



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

**PROGRAMA DE MAESTRIA Y DOCTORADO EN
INGENIERIA**

CENTRO DE INVESTIGACION EN ENERGIA

**SIMULACION DEL FENOMENO DE TRANSPORTE DE MASA
EN UNA CELDA DE COMBUSTIBLE TIPO PEM**

T E S I S

QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:

MAESTRO EN INGENIERÍA

ENERGIA – SOLAR FOTOTERMICA

P R E S E N T A

I.Q. JUAN MANUEL SIERRA GRAJEDA

TUTOR:

DR. SEBASTIAN JOSEPH PATHIYAMATTOM

2007





Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Agradecimientos

A mis Padres y Hermanos por haberme apoyado durante la realización de este trabajo.

A mi director de tesis: Dr. Sebastian Joseph Pathiyamattom por la disponibilidad y atención que tuvo conmigo durante el desarrollo de este proyecto.

A los integrantes de mi comité revisor: Dr. Sergio A. Gamboa Sánchez, Dr. Jorge Rojas Menéndez, Dr. Joel Moreira Acosta y Dr. Gonzalo González Rodríguez por el tiempo dedicado a la revisión de este trabajo y por las críticas y sugerencias que permitieron mejorarlo.

A las personas que sin ser miembros del comité me brindaron su apoyo y conocimiento para concluir satisfactoriamente con el presente trabajo: Dr. Arturo Keer y el Ing. Omar Rodríguez.

A mis amigos y compañeros de la UAEM y el CIE por los consejos y la ayuda que me han dado.

A CONACYT y a la UNAM por el apoyo económico brindado en la realización de este proyecto (CIAM-42146), (IN109703) y (CUenergía / 1 / 16).

Contenido

1. INTRODUCCIÓN

1.1 Aspectos Generales	1
1.2 Problemática Actual en el Desarrollo de las Celdas de Combustible	2
1.3 Justificación	3
1.4 Objetivo General	5
1.4.1 Objetivos Específicos	5
1.5 Alcance	5
1.6 Hipótesis	5

2. FUNDAMENTOS TEÓRICOS

2.1 Aspectos Termodinámicos y Electroquímicos de la Celda de Combustible	6
2.1.1 Funcionamiento Ideal	6
2.1.2 Funcionamiento Real e Irreversibilidades	8
2.1.2.1 Sobrepotencial por Activación	9
2.1.2.2 Sobrepotencial Óhmico	10
2.1.2.3 Sobrepotencial por Concentración	11
2.1.3 Energía Libre de Gibbs	14
2.1.4 Eficiencia de la Celda	15
2.2 Fenómenos de Transporte en la PEMFC	16
2.2.1 Variables de Operación en la PEMFC	17
2.2.2 Parámetros Importantes de la Celda	19

3. MODELACIÓN

3.1 Ecuaciones para flujo de Fluidos	21
3.1.1 Ecuación de Continuidad	21
3.1.2 Ecuación de Conservación de Momentum	22
3.1.3 Ecuación de Transporte de Especies	23
3.1.4 Ecuación de la Energía	23
3.2 Modelo Electroquímico	23
3.2.1 Conservación de Masa y Corriente	26

3.2.2	Formación de Agua Líquida, Transporte y sus Efectos	27
3.3	Consideraciones del Modelo	28
3.4	Solución Numérica de las Ecuaciones	29
3.5	Modelo Computacional	31
3.5.1	Geometría	31
3.5.2	Malla	33
3.5.3	Condiciones de Frontera (Gambit)	33
3.5.4	Condiciones de Frontera (Fluent)	34
3.6	Metodología	35
3.6.1	Análisis de Presión	35
3.6.2	Análisis de Humedad en los Gases	36
3.6.3	Análisis de Concentración de Oxígeno	37

4. RESULTADOS

4.1	Residuales	38
4.2	Contornos de Presión	40
4.2.1	Diseño de Serpentin Simple	40
4.2.2	Diseño de Serpentin Triple	41
4.2.3	Diseño en Espiral	42
4.2.4	Diseño con Canales Conectados	43
4.2.5	Diseño Interdigitado	44
4.3	Contornos de Humedad	45
4.3.1	Humedad Baja	45
4.3.2	Humedad Media	46
4.3.3	Humedad Alta	46
4.4	Contornos de Concentración de Oxígeno	50
4.4.1	Concentración Muy Baja	50
4.4.2	Concentración Baja	50
4.4.3	Concentración Media	50
4.4.3	Concentración Alta	50
4.5	Curvas de Polarización	55

