

Análisis y Simulación de Mono Celdas de Combustible Tipo PEM

Dr. Hernández-Guerrero Abel¹, Sánchez-Rodríguez Evelin Jazmín Guadalupe¹, Méndez-García Daniel Antonio¹, Colín-Cervantes Emilio Daniel¹

¹ División de Ingenierías Campus Irapuato–Salamanca

Resumen

Las placas bipolares tienen un papel importante en el desempeño de la Celda de Combustible de Tipo de Membrana de Intercambio Protónico (PEMFC) por su efecto en la distribución los gases reactantes, la presión, la densidad de corriente, la temperatura, la gestión del calor y del agua generados durante la operación. En este artículo, se proponen cuatro diseños del campo de flujo y se comparan con una configuración de serpentín utilizando el método de dinámica de fluidos computacional (Computational Fluid Dynamics, CFD por sus siglas en inglés) para resolver el conjunto de ecuaciones de continuidad, momento, energía, especies y electroquímica con el algoritmo SIMPLE como enfoque de solución. Los resultados obtenidos revelan que con un voltaje de operación de 0.4 V las geometrías propuestas mejoran la densidad de potencia de 22 – 40 %. Además, logran disminuir el agua en el cátodo en un 53 %. En última instancia, los resultados indicaron que el campo de flujo de insecto tiene un mejor rendimiento en comparación con la geometría convencional.

Palabras clave: energía; PEMFC; placas bipolares; CFD.

Introducción

Actualmente, la generación de energía presenta tres problemas de gran magnitud: el agotamiento de los recursos no renovables, la contaminación ambiental y la centralización de la producción de energía. Durante años, ha sido generada a partir del uso de combustibles fósiles, mismos que ocasionan grandes daños al medio ambiente. Estos son quemados para liberar energía en forma de calor que a su vez liberan sustancias como el dióxido de carbono (CO₂) y otros gases de efecto invernadero que afectan directamente a la atmósfera y al planeta acelerando el calentamiento global y contribuyendo al cambio climático. La demanda y el consumo del petróleo ha derivado múltiples situaciones preocupantes tanto para el medio ambiente como para los seres humanos, como el aumento en las emisiones de gases a la atmósfera, el calentamiento global, las lluvias ácidas, el efecto invernadero, entre otras [1].

Debido a la creciente preocupación por el agotamiento de los recursos energéticos derivados del petróleo y el cambio climático, las tecnologías relacionadas a las celdas de combustible han recibido mucha atención en los últimos años por su alta eficiencia y sus bajas emisiones.

Las pilas de combustible, que se clasifican según el electrolito empleado (Tabla 1), son dispositivos electroquímicos que convierten directamente la energía química almacenada en combustibles (como el hidrógeno) en energía eléctrica. Su eficiencia puede alcanzar hasta el 60 % en la conversión de energía eléctrica y, en general, el 80 % en la cogeneración de energía eléctrica y térmica con una reducción mayor al

90 % de los principales contaminantes generados por otros combustibles [2]. En la Figura 1 se presenta una gráfica del consumo mundial de energía desde 1985 con un pronóstico a 2030. Así también se muestran el consumo mundial de cada sector desde 2005 (véase Figura 2).

Consumo mundial de energía

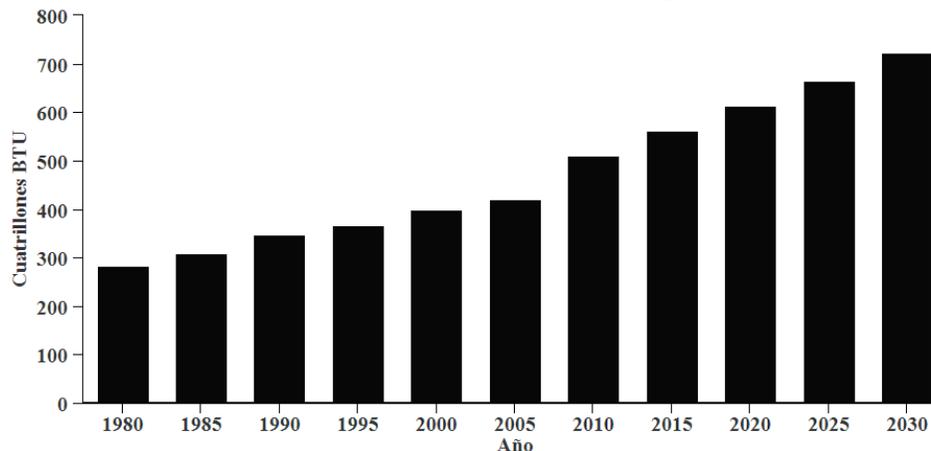


Figura 1. Consumo mundial de energía [3].

