

ANÁLISIS DE LA VARIACIÓN DE LOS PRINCIPALES PARÁMETROS DE OPERACIÓN EN UNA PEMFC MODELADA TRIDIMENSIONALMENTE

Chávez- Alfaro Sandra Eloisa¹ y Hernández- Guerrero Abel²

RESUMEN

Las celdas de combustible son una de las opciones para la producción de energía eléctrica limpia; este trabajo se enfoca en el modelo numérico de una celda de combustible de membrana de intercambio protónico. Una celda de combustible es un dispositivo electroquímico que transforma directamente la energía presente en una reacción química en energía eléctrica, este tipo de dispositivo prácticamente no tiene emisiones dañinas al medioambiente y son muy eficientes. Sus desventajas se centran en el almacenamiento de hidrógeno y su rentabilidad.

El objetivo de este análisis fue determinar cuáles son la temperatura de operación y el porcentaje de humedad relativa óptima para el funcionamiento de una PEMFC que reduzca las principales pérdidas en el sistema.

PALABRAS CLAVE

PEMFC, Celdas de combustible de intercambio protónico, Humedad relativa, Temperatura de operación, Curvas de polarización.

INTRODUCCIÓN

Los recursos energéticos mundiales son principalmente los combustibles fósiles, los cuales son recursos no renovables y su uso conlleva a serios problemas ambientales que afectan a la salud de la población mundial. Estos problemas impulsan la búsqueda de nuevas alternativas para solucionar las necesidades energéticas de una forma amigable con el medio ambiente.

Las celdas de combustible tipo PEM (Proton exchange membrane) como fuente de producción de energía eléctrica pueden aplicarse en el sector automotriz. Este dispositivo electroquímico

1 Licenciatura en ingeniería mecánica, División de Ingenierías Campus Irapuato-Salamanca, Carretera Salamanca - Valle de Santiago km. 3.5 + 1.8, Comunidad de Palo Blanco, C.P: 36885, Guanajuato, Salamanca, Teléfono (464) 6479940.

2 Hernández- Guerrero Abel, Universidad de Guanajuato, División de Ingenierías Campus Irapuato-Salamanca, Departamento de Ingeniería mecánica, Carretera Salamanca - Valle de Santiago km. 3.5 + 1.8 Comunidad de Palo Blanco, C.P: 36885, Guanajuato, Salamanca, Teléfono (464) 6479940-2382; abel@ugto.mx

transforma directamente la energía química de una reacción óxido- reducción en energía eléctrica. La celda de combustible tipo PEM utiliza como gases reactantes al oxígeno e hidrógeno. Los residuos producidos por estos dispositivos son agua y calor, prácticamente no tiene emisiones dañinas al medioambiente y son muy eficientes.

Una PEMFC tiene una estructura sencilla (ver Figura 1). Su funcionamiento es el siguiente: en el lado del ánodo el hidrógeno es suministrado y pasa por canales de flujo a través de la capa de difusión (gas diffusion layer, GDL) hacia un catalizador (catalyst layer, CL).

El catalizador reacciona con las moléculas de hidrógeno H_2 separándolas en iones H^+ y electrones, los iones H^+ pasan a través de la membrana, mientras los electrones se hacen pasar por un circuito externo, generando una corriente eléctrica.

En el lado del cátodo, reaccionan los iones H^+ , los electrones y el oxígeno O_2 suministrado produciendo agua. Las reacciones químicas que se llevan a cabo son:

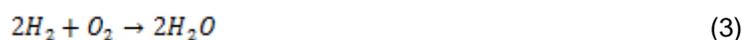
En el ánodo:



En el cátodo:



Reacción global:



(Larminie J., 2003:2)

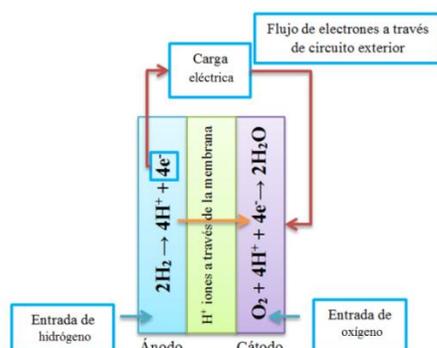


Figura 1. Estructura de una PEMFC.