5. CONCLUSIONES

5.1	Trabajo a Futuro	60
-----	------------------	----

Resumen

En el siguiente trabajo se presenta un estudio de dinámica de fluidos computacional sobre el fenómeno de transporte de masa que se lleva a cabo en una celda de combustible. Con tal estudio se determinaron parámetros de operación y de diseño que mejoran el desempeño de la celda. Para lograrlo, se realizó una evaluación numérica en términos de presión de cinco modelos computacionales 3D de celdas de combustible (serpentín, serpentín triple, espiral, conectado e interdigitado) y se encontró el diseño más eficiente. Asimismo, se pudo conocer la distribución de los gases en el interior de la celda, el cual es un factor importante para el análisis de transporte de masa. También, se realizó un análisis de humedad en los flujos de alimentación de la celda para determinar el porcentaje de humedad que estos deben tener para mantener condiciones adecuadas de hidratación en la membrana y obtener una máxima densidad de corriente. De la misma forma, se realizó un estudio con diferentes concentraciones de oxígeno para el flujo del cátodo.

Dentro de los resultados se obtuvieron contornos de presión para cada configuración de canales. El diseño que mostró mejores resultados fue el interdigitado. Para el análisis de humedad se obtuvieron contornos de concentración de agua y de densidad de corriente para la interfase capa catalizadora/membrana del cátodo. En este análisis se pudo estimar que no es necesario tener una concentración alta de agua en los gases de alimentación para un funcionamiento óptimo de la celda, un porcentaje de agua del 30 % para el ánodo y del 5 % para el cátodo pueden ser suficientes como para mantener a la membrana lo suficientemente hidratada y obtener una densidad de corriente considerable. Para el análisis de concentración se obtuvieron contornos de concentración de oxígeno y de densidad de corriente. Estos mostraron que una concentración más alta de este gas en el flujo de alimentación del cátodo será reflejada positivamente en las curvas de polarización de la celda.

Por último, cabe mencionar que los resultados de las simulaciones fueron comparados con datos experimentales obtenidos a condiciones estándares, logrando una adecuada correlación entre ellos.

Capítulo 1

Introducción

1.1. Aspectos Generales

Los combustibles fósiles como el carbón, el petróleo y el gas natural son las principales fuentes de energía de las cuales dependemos en gran medida. Sin embargo, en los últimos años se ha visto de una manera más clara el agotamiento de estos recursos, principalmente el petróleo. Así también es evidente que la producción, transporte y consumo de estos combustibles ha provocado fuertes problemas ambientales y políticos en muchos países durante la última década. Por ello ha surgido la necesidad de reemplazar la economía actual de combustibles fósiles por una economía de un combustible limpio; tal como lo es *"el hidrógeno"*, el cual además de ser mucho más eficiente que otros energéticos, de ser usado en las celdas de combustible reduciría grandemente los problemas de contaminación que se tienen en la actualidad. [1]

El hidrógeno se produce por diferentes métodos; gasificación de biomasa, procesos termoquímicos, foto-electroquímicos, biológicos y por medio de la electrólisis; siendo este último el método principal para obtenerlo a partir del agua. Así también se encuentra en la mayoría de los compuestos orgánicos y se produce por medio del procesamiento de otros combustibles.

Por otra parte, las celdas de combustible *"un componente dominante en la economía del hidrógeno"* generan electricidad a partir de una reacción electroquímica, combinan hidrógeno y oxígeno sin ninguna combustión. Una de sus características más relevantes es que no se agotan ni requieren carga y producirán energía en forma de electricidad y calor mientras se le provea combustible. Tales características la han convertido en una de las mejores alternativas para reemplazar a los motores de combustión interna en el sector transporte y en algunas aplicaciones portátiles.