Consumo de energía por sector

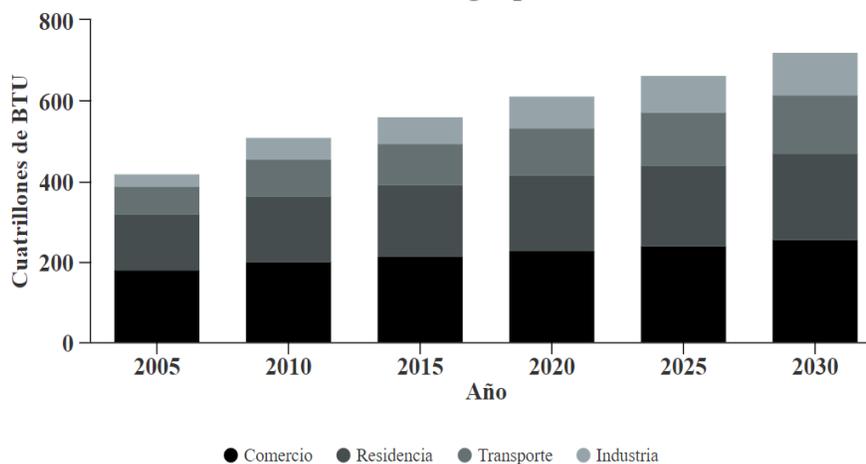


Figura 2. Consumo de energía por los sectores [3].

Ha surgido un fuerte interés en el desarrollo e implementación de las Celdas de Combustible de Tipo de Membrana de Intercambio Protónico (Proton Exchange Membrane Fuel Cell, PEMFC por sus siglas en inglés) en diversas aplicaciones como motor en los automóviles o como generadores eléctricos, entre otras [4-6]. Tienen grandes ventajas respecto a otras celdas de combustible, debido a que cuentan con una vida útil más larga y brindan una alta densidad de potencia. Estas son algunas de las principales razones de su demanda en la industria automotriz, aplicaciones portátiles y estacionarias.

Tabla 1. Tipos de celdas de combustible y sus principales características de operación

Parámetro	AFC	PAFC	PEMFC	MCFC	SOFC
Temperatura	60 – 90	160 – 220	50 – 80	600 – 700	800 – 1000
Densidad de potencia	100 – 200	200	350	100	240
Eficiencia	40 – 60	55	45 – 60	60 – 65	55 – 65
Tiempo de vida	> 10,000	> 40,000	> 40,000	> 40,000	> 40,000
Área de aplicación	Espacial, móvil	Distribución	Portable, móvil y estacionaria	Distribución y generación	Base de carga, generación

Las investigaciones se han dirigido a la parte experimental para mejorar el desempeño general de las PEMFC y así incrementar su comercialización. Los objetivos de estas investigaciones son aumentar la corriente y el voltaje generados con la menor cantidad posible de hidrógeno suministrado. Sin embargo, realizar estos experimentos pueden significar ciertos costos, por ello se siguen llevando a cabo los análisis numéricos para optimizar los factores de las celdas de combustible que podrían hacer que la parte experimental no brinde los resultados esperados.

Hay múltiples factores que determinan el rendimiento de cualquier tipo de celda de combustible. Algunos de estos, para una mayor comprensión, se clasifican en condiciones de funcionamiento como el transporte de masas, la cinética electroquímica, la gestión del agua, la presión de sujeción y las fugas de gas hidrógeno. Si se habla de un stack, la eficiencia general de este depende del rendimiento de cada una de las celdas individuales involucradas. En la práctica, cada celda recibe un caudal de hidrógeno diferente en algún instante dado y esto se debe, generalmente, a la geometría de la placa bipolar (monopolar) de cada celda. Las placas monopolares (placas bipolares en el caso de un stack) mal diseñadas ocasionan desde una distribución no uniforme del gas, puntos calientes localizados en el electrolito, densidad de corriente inestable, hasta la destrucción completa del dispositivo por una mala gestión del agua [7].

En este trabajo se realiza el estudio de diferentes geometrías de las placas monopolares con el objetivo de optimizar el rendimiento de la celda de combustible a través del diseño adecuado del campo de flujo.

Diseño de las placas monopolares

La implementación de una celda de combustible en diferentes aplicaciones requiere de placas monopolares que puedan cumplir con los criterios de rendimiento. Además, estas placas deben contar con ciertas características como una alta conductividad eléctrica para permitir el paso de la corriente eléctrica, una alta impermeabilidad para evitar que los reactivos sean absorbidos y esto afecte la reacción química que tiene lugar en la celda. Es importante que presenten una alta resistencia estructural porque son la parte sólida de la celda y una alta resistencia a la corrosión por la reacción química antes mencionada [8].

El diseño de las placas monopolares (bipolares) es fundamental en el rendimiento de la celda de combustible debido a que son las encargadas de la distribución y alimentación de los gases reactivos y de los productos

de la reacción. Es decir, el rendimiento térmico e hídrico de las celdas de combustible depende en gran medida de estas placas.