Tabla 1. Nomenclatura

Símbolos latinos		Símbolos griegos	
A	Área del electrodo (cm^2)	α	Coefficiente de transferencia de carga
D_i	Difusividad másica de la especie i (cm^2s^{-1})	β	Permeabilidad (m^2)
d	Diámetro (mm)	ϵ	Porosidad en el medio
F	Constante de Faraday ($97487 C mol^{-1}$)	Φ_k	Potencial eléctrico en la interface k (V)
h	Altura (mm)	γ	Coefficiente de concentración
i_{ref}	Densidad de corriente de referencia ($A cm^{-2}$)	η	Sobre-potencial (V)
$J_{k ref}$	Densidad de corriente de referencia ($A m^{-3}$)	λ	Contenido de agua
J_i	Flujo másico de difusión de la especie i	μ	Viscosidad Dinámica ($kg s m^{-2}$)
L_{cel}	Longitud de la celda (mm)	θ	Flujo volumétrico ($cm^3 s^{-1}$)
M_i	Peso molecular de la especie i ($kg kmol^{-1}$)	σ	Conductividad eléctrica ($\Omega^{-1}m^{-1}$)
P	Presión total (Pa)	ρ	Densidad ($kg m^{-3}$)
P_0	Presión de referencia (101325 Pa)	ξ	Dirección cartesiana x, y, z.
P_{cel}	Presión de operación de la celda (Pa)	ζ	Relación estequiometría
R	Constante universal de los gases ($8.314 Jkm^{-1}K^{-1}$)		

RH _a	Humedad relativa para el combustible a la entrada	Θd	Coficiente de arrastre electro-osmótico
RH _c	Humedad relativa para el aire a la entrada		
R _k	Transferencia de densidad de corriente	Superíndices/Subíndices	
r	Radio (mm)	a	Ánodo
S	Termino fuente de las ecuaciones de transporte	c	Cátodo
s	Espesor del colector	cel	Celda
T	Temperatura (K)	ch	Canal
T ₀	Temperatura de referencia (300K)	cl	Catalizador
t	Espesor (mm)	gdl	Capa de difusión
\vec{V}	Vector de velocidad (ms ⁻¹)	col	Colector
V	Voltaje de la celda (V)	in	Entrada
V _{oc}	Voltaje de circuito abierto (V)	k	Ánodo o cátodo
w	Ancho (mm)	mem	Membrana
X _i	Fracción molar de la especie i	ref	Valor de referencia
Y _i	Fracción de masa de la especie i	sol	Sólido

El correcto desempeño de una celda de combustible tipo PEM está ligado a varios factores algunos, de los cuales los más importantes son: la temperatura de operación, el material de la membrana, la humedad de la membrana, entre otros. El objetivo de este trabajo es analizar el efecto que tiene la variación de la humedad relativa y temperatura de operación presentes en la celda de combustible,

Métodos y materiales

El análisis se dividió en dos secciones para su mejor manejo, la primera sección fue para el estudio del comportamiento de la temperatura y la segunda sección para el estudio del comportamiento al variar la humedad presente de los gases al entrar al sistema, en los cuales se propusieron casos de estudio y se realizó la simulación de cada caso en software especializado.

Las suposiciones realizadas para el modelo numérico son las siguientes:

1. Mezcla de gases ideales.
2. Flujo incompresible y laminar con gradientes de presión y números de Reynolds pequeños.
3. Electrodo, capas de catalizador y membrana, isotrópicos y homogéneos.
4. Temperatura constante en la celda.
5. Caída óhmica despreciable en los componentes de la celda.

Ecuaciones gobernantes

Razón de flujo estequiométrico:

$$\zeta_c = X_{O_2, in} \vartheta_{c, in} \frac{P_c}{RT} \cdot \frac{4F}{I_{REFA}} \quad (4)$$

$$\zeta_A = X_{OH_2, in} \vartheta_{a, in} \frac{P_a}{RT} \cdot \frac{4F}{I_{REFA}} \quad (5)$$