Aún existen desafíos claves en la transición hacia una economía de hidrógeno. La necesidad de una infraestructura para la producción y distribución necesita ser estabilizada, así como el desarrollo de sistemas económicos para el almacenamiento de hidrógeno. De igual manera las celdas de combustible necesitan tener una larga vida útil, ser económicas y de gran potencia como los actuales motores de combustión interna. [2]

Las nuevas mejoras y beneficios costo-efectivos de los diseños actuales de celdas de combustible requieren de avances rápidos, incluyendo los modelos computacionales ya que el acercamiento experimental de tipo prueba y error es de cierta forma lento y costoso. El desarrollo de nuevos modelos de celdas de combustible requiere del esfuerzo de diversos grupos de científicos e ingenieros para entender los aspectos físicos y químicos involucrados en su funcionamiento; el desarrollo de algoritmos para la modelación, la optimización de diseños y lo experimental para validar resultados. [3]

Hoy en día los métodos computacionales que existen para el modelado de las celdas de combustible han mejorado lo suficiente como para poder predecir y estudiar todos los procesos y fenómenos que ocurren en estos dispositivos. Su gran precisión junto con los modelos matemáticos está impulsando rápidamente al desarrollo de nuevos diseños de celdas de combustible.

1.2. Problemática Actual en el Desarrollo de las Celdas de Combustible

Los principales obstáculos para el desarrollo/comercialización de las celdas de combustible son el alto costo de los materiales, la falta de infraestructura y sus costos de producción. Para superarlo es necesario del desarrollo de nuevas técnicas de fabricación y la optimización de sus componentes, lo cual se logrará sólo hasta que se tenga un conocimiento claro de los fundamentos físicos y químicos de los procesos involucrados en su funcionamiento.

Por ejemplo, uno de los problemas que se presentan al hacer pruebas experimentales en las celdas de combustible, es analizar detalladamente todos los procesos que ocurren en su interior cuando ésta se encuentra en operación. Hacer mediciones *in situ* resulta casi imposible debido a la naturaleza compacta de la celda y al entorno altamente reactivo bajo el cual opera; esto ha llevado a que se tenga que recurrir a otras formas de análisis para obtener información detallada sobre los procesos. Dos de éstas son la modelación y la simulación; que actualmente son técnicas con las que se ha podido tener una mejor comprensión del transporte de agua/especies, control térmico y de la optimización de los diseños de la celda.

Sin embargo, la modelación de celdas de combustible se ha convertido en un gran reto para la investigación, puesto que los fenómenos de transporte que ocurren en ella involucran flujos multi-componentes, multi-fase y multi-dimensionales, transferencia de masa y de calor junto con las reacciones electroquímicas, además de que se llevan a cabo en geometrías irregulares, incluyendo los medios porosos.

Se han realizado varios estudios para conocer la influencia de algunas variables que están directamente relacionadas con el desempeño de la celda pero se han hecho de una manera muy concreta, ya sea por la falta de infraestructura o la falta de recursos necesarios para la evaluación de estos parámetros; lo cual ha llevado a que aún se tenga un conocimiento limitado de los procesos que ocurren en ella. [3]

En la última década se han elaborado una gran variedad de modelos computacionales que van desde los modelos uni y bi-dimensionales hasta los modelos bifásicos en 3D [4]-[11]. Pero a pesar del rápido progreso en la elaboración de estos, no ha habido un gran avance en cuanto a la validación con los resultados reales; debido principalmente a la falta de datos experimentales sobre la distribución local de especies y la densidad de corriente en la celda.

Sin embargo, también hay que saber que la mayor parte de las validaciones de estos modelos han sido realizadas enfocándose al funcionamiento general de la celda, mediante las curvas I-V. Por lo que muchas publicaciones han mostrado buena aproximación entre las curvas "simuladas" y las obtenidas experimentalmente [12]-[16]; lo cual ha sido de gran ayuda para entender el desempeño de la celda pero no es suficiente para validar un modelo computacional, particularmente para los modelos 3D puesto que una gran cantidad de parámetros y procesos se encuentran involucrados en el funcionamiento de la celda.

1.3. Justificación

En la literatura se han reportado diversos estudios sobre las celdas de combustible; sin embargo, la mayoría de ellos están enfocados hacia estudios electroquímicos en los electrodos, estudios de balance de agua, desempeño de módulos operacionales, desarrollo de nuevos materiales, etc. [17]-[20]. Por lo que se ha mostrado poco interés en aspectos relacionados a la dinámica de fluidos, debido a la dificultad que se ha tenido para elaborar códigos que involucren la parte de dinámica de fluidos y la de los procesos electroquímicos, pero actualmente con los avances tecnológicos y el desarrollo de nuevos códigos ya resulta factible modelar celdas de combustible en 3D.