Las geometrías propuestas buscan cumplir con algunas de las características más importantes para que el diseño del campo de flujo (canales) sea *ideal*. Se espera tener una distribución uniforme de los gases reactivos, facilidad para eliminar el agua que se produce durante la operación de la celda, una baja caída de presión a lo largo del campo de flujo y una densidad de corriente mayor que la de la geometría convencional. Las geometrías propuestas se observan en las Figuras 3 – 6.



Figura 3. Geometría espiral-cuadrada.

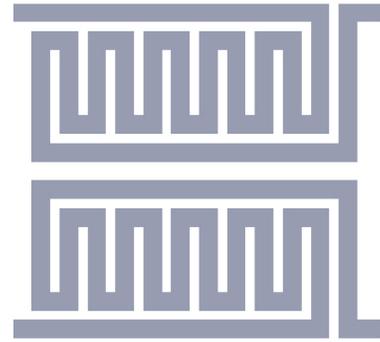


Figura 5. Geometría insecto.

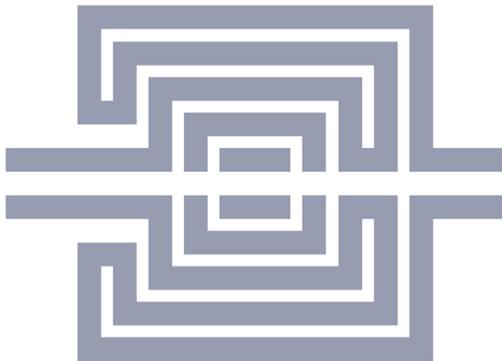


Figura 4. Geometría espiral-cuadrada con centro interdigitado.

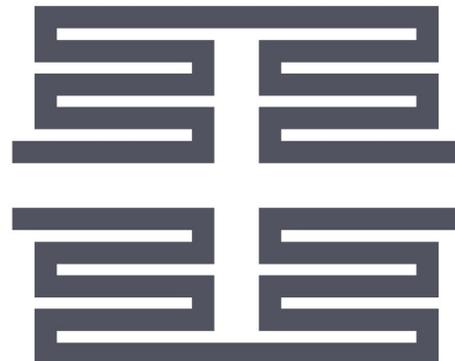


Figura 6. Geometría inspirada en pulmones.

Parámetros de diseño

Los parámetros de diseño de los componentes se muestran en la Tabla 2. Para entender mejor estas dimensiones, en la Figura 7 se presenta una visualización del ensamblaje. Estos parámetros se utilizaron en cada una de las geometrías propuestas para realizar la validación.

Tabla 2. Parámetros de diseño utilizados

Descripción	Unidades	Valor
Ancho de la celda	mm	20.00
Largo de la celda	mm	20.00
Espesor de canal de flujo	mm	1.000
Espesor de capa de difusión de gas (GDL)	mm	0.500
Espesor de catalizador (CL)	mm	0.025
Espesor de colector de corriente	mm	1.500
Espesor de membrana	mm	0.128

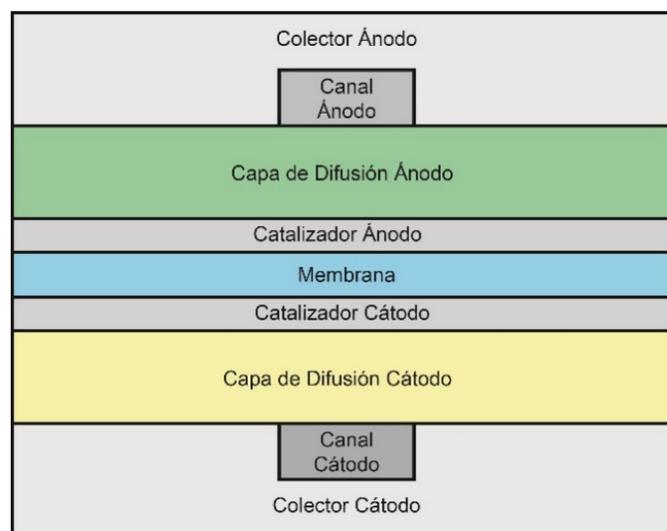


Figura 7. Vista de ensamblaje de la PEMFC.

Definición del modelo

Para realizar el análisis numérico de una celda de combustible, es necesario establecer y conocer las suposiciones, las ecuaciones gobernantes, las condiciones de operación y los parámetros o propiedades electroquímicas utilizadas para llevar a cabo el modelo.

Suposiciones

- Los gases reactantes tienen propiedades de gases ideales.
- El flujo es incompresible.
- En los canales de distribución de gases se tiene flujo laminar.
- La capa de difusión de gas (GDL) y el catalizador son homogéneos e isotrópicos.

Ecuaciones gobernantes

- Ecuación de conservación de masa

El flujo en los canales de la celda de combustible depende de la geometría. La ecuación (1) es la conservación de la masa en una celda de combustible y es válida para todos los procesos, incluidos el flujo, la difusión, el cambio de fase y las reacciones electroquímicas.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = S_m \quad (1)$$

donde ρ es la densidad $\left(\frac{kg}{m^3}\right)$, \vec{u} es el vector velocidad $\left(\frac{m}{s}\right)$, ∇ es el operador $\frac{d}{dx} + \frac{d}{dy} + \frac{d}{dz}$ y S_m son las fuentes adicionales de masa.

