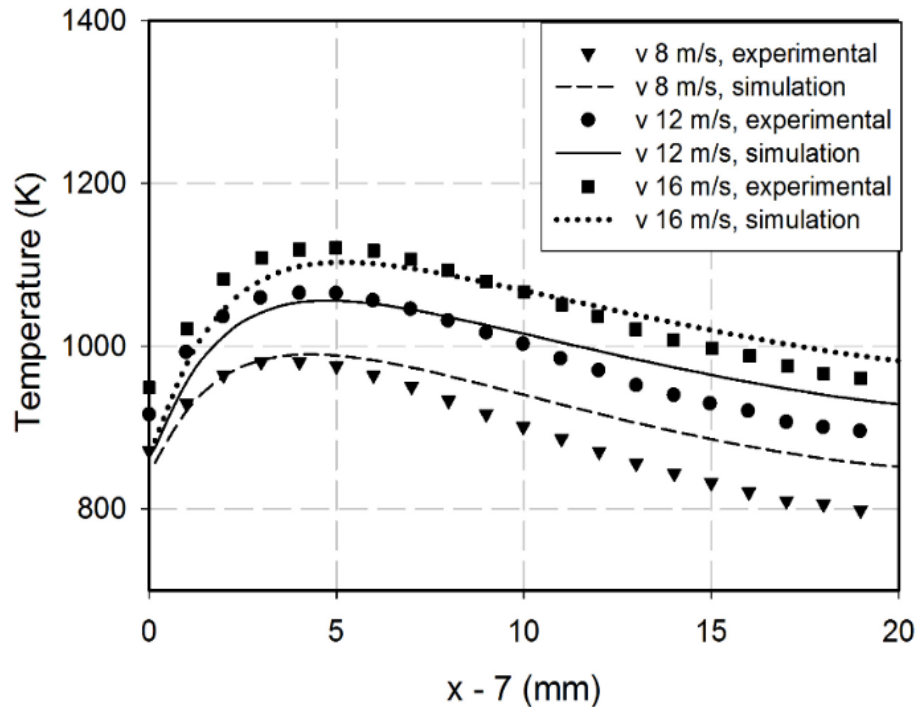


Figura 4 – Comparação entre valores simulados e experimentais

Podemos ver no comportamento dos perfis de temperatura (Fig 5) para as velocidades 8 a 16 m/s que a chama fica ancorada no degrau, devido à alta turbulência gerada na região e quanto maior a velocidade, mais alongada a chama fica. Entretanto no caso de velocidades menores (4 e 6 m/s), a turbulência é menor e o tempo de residência aumenta o suficiente para que ocorra condução de calor a montante do degrau, preaquecendo a mistura e causando ignição do combustível ainda antes do degrau. Nesse caso, o degrau não influencia muito no que se refere à combustão, sendo que a chama fica ancorada na camada limite de velocidade formada na parede do início do tubo, como se fosse formada em um tubo cilíndrico reto (sem expansão).

Como esperado, vemos na Fig 6-a que as linhas centrais possuem temperatura muito alta próximo à chama, sendo que as curvas formadas de forma parecida (pela turbulência do degrau ou pela condução de calor na parede) são bastante similares, com apenas o aumento da velocidade causando o deslocamento para a direita e também um menor decaimento da temperatura após o pico. Entretanto o que nos interessa é a temperatura da parede (Fig 6-b) e no caso das menores velocidades (4 e 6 m/s), a falta de turbulência gerada no degrau diminui a transferência de calor e consequentemente a temperatura para a parede. Além disso, maiores velocidades possuem maior temperatura, pois fixada uma razão de equivalência, o aumento da velocidade gera uma entrada maior de energia (até o limite de redução de tempo de residência em que o combustível consegue ser consumido completamente).