Ecuaciones de conservación escritas en forma vectorial:

$$\frac{\partial(\varepsilon\rho)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon\rho\vec{u}) = 0 \quad (6)$$

$$\frac{\partial(\varepsilon\rho\vec{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon\rho\vec{u}\vec{u}) = -\varepsilon\nabla P + \nabla \cdot (\varepsilon\mu^{eff}\nabla\vec{u}) + S_u \quad (7)$$

$$\frac{\partial(\varepsilon c_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon\rho\vec{u}c_k) = \nabla \cdot (D_k^{eff}\nabla C_k) + S_k \quad (8)$$

$$\nabla \cdot (k_e^{eff}\nabla\phi_e) + S_\phi = 0 \quad (9)$$

Densidad de corriente local:

$$I_{avg} = \frac{1}{A} \int_A (y, z) dA \quad (10)$$

Voltaje de circuito abierto para el ánodo y cátodo respectivamente

$$v_{a,oc} = 0 \quad (11)$$

$$v_{c,oc} = 0.0025T + 0.2329 \quad (12)$$

Ecuaciones para velocidades de entrada en el ánodo y cátodo respectivamente

$$v_{a,in} = \frac{\zeta_a RT i_{ref} A_{mza}}{X_{H_2,IN} P_a 2F} \quad (13)$$

$$v_{c,in} = \frac{\zeta_c RT i_{ref} A_{mzc}}{X_{O_2,IN} P_c 2F} \quad (14)$$

(Sukee U., 2004:43)

A continuación se muestran los parámetros usados en el modelado y la geometría utilizada (ver Figura 2):

Tabla 2. Parámetros de operación

Parámetro	Símbolo	Valor
Temperatura de la celda (K)	T_{celda}	343
Presión a la entrada del ánodo (atm)	P_a	2
Presión a la entrada del cátodo (atm)	P_c	2
Razón de flujo estequiométrico del ánodo	ζ_a	1.5
Razón de flujo estequiométrico del cátodo	ζ_c	2
Fracción molar de nitrógeno/oxígeno a la entrada	$X_{N_2,in}^C / X_{O_2,in}^C$	0.79/0.21
Constante de gas (J/mol K)	R	8.314
Constante de Faraday (C/mol)	F	97487

Tabla 3. Parámetros de funcionamiento

Parámetro	Símbolo	Valor
Conductividad eléctrica del colector ($\Omega^{-1} m^{-1}$)	σ_{sol}	1.25×10^5
Conductividad eléctrica de la capa de difusión ($\Omega^{-1} m^{-1}$)	σ_{GDL}	53
Conductividad eléctrica del catalizador ($\Omega^{-1} m^{-1}$)	σ_{cat}	53

Porosidad de la capa de difusión	ϵ_{GDL}	0.4 (.78)
Porosidad del catalizador	ϵ_{CL}	0.112 (.4)
Exponente de concentración en el ánodo	γ_a	0.5
Exponente de concentración en el cátodo	γ_c	1
Coefficiente de intercambio del ánodo	α_a	2
Coefficiente de intercambio del cátodo	α_c	1
Densidad de corriente referencia en el ánodo (Am^{-3})	j_a^{ref}	1×10^9
Densidad de corriente de referencia en el cátodo (Am^{-3})	j_c^{ref}	3×10^5
Difusividad de referencia del hidrógeno H_2 (m^2s^{-1})	$D_{\text{H}_2}^0$	1.1×10^{-4}
Difusividad de referencia oxígeno O_2 (m^2s^{-1})	$D_{\text{O}_2}^0$	3.2×10^{-5}
Difusividad de referencia del agua H_2O (m^2s^{-1})	$D_{\text{H}_2\text{O}}^0$	7.35×10^{-5}
Difusividad de referencia del nitrógeno N_2 (m^2s^{-1})	$D_{\text{N}_2}^0$	8×10^{-5}

Tabla 4. Parámetros de la geometría de la PEM

Parámetro	Símbolo	Valor (mm)
Altura del colector de corriente	ht	0.9525
Altura del canal	hc	0.792
Ancho del canal	wc	0.792
Espesor de la capa de difusión	$wgdl$	0.254
Espesor del catalizador	wcl	0.01
Altura de la celda de combustible	ht	0.9525
Longitud de la celda/electrodo	L	7.112
Espesor de la membrana	wm	0.178

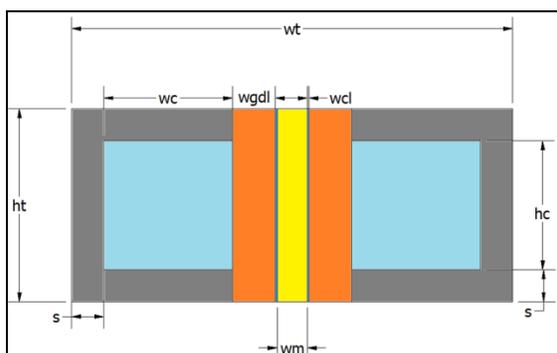


Figura 2. Estructura de una PEMFC.