- Ecuación de conservación de momento

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} \vec{u} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\mu_{mix} \nabla \vec{u}) + S_M \quad (2)$$

donde p es la presión del fluido (Pa), μ_{mix} es la viscosidad media de la mezcla $\left(\frac{kg}{m \cdot s}\right)$ y S_M son las fuerzas externas.

- Ecuación de conservación de energía

Las propiedades de los materiales y las velocidades de reacción son en función de la temperatura. Por lo tanto, es importante tener en cuenta las variaciones de temperatura dentro de la celda resolviendo la ecuación de conservación de la energía.

$$(\rho c_p)_{eff} \frac{\partial T}{\partial t} + (\rho c_p)_{eff} (\vec{u} \cdot \nabla T) = \nabla \cdot (k_{eff} \nabla T) + S_e \quad (3)$$

donde c_p es el calor específico promedio de la mezcla $\left(\frac{J}{kg \cdot K}\right)$, T es la temperatura (K), k es la conductividad térmica $\left(\frac{W}{m \cdot K}\right)$ y S_e es la fuente de energía.

- Ecuación de conservación de especies

Representa la conservación de masa de cada uno de los gases reactantes.

$$\frac{\partial (\varepsilon \rho x_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{u} \varepsilon \rho x_i) = (\nabla \cdot \rho D_i^{eff} \nabla x_i) + S_{s,i} \quad (4)$$

donde x_i es la fracción másica del gas, D^{eff} es función de porosidad y $S_{s,i}$ son las especies adicionales.

- Ecuación de conservación de carga

$$\nabla \cdot (\kappa_s^{eff} \nabla \phi_s) = S_{\phi_s} \quad \rightarrow \text{ electrones} \quad (5)$$

$$\nabla \cdot (\kappa_m^{eff} \nabla \phi_m) = S_{\phi_m} \quad \rightarrow \text{ protones} \quad (6)$$

donde κ_s^{eff} , κ_m^{eff} son la conductividad eléctrica en fase sólida y fase electrolito ($\frac{S}{cm}$), ϕ_s , ϕ_m son el potencial de fase sólida y electrolito (V) y S_ϕ es la corriente volumétrica transferida.

Condiciones de operación

- Gases 100 % puros de hidrógeno (H₂) y oxígeno (O₂).
- Humedad relativa del 100 % a la entrada de los canales.
- Temperatura constante de 343 K en toda la celda.
- Presión de operación de 2 atm.
- Razón de flujo estequiométrico del ánodo de 1.5.
- Razón de flujo estequiométrico del cátodo de 2.0.
- Voltaje de la celda a circuito abierto de 0.95 V.

Parámetros electroquímicos

En las Tablas 3 – 5 se presentan los parámetros electroquímicos de los componentes de la celda, de los electrodos y de los gases reactantes.

Tabla 3. Parámetros electroquímicos de los componentes

Parámetro	Unidades	Valor
Conductividad eléctrica del colector	$\frac{1}{\Omega m}$	125e ⁷
Conductividad eléctrica de la capa de difusión	$\frac{1}{\Omega m}$	53.00
Conductividad eléctrica del catalizador	$\frac{1}{\Omega m}$	53.00
Porosidad de la capa de difusión	-	0.400
Porosidad del catalizador	-	0.112

Tabla 4. Parámetros de los electrodos

Parámetro	Unidades	Valor
Exponente de concentración en el ánodo		0.5
Exponente de concentración en el cátodo		1.0
Coefficiente de intercambio del ánodo		2.0
Coefficiente de intercambio del cátodo	-	1.0
Densidad de corriente de referencia en el ánodo	A/cm ²	25e ³
Densidad de corriente de referencia en el cátodo	A/cm ²	7.5

Tabla 5. *Parámetros de los gases*

Parámetro	Unidades	Valor
Difusividad de referencia del hidrógeno, H ₂	m ² /s	1.1x10 ⁻⁴
Difusividad de referencia del oxígeno, O ₂	m ² /s	3.2x10 ⁻⁵
Difusividad de referencia del agua, H ₂ O	m ² /s	7.35x10 ⁻⁵
Difusividad de referencia del nitrógeno, N ₂	m ² /s	8x10 ⁻⁵

Resultados

Caída de presión

Los contornos de presión en los canales del ánodo y del cátodo muestran que la presión máxima será en la salida de los canales debido a las condiciones de operación de la celda de combustible. La geometría espiral-cuadrada arrojó caídas de presión, ΔP , en el ánodo y el cátodo de 5.80 Pa y 8.87 Pa, respectivamente (Figuras 8a, 9a). La geometría espiral-cuadrada con centro interdigitado, dio una caída de presión de 14.23 Pa en el ánodo y una caída de presión del cátodo de 9.35 Pa, siendo ambas considerablemente mayor a las obtenidas en la geometría anterior (Figuras 8b, 9b). Por su parte, con la geometría insecto se obtuvieron valores de 10.20 Pa y 13.77 Pa, valores dentro del rango de los anteriores resultados obtenidos (Figuras 8c, 9c). La última geometría logró mejorar las caídas de presión obtenidas con las geometrías espiral-cuadrada en el lado del ánodo e insecto en ambos electrodos con valores 7.62 Pa y 10.33 Pa (Figuras 8d, 9d). En el serpiente los valores fueron de 7.39 Pa y 5.39 Pa en el ánodo y cátodo, respectivamente.