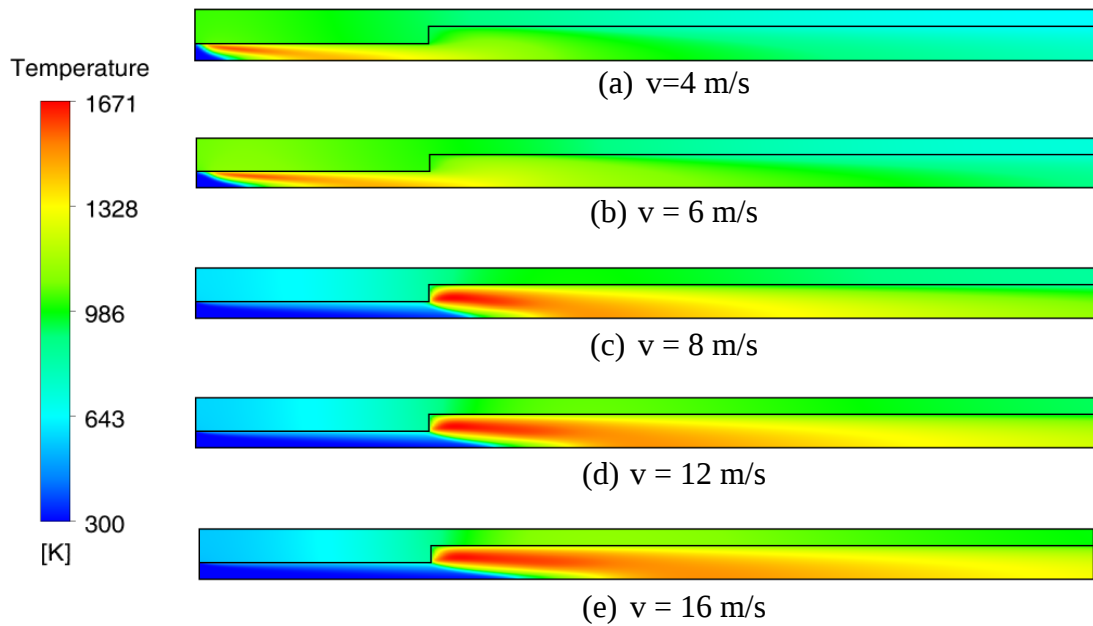


Figura 5 – Perfis de temperatura para diferentes velocidades com $\Phi = 0,8$

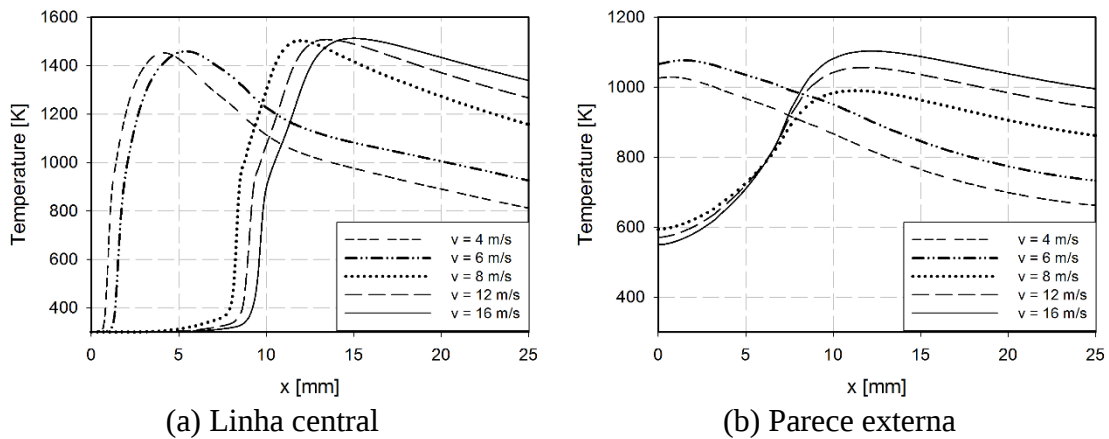


Figura 6 – Curvas de temperatura avaliados em diferentes lugares do combustor para diferentes velocidades de alimentação e $\Phi = 0,8$

Para maiores razões de equivalência, com mais energia entrando, vemos na Fig 7 um aumento da temperatura dos perfis e alongamento da chama, ao ponto de que quando $\Phi = 1$, entra em combustão antes mesmo do degrau. Entretanto, como apontado por Li et al. [2] em seu trabalho, após $\Phi = 0,8$, a temperatura média da parede pode não aumentar mais e a eficiência irá reduzir, pois em proporções próximas à estequiométrica, o combustível dificilmente será consumido totalmente em um microcombustor, devido à intensa perda de calor da chama pela parede do combustor.