RESULTADOS

La curva de polarización es un indicador de desempeño de una PEMFC, esta permite la visualización de las principales pérdidas en el sistema, las cuales son por activación, óhmicas y conservación de especies. En las siguientes figuras se muestran (ver Figura 3 y Figura 4) las curvas de polarización para las dos secciones de estudio. En la primera sección se puede apreciar que a temperaturas altas se reducen las pérdidas en el sistema, principalmente las pérdidas de activación que ocurre entre los 0 y 0.2 A/cm^2 , además se incrementa la densidad de corriente.

También se puede apreciar cómo la cantidad de vapor agua en el sistema juega un papel importante, ya que esta permite una densidad de corriente mayor y también minimiza las pérdidas por activación, las cuales ocurren entre 0 a 0.1 A/cm^2 . Se encontró que a un 100% de humedad en el sistema se tendrá el desempeño óptimo en el funcionamiento de la PEMFC.

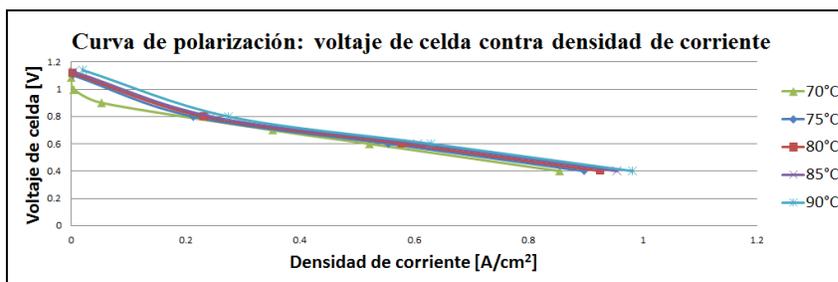


Figura 3. Curva de polarización: Voltaje de celda contra densidad de corriente con variación de temperatura de operación.

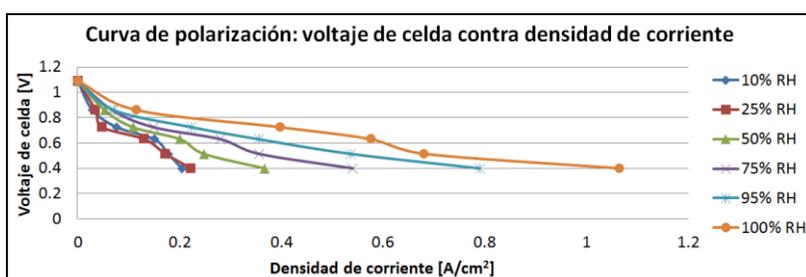


Figura 4. Curva de polarización: Voltaje de celda contra densidad de corriente con variación de humedad relativa.

CONCLUSIONES

Los factores más importantes para el desempeño de una PEMFC son la temperatura de operación y la cantidad de humedad que contiene, ambas permiten una reducción significativa de las pérdidas que se presentan en la activación del sistema y las pérdidas óhmicas, además de permitir una mayor densidad de corriente en el sistema.

Las temperaturas de operación altas aceleran las velocidades de reacción en el sistema e incrementan la densidad de corriente. En el caso de la humedad relativa, una celda con baja humedad produce bajas densidades de corriente dado que no hay suficiente electrolito para transportar los cationes de hidrógeno, lo cual causa una baja considerable en el rendimiento. Este parámetro debe manejarse con cuidado debido a que un valor de humedad elevado provocaría inundación dentro de la celda. Cuando esto pasa la cantidad excesiva de electrolito no permite distribuir de forma eficiente los gases reactantes. En este caso se encontró que para lograr el correcto funcionamiento para la celda tipo PEM requiere una humedad del 100%.

REFERENCIAS

- Kah Wai Lum, James Joseph McGuirk (2005), "Three-dimensional model of a complete polymer electrolyte membrane fuel cell – model formulation", *Journal of Power Sources*, 143 (2005),
- Larminie James, Dicks Andrew (2003). *Fuel Cell Systems Explained*, UK: Wiley Editorial.
- Sukee Um, C.Y. Wang (2004). "Three-dimensional analysis of transport and electrochemical reactions in polymer electrolyte fuel cells" en *Journal of Power Sources* 125 (2004).