Fracciones másicas de gases

En los canales la geometría espiral-cuadrada arrojó valores de 0.44 y 0.64 para el hidrógeno y agua en el ánodo y de 0.91 y 0.38 en el cátodo para el oxígeno y agua. Mientras que en las capas de difusión se obtuvieron resultados de 0.44 (hidrógeno), 0.64 (agua), 0.91 (oxígeno) y 0.67 (agua). Hubo un aumento en la generación de agua a la salida del 76 %. La geometría espiral-cuadrada con centro interdigitado en los canales dio resultados de 0.38 y 0.47 para el hidrógeno y agua en el ánodo (Figuras 20, 21) y de 0.91 y 0.30 en el cátodo para el oxígeno y agua. En las capas de difusión dio valores de 0.38 (hidrógeno), 0.47 (agua en ánodo), 0.91 (oxígeno) y 0.27 (agua en cátodo). Con esta geometría se mejoró a generación de agua con una reducción de agua del 10 %. En la tercera geometría, insecto, se obtuvieron valores de 0.40 para el hidrógeno, 0.56 de agua (ánodo), 0.87 de oxígeno y de 0.23 de agua (cátodo). Mientras que en las capas de difusión los resultados fueron 0.40 y 0.56 de hidrógeno y agua en el ánodo, en el lado del cátodo se tuvo 0.87 de oxígeno y 0.28 de agua. En el tratamiento del agua se tuvo un aumento del 21% en el cátodo. En la última geometría se tuvo una fracción másica de 0.72 para el agua en el ánodo y de 0.52 en el cátodo disminuyendo en un 13 % la fracción másica del agua en el cátodo.

En la geometría convencional, se obtuvieron valores de 0.49 de agua en el ánodo y de 0.60 de agua en el cátodo. Las fracciones másicas del agua en las capas de difusión, GDL, tanto del ánodo como del cátodo, se observan en las Figuras 10, 11.

Densidad de corriente y de potencia

Para obtener las curvas de polarización se varió el voltaje de 0.1 a 1 V para obtener, primeramente, las densidades de corriente de cada geometría. Posteriormente, se obtuvieron los valores de la densidad de potencia. Los resultados arrojaron que la densidad de potencia máxima para las cuatro geometrías (incluso la convencional) ocurre al suministrarle 0.4 V.

El serpentín dio una densidad de potencia máxima de 0.28 W/cm². Posteriormente, con la Geometría I se tuvo un valor de 0.35 W/cm², esta geometría mejoró un 23 % la obtenida con la geometría convencional. Por su parte, la Geometría II otorgó 0.37 W/cm² mejorando en un 32 % al valor del serpentín. La tercera geometría resultó con una mejora del 41 % con un valor de 0.40 W/cm². Finalmente, la Geometría IV brindó una densidad de potencia de 0.38 W/cm² mejorando así en un 34 %. Las curvas de polarización muestran que la Geometría III proporciona la mayor densidad de potencia de todas las geometrías propuestas. Véase la Figura 12.

Conclusiones

En este artículo, se estudia el diseño de cuatro campos de flujo diferentes para las placas monopolares de una Celda de Combustible de Tipo de Membrana de Intercambio Protónico (PEMFC). Los resultados de este estudio revelan que el campo de flujo de la Geometría III tiene un mejor rendimiento en cuanto a la densidad de potencia máxima y al tratamiento del agua producida durante la operación. Además, algunos resultados destacados se presentan de la siguiente manera:

- Las caídas de presión en las cuatro geometrías fueron menores en comparación con el serpentín. Los incrementos de menor magnitud los tuvieron las geometrías espiral-cuadrada y la pulmonar tanto en el ánodo como en el cátodo.
- La cantidad de agua fue menor en dos geometrías para el lado del ánodo. La geometría espiral-cuadrada con centro interdigitado dio una mejoría de 4 %, la geometría insecto brindó la mayor reducción de fracción másica de agua con un 53 %.
- Para el lado del cátodo, donde se genera la mayor cantidad de agua durante la operación de la celda, se obtuvo una reducción en tres de las cuatro geometrías propuestas: cuadrada-espiral con centro interdigitado, insecto y pulmonar. La primera disminuyó la cantidad de agua en un 55 %. La implementación del centro interdigitado beneficio en un 53 %. Finalmente, la última logró un 13 % de mejora en el tratamiento del agua.