Dentro de los trabajos más importantes que se han realizado utilizando las técnicas de dinámica de fluidos computacional (CFD) están los de T. Berning, N. Djilali y K. W. Lum, J.J. McGuirk [21, 22] los cuales hicieron un estudio sobre el efecto de algunas variables operacionales en la celda y un análisis paramétrico en los difusores de gas, membrana y ancho de los canales. Sin embargo, estos trabajos se limitaron a modelos 3D de un solo canal; lo cual para algunos casos es aceptable por las consideraciones que se tomaron en cuenta y que además se aproximan a los resultados experimentales; pero la importancia de hacerlo actualmente para un modelo de celda completa nos llevaría a tener resultados más reales y cercanos a lo experimental; siendo esto necesario para el diseño y desarrollo de estos sistemas. Así también, los estudios paramétricos de CFD realizados sobre los componentes de la celda también han sido muy pocos [7, 22, 23]. Generalmente se han hecho sólo para un compartimiento y para el difusor del lado del cátodo; por lo que hacer un estudio detallado sobre las propiedades de cada componente es indispensable para determinar parámetros que puedan aumentar la eficiencia de la celda.

En cuanto a los estudios de CFD para las configuraciones de canales en las celdas de combustible tipo PEM (membrana intercambiadora de protones) no se ha reportado ninguno para el tipo de configuración de la celda experimental *Electrochem (EFC05-01SP)*; por lo que la elaboración de un modelo computacional 3D es requerida, ya que las pruebas experimentales necesarias para realizar un análisis completo de su funcionamiento y optimización resultan lentas y costosas. De ésta forma y con la ayuda de tal modelo se podrán realizar pruebas de simulación que se desarrollen bajo las mismas condiciones de operación de la celda *Electrochem*, incluyendo las características de sus componentes. Así también, se podrán realizar estudios de los procesos que ocurren en el interior de la celda de combustible, tales como los procesos de transporte de masa, los cuales son un factor determinante para el buen desempeño de la celda.

También, cabe mencionar que los resultados experimentales obtenidos por *E. Valenzuela* [24], serán tomados como referencia para validar los resultados de la simulación, puesto que se conocen las condiciones en que se realizaron las pruebas experimentales.

Con la ayuda de estos resultados y el uso de las técnicas de CFD, se llevará a cabo el estudio de transporte de masa en la celda de combustible, el cual consistirá en un análisis de la distribución de gases sobre la capa catalizadora, evaluando en términos de presión las configuraciones básicas de canales y determinando así la forma más adecuada de distribución de flujo en esta interfase para un desempeño óptimo de la celda.

Así también, se realizará un estudio detallado del efecto que tiene un cambio en la humedad de los gases sobre el nivel de hidratación de la membrana y la densidad de corriente que es obtenida de la celda. De la misma forma, se realizará otro estudio para conocer el efecto de utilizar diferentes concentraciones de oxígeno en el flujo de aire que es alimentado en el cátodo.

1.4. Objetivo General

Realizar un estudio de dinámica de fluidos computacional para el análisis del transporte de masa en la celda de combustible tipo PEM y con él determinar parámetros de operación y de diseño que mejoren su desempeño.

1.4.1. Objetivos Específicos

1. Evaluar en términos de presión las configuraciones básicas de canales de la celda de combustible para encontrar un diseño que distribuya uniformemente los gases sobre la capa catalizadora.
2. Determinar mediante un análisis numérico y de contornos de concentración el porcentaje de humedad que deben tener los flujos de alimentación de la celda para mantener hidratada la membrana y obtener una máxima densidad de corriente.
3. Realizar un análisis numérico para conocer el efecto que causa el uso de diferentes concentraciones de oxígeno en el flujo de aire del cátodo.

1.5. Alcance

La obtención de un diseño optimizado de canales de flujo de gases en una Celda de Combustible tipo PEM mediante el análisis realizado por simulación, de los parámetros fundamentales de transporte de masa que controlan el funcionamiento de la Celda.

1.6. Hipótesis

Las pérdidas por los efectos del transporte de masa que ocurren en la celda de combustible son reducidas utilizando un diseño apropiado de distribuidor de flujo en los platos bipolares y seleccionando adecuadamente las condiciones y variables de operación a las cuales los flujos de gas son alimentados a la celda.