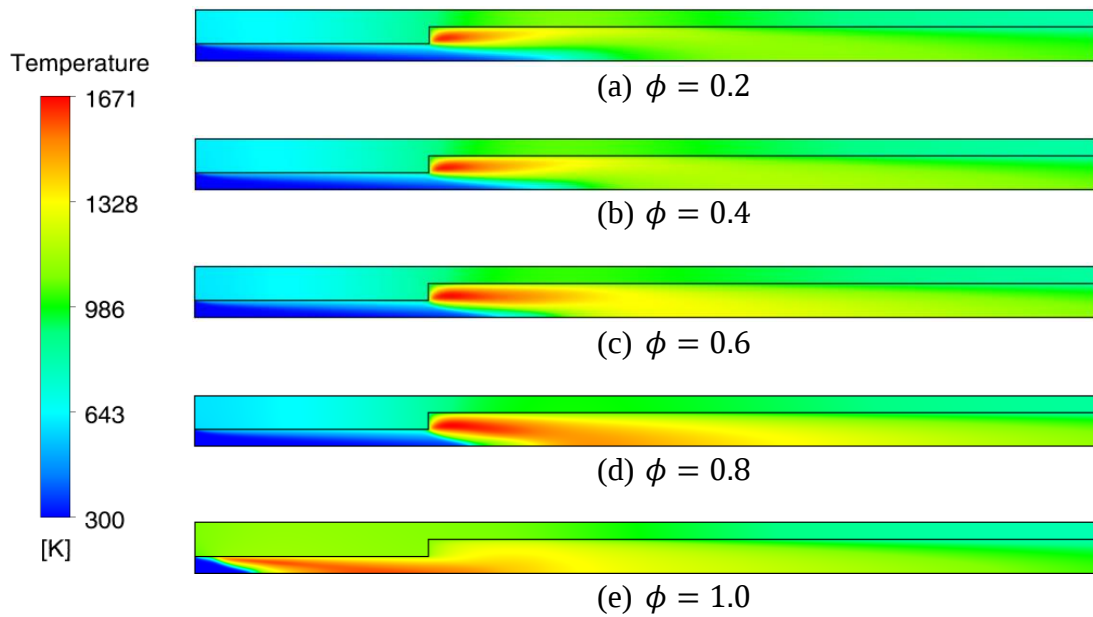


Figura 7 – Perfis de temperatura para diferentes razões de equivalência com $u_0 = 8$ m/s

Na Fig 8 podemos ver que temperatura da linha central e a temperatura da parede seguem o perfil da chama, pois o aumento de temperatura é causado pela maior quantidade de energia que entra no sistema quando aumentamos a razão de equivalência. A diferença entre a curva de temperatura da linha central (Fig 8-a) e da parede (Fig 8-b) é que a curva da parede possui valores mais altos no começo, devido à condução de calor nos dois sentidos da direção x e valores menores a partir da formação da chama, pois o calor da chama precisa ser transportado até a parede.