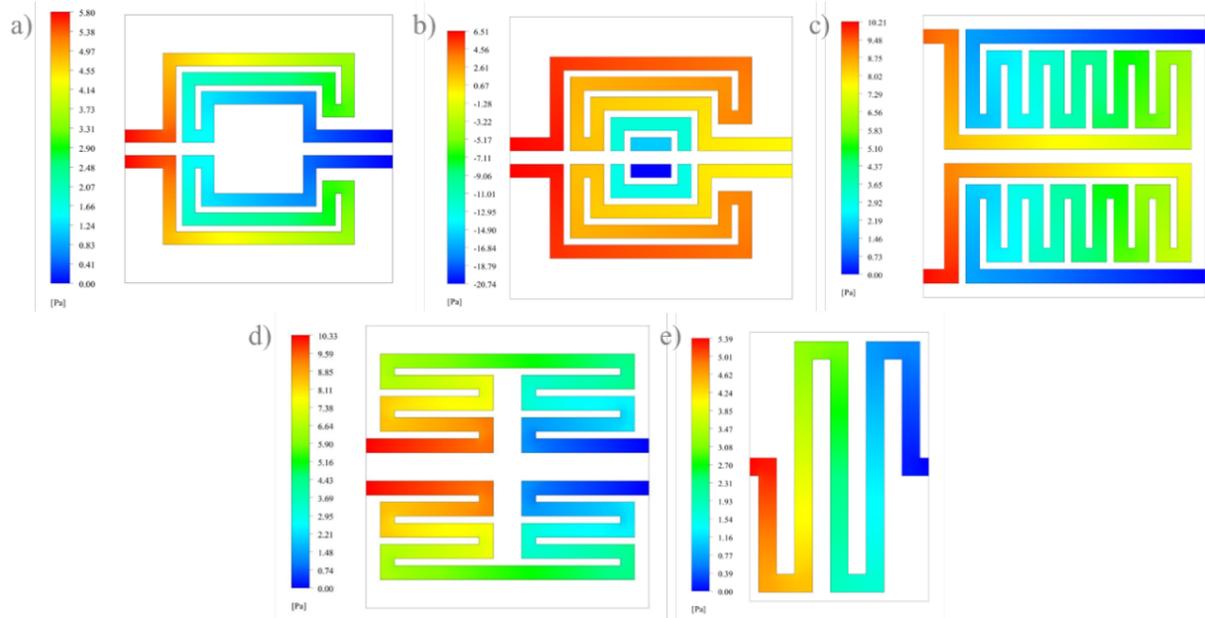


Figura 8. Presión en el ánodo a) espiral-cuadrada, b) espiral-cuadrada centro interdigitado, c) insecto, d) pulmonar y e) serpentin.

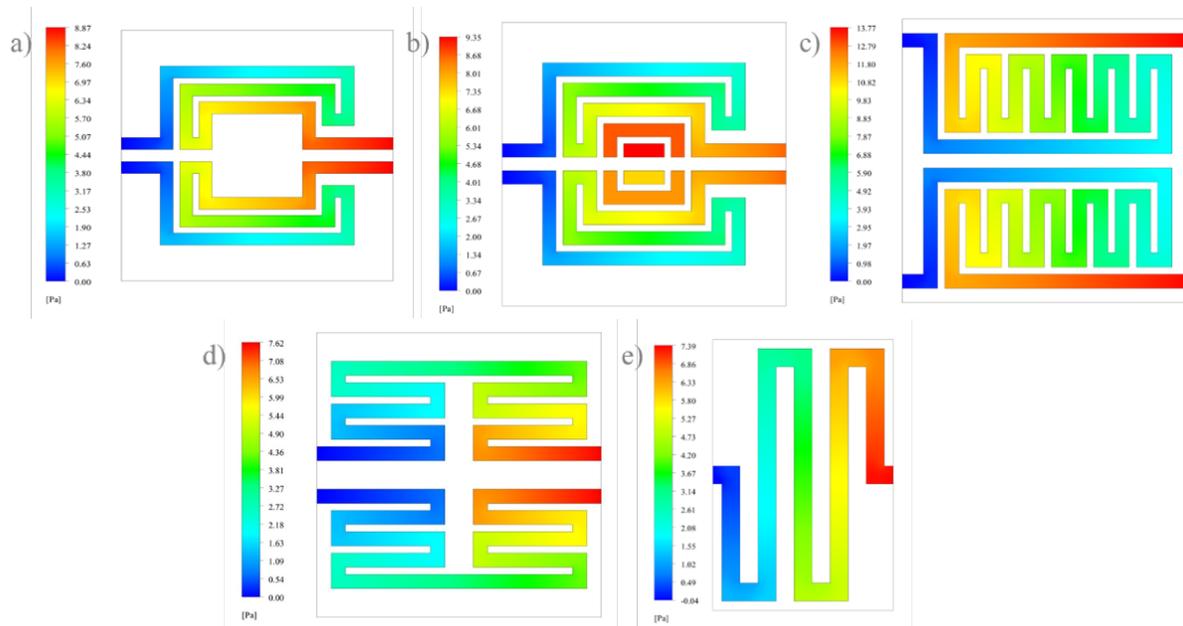


Figura 9. Presión en el cátodo a) espiral-cuadrada, b) espiral-cuadrada centro interdigitado, c) insecto, d) pulmonar y e) serpentin.