Capítulo 2

Fundamentos Teóricos

2.1. Aspectos Termodinámicos y Electroquímicos de la Celda de Combustible

Para entender los principios básicos que rigen las operaciones de las celdas de combustible, se presenta en este capítulo una descripción general de los procesos que ocurren en estos sistemas, como afectan los cambios en las condiciones de operación durante su funcionamiento y el impacto de las variables, tales como temperatura, presión y concentración de los gases dentro de la celda. Así mismo, se presentan aspectos sobre la dinámica de fluidos computacional, las ecuaciones gobernantes y el método utilizado para la discretización de las ecuaciones.

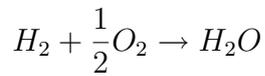
Como primer paso para conocer el funcionamiento de una celda de combustible se va a definir como un sistema ideal en el que no habrá pérdidas ni ganancias de ningún tipo pero que servirá para comprender las situaciones reales en las que trabajan estos dispositivos.

2.1.1. Funcionamiento Ideal

El funcionamiento ideal de la celda de combustible está definido por el potencial de Nernst, representado como: "*Potencial de Celda*" que es la capacidad que tiene un material para desprender electrones. La ecuación de Nernst (ec. 2.1) nos da una relación entre el potencial ideal estándar (E°) para la reacción de la celda y el potencial de equilibrio (E) a diferentes temperaturas y presiones parciales de los reactantes y productos. Una vez que las condiciones del potencial ideal estándar son conocidas, el voltaje ideal puede ser determinado a diferentes temperaturas y presiones a través de estas ecuaciones. De acuerdo a la ecuación de Nernst para la reacción del hidrógeno, el potencial ideal de la celda a una temperatura dada puede aumentar si la presión de operación de los reactantes es alta y así mejorar el funcionamiento de la celda.

De acuerdo a la ecuación de Nernst (ec. 2.1) para la reacción del hidrógeno, el potencial ideal de la celda a una temperatura dada puede aumentar si la presión de operación de los reactantes es alta y así mejorar el funcionamiento de la celda.

Reacción de la Celda



Ecuación de Nernst

$$E = E^o + \frac{RT}{2F} \cdot \ln \left(\frac{P_{H_2} \cdot P_{O_2}^{1/2}}{P_{H_2O}} \right) \quad (2.1)$$

El potencial ideal estándar (E^o) de una celda de combustible de H_2/O_2 es 1.229 volts con agua líquida como producto y 1.18 para gas. El potencial de la celda también puede ser expresado como el cambio de la energía libre de Gibbs para la reacción del hidrógeno y oxígeno. Se mostrará más adelante que el cambio de la energía libre de Gibbs aumenta cuando la temperatura de la celda disminuye y que el potencial ideal de la celda es proporcional al cambio en la energía libre de Gibbs estándar.

La figura 2.1 muestra la relación de E^o con la temperatura de la celda. El potencial ideal corresponde a una reacción donde el agua como producto está en forma de gas. Por lo tanto, E^o es menor que 1.229 volts a condiciones estándar cuando consideramos como producto agua en estado gaseoso. [25]

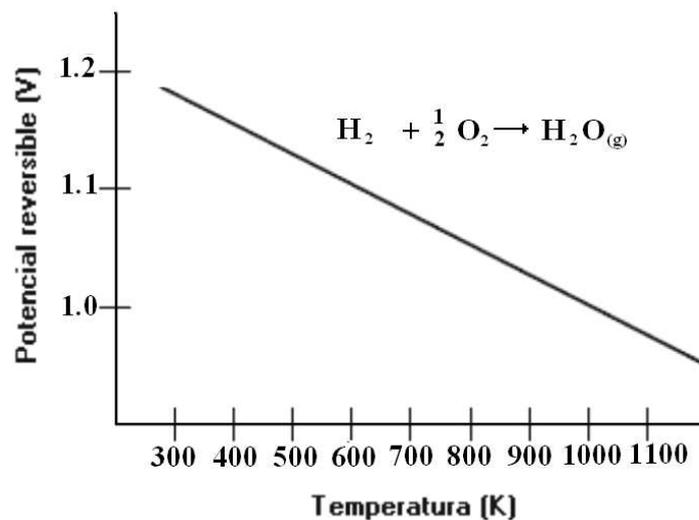


Figura 2.1: Potencial Ideal de la Celda de Combustible en función de la Temperatura.