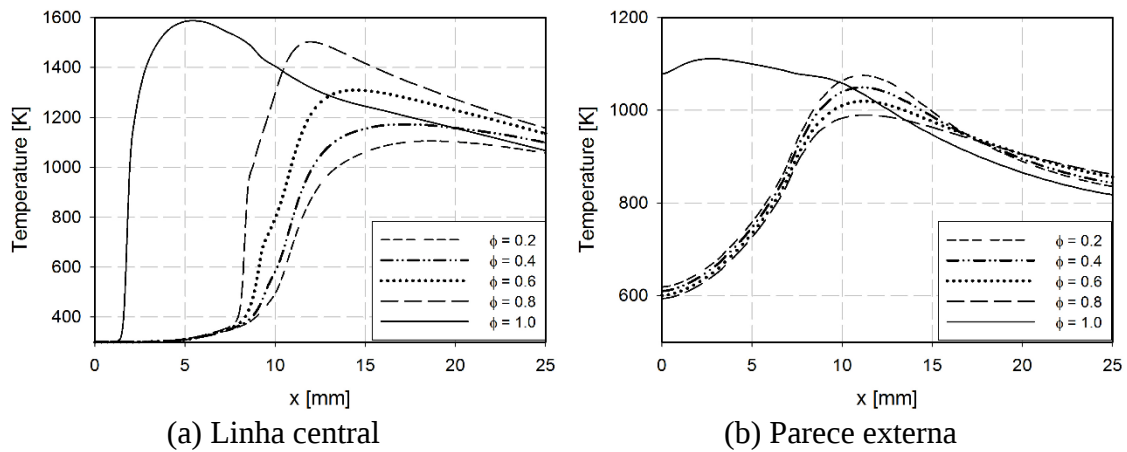


Figura 8 – Curvas de temperatura avaliados em diferentes lugares do combustor para diferentes razões de equivalência e $u_0 = 8$ m/s

Conclusão

No presente trabalho foi avaliado um modelo matemático para descrever a combustão em micro canais utilizando hidrogênio como combustível. As equações foram resolvidas utilizando-se técnicas de CFD e obteve-se uma boa concordância com dados experimentais encontrados na literatura. A partir do modelo validado, foi possível avaliar a influência da velocidade de alimentação e da razão de equivalência de combustível sobre o desempenho do sistema.

O degrau aplicado em um tubo cilíndrico é útil em aumentar a temperatura da parede, se a velocidade seja alta o suficiente para gerar a turbulência necessária para que a chama se forme ancorada logo após o degrau. Embora velocidade menores comecem a chama logo no início do tubo, a entrada de combustível é muito baixa e não há transporte de calor efetivo dentro do tubo e a chama não se estabiliza. Utilizando maiores velocidades podemos atingir uma maior temperatura na parede, isso gera uma entrada maior de energia, caso o combustível ainda esteja sendo consumido totalmente.

Sendo fixada uma velocidade, o aumento da razão de equivalência não gera muita diferença no perfil da temperatura da parede, exceto para o caso em que $\Phi = 1$. Nesse caso, a o perfil apresenta temperaturas mais altas até a formação da chama, a partir daí se equiparando às outras curvas. No trabalho de Li et al. [2], é discutido que o aumento da razão de equivalência não gera um aumento da temperatura da parede, mas vale lembrar que os mesmos mediram apenas valores do degrau ao fim do combustor, excluindo assim exatamente a parte onde a temperatura é discrepante. Eles chegam à conclusão que a eficiência de emissão se reduz quando se aumenta a razão de equivalência, devido à combustão incompleta e isso é algo a ser ponderado ao se utilizar razões maiores que 0,8.

Referências bibliográficas

1. C. K. Dyer. Fuel cells for portable applications. *Journal of Power Sources*. 2022, 106, 31-34.
2. J. Li; S. K. Chou; W. M. Yang; Z. W. Li. Experimental and numerical study of the wall temperature of cylindrical micro combustors. *Journal of Micromechanics and Microengineering*. 2009, 19, Pages.
3. J. Warnatz; M. D. Allendorf; R. J. Kee; M. E. Coltrin. A model of elementary chemistry and fluid mechanics in the combustion of hydrogen on platinum surfaces. *Combustion and Flame*. 1994, 96, 393-406.
4. L. C. Chia; B. Feng. The development of a micropower (micro-thermophotovoltaic) device. *Journal of Power Sources*. 2007, 165, 455-480.
5. S. K. Chou; W. M. Yang; K. J. Chua; J. Li; K. L. Zhang. Development of micro power generators - A review. *Applied Energy*. 2011, 88, 1-16.
6. W. R. Chan; P. Bermel; R. C. N. Pilawa-Podgurski; et al., in: *Proceedings of the National Academy of Sciences*, Washington, 2013, 110, 5309–5314.