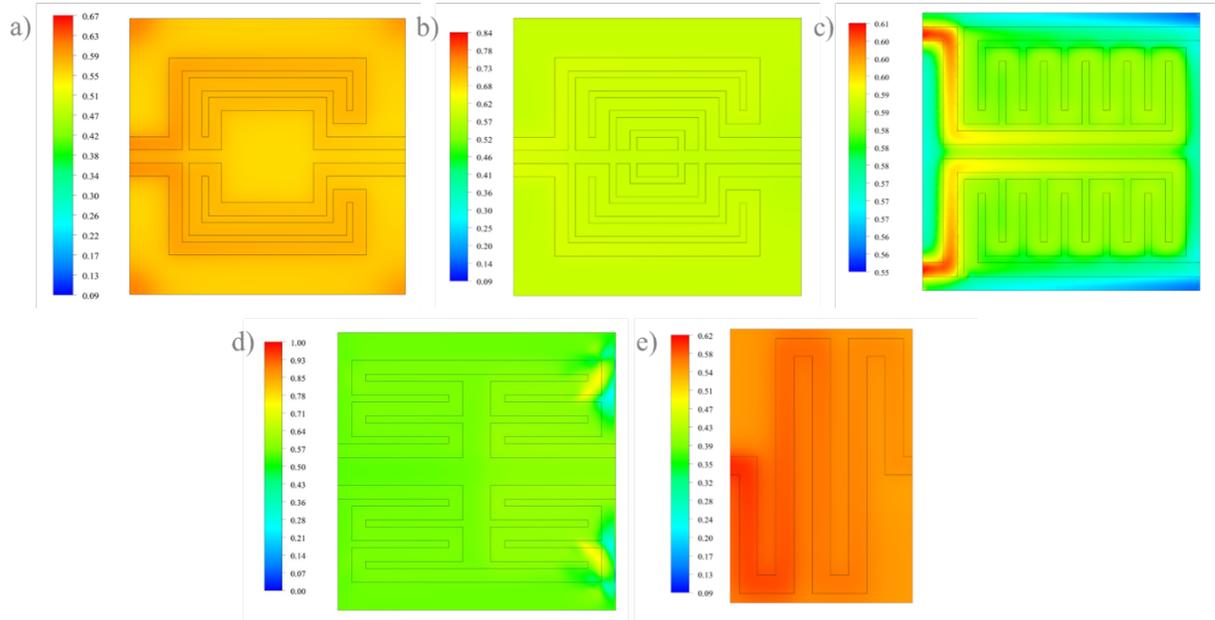


Figura 10. Fracción másica en GDL ánodo a) Espiral-cuadrada, b) Espiral-cuadrada centro interdigitado, c) insecto, d) pulmonar y e) serpentin.