El voltaje ideal para una celda de combustible tipo PEM a una temperatura de 353 K es de 1.17 V.

2.1.2. Funcionamiento real e irreversibilidades

En una celda de combustible solamente se obtiene trabajo útil cuando una cantidad razonable de corriente eléctrica es inducida, pero el potencial actual de la celda disminuye desde su potencial de equilibrio debido a las pérdidas irreversibles que se muestran en la figura 2.2. Las pérdidas, llamadas comúnmente como polarización, sobrepotencial o sobrevoltaje (η) se originan principalmente por tres causas: (1) Activación (η_{act}), (2) Resistencia Óhmica (η_{ohm}) y (3) Concentración (η_{conc}). Estas pérdidas hacen que el voltaje real (V) de la celda sea menor que su potencial de equilibrio, E . Quedando la siguiente ecuación 2.2:

$$V = E - \eta_{act} - \eta_{ohm} - \eta_{conc} \quad (2.2)$$

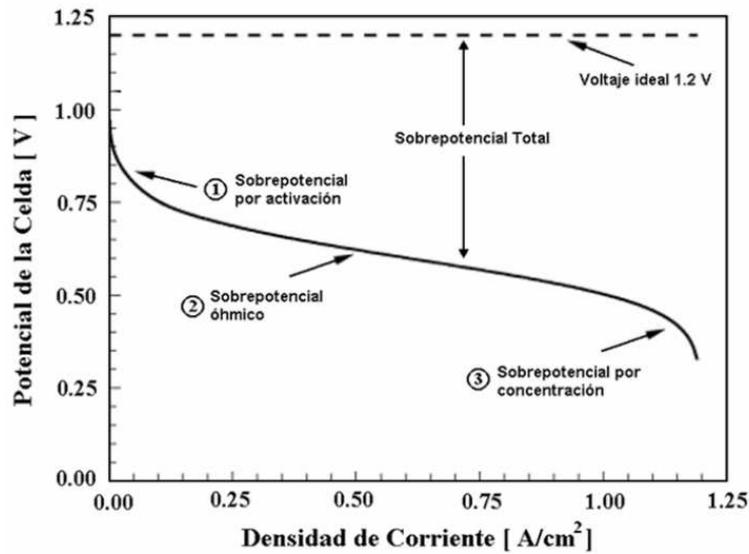


Figura 2.2: Curva de polarización ideal/real para una celda de combustible

El sobrepotencial de activación provoca una caída de voltaje por la lenta reacción que se lleva a cabo en la superficie de los electrodos. El sobrepotencial óhmico varía directamente con la densidad de corriente, incrementándose sobre todo el rango de corriente debido a que la resistencia de la celda permanece esencialmente constante. El sobrepotencial por concentración también ocurre sobre todo el rango de densidad de corriente, pero estas pérdidas sólo llegan a ser considerables a altas densidades de corriente donde llega a ser difícil suministrar suficiente flujo de hidrógeno a los sitios de reacción. [25]

Otro fenómeno importante que se presenta poco antes del sobrepotencial por activación es el "Efecto Crossover" que ocurre cuando el hidrógeno se distribuye sobre la capa catalítica de una celda de combustible tipo PEM; aquí una cantidad de gas reacciona en el ánodo y libera un par de electrones por molécula de H_2 pero otra cantidad pasa internamente a

través de la membrana sin ningún cambio y las moléculas de hidrógeno se disocian hasta el cátodo combinándose con el oxígeno que está presente, desperdiciando así dos electrones que pudieron haber sido aprovechados en un circuito externo. Este efecto tiene gran influencia en las corrientes internas de la celda de combustible tipo PEM. [2]

Sobrepotencial por Activación

Está presente cuando la velocidad de una reacción electroquímica en la superficie de un electrodo es controlada por la lenta cinética del electrodo. En otras palabras el sobrepotencial por activación está directamente relacionado con las velocidades de las reacciones electroquímicas. En este sentido existe un parecido entre las reacciones químicas y electroquímicas en las que ambas involucran una barrera (energía de activación) que debe ser superada por las especies reactantes.