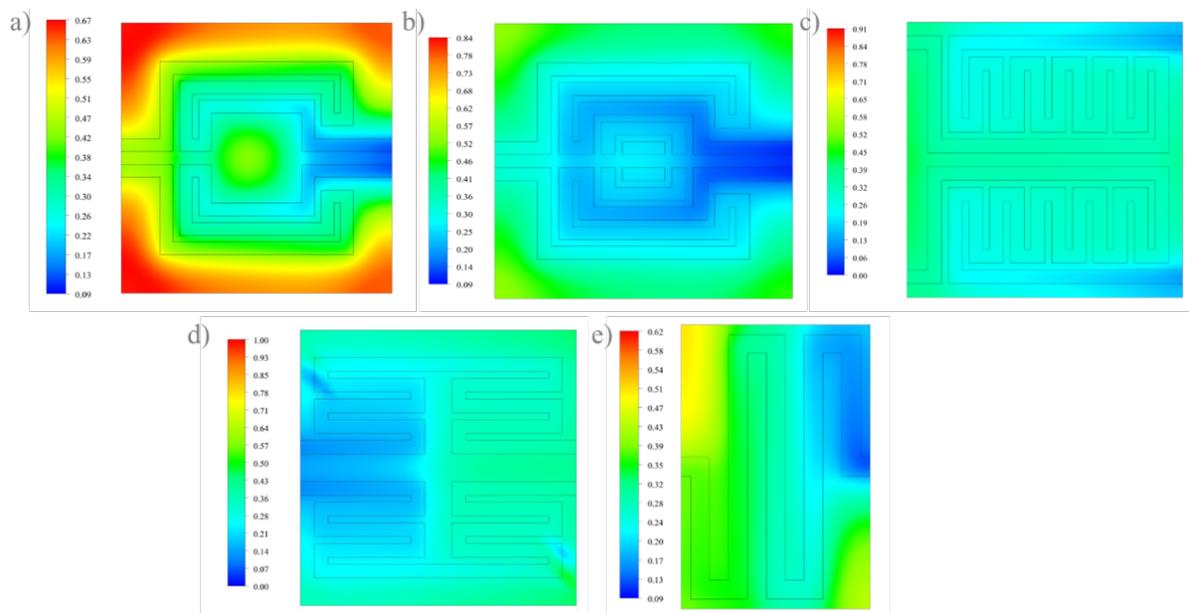


Figura 11. Fracción másica en GDL cátodo a) espiral-cuadrada, b) espiral-cuadrada centro interdigitado, c) insecto, d) pulmonar y e) serpentin.

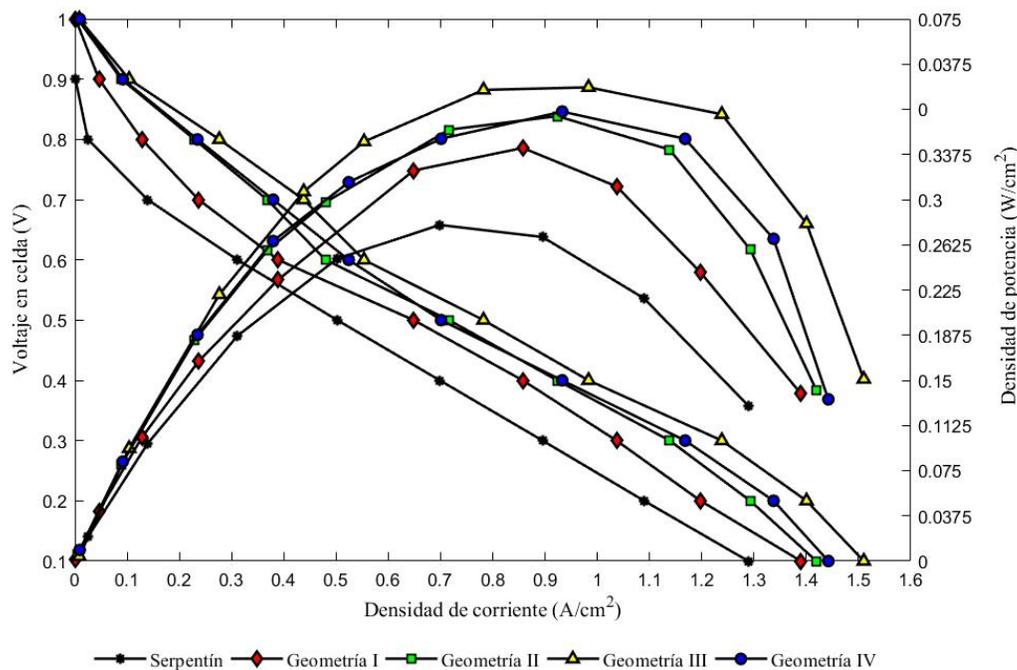


Figura 12. Curva de polarización.

Agradecimientos

Los autores agradecen a la Universidad de Guanajuato por la creación de programas de esta magnitud que permiten a los estudiantes desarrollar los conocimientos adquiridos durante su formación. Y agradecen al asesor, Dr. Abel Hernández Guerrero, por la confianza para llevar a cabo este proyecto de suma importancia para el futuro de la generación de energía a través de fuentes amigables con el medio ambiente.

Referencias

- [1] Statistical Review of World Energy 2010, U. S. Energy Information Administration, 2010.
- [2] Fierro, J. G. Celdas de combustible. Instituto de Catálisis y Petroleoquímica, CSIC, Madrid.
- [3] Li, Xianguo. Principles of Fuel Cells. 2006. New York: Taylor & Francis Group.
- [4] Preuster, P., A. Alekseev, and P. Wasserscheid, Hydrogen Storage Technologies for Future Energy Systems. Annual Review of Chemical and Biomolecular Engineering, 2017. 8(1): p. 445-471.
- [5] M. Winter and R. J. Brodd, "What Are Batteries, Fuel Cells, and Supercapacitors?" Chemical Reviews, vol. 104, no. 10, pp. 4245–4270, Oct. 2004, DOI: 10.1021/cr020730k.
- [6] J. M. Andújar and F. Segura, "Fuel cells: History and updating. A walk along two centuries," Renewable and Sustainable Energy Reviews, vol. 13, no. 9, pp. 2309–2322, Dec. 2009, DOI: 10.1016/j.rser.2009.03.015.
- [7] K. Kordesch and J. Oliveira. Fuel cells: the present state of the technology and future applications, with special consideration of the alkaline hydrogen/oxygen (air) systems. International Journal of Hydrogen Energy, vol. 13, no. 7, pp. 411–427, 1988, DOI: 10.1016/0360-3199(88)90127-9.
- [8] Larminie J., Dicks A. Fuel Cell Systems Explained. Second Edition. Wiley (2003).