La caída de voltaje debida al sobrepotencial por activación normalmente se expresa por una ecuación semi-empírica, llamada ecuación de Tafel (ec. 2.3).

$$\eta_{act} = \frac{RT}{\alpha nF} \cdot \ln \left(\frac{i}{i_0} \right) \quad (2.3)$$

donde α es el coeficiente de transferencia de carga para la reacción del electrodo e i_0 es la densidad de corriente de intercambio.

Las gráficas de Tafel (figura 2.3) dan un mejor entendimiento visual del sobrepotencial de activación de una celda de combustible. Ellas son usadas para medir la densidad de corriente de intercambio (dada por la intersección de $\eta_{act} = 0$ la cual es una medida de la máxima corriente que puede ser extraída a un sobrepotencial despreciable) y el coeficiente de transferencia (de la pendiente).

La forma más usual de la ecuación de Tafel que puede ser fácilmente expresada por una gráfica de Tafel es la ecuación 2.4:

$$\eta_{act} = a + b \cdot \log i \quad (2.4)$$

donde $a = (-2.3RT/\alpha nF) \log i_0$ y $b = (2.3RT/\alpha nF)$. El término b es conocido como pendiente de Tafel y se obtiene de la pendiente de una gráfica de η_{act} como una función de $\ln i$. La pendiente de Tafel para una reacción electroquímica es aproximadamente de 100 mV/década (log de la densidad de corriente) a temperatura ambiente. Así un incremento de 10 veces en la densidad de corriente causa un incremento de 100 mV en el sobrepotencial de activación.

De manera opuesta, si la pendiente de Tafel es de sólo 50mV/década, entonces el mismo incremento en la densidad de corriente produce un incremento de 50 mV en el sobrepotencial de activación.[25]

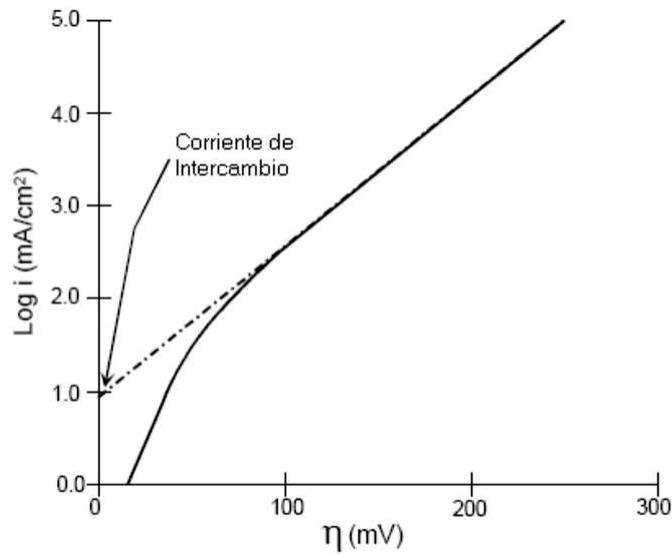


Figura 2.3: Representación de una gráfica de Tafel

Sobrepotencial Óhmico

El Sobrepotencial Óhmico ocurre debido a la resistencia de flujo de iones en el electrolito y la resistencia de flujo de electrones a través de los electrodos. Las pérdidas óhmicas son dominantes en el electrolito y son reducidas por la disminución en la separación de los electrodos y el incremento de la conductividad iónica del electrolito. Debido a que el electrolito y los electrodos de la celda cumplen la ley de Ohm, las pérdidas óhmicas pueden ser expresadas por la ecuación 2.5:

$$\eta_{ohm} = iR \quad (2.5)$$

donde i es la corriente que fluye a través de la celda y R es la resistencia total, la cual incluye la resistencia electrónica, iónica y de contacto.

Las pérdidas en esta región han sido sucesivamente reducidas mediante la humidificación de los gases reactantes, especialmente en el ánodo y empleando membranas con espesores muy finos, con baja resistencia iónica y al transporte de agua [26]. En la actualidad se trabaja en la búsqueda de capas difusoras de gas y materiales para los colectores de corriente que tengan altas conductividades eléctricas.

Sobrepotencial por Concentración

Cuando un reactivo es consumido en el electrodo debido a una reacción electroquímica, hay una pérdida de potencial debido a la imposibilidad de mantener una concentración inicial del fluido en los sitios cercanos a los sitios de reacción. Algunos procesos que pueden contribuir al sobrepotencial por concentración son: una baja difusión de gas en el electrodo poroso, solubilidad de los reactivos y productos dentro y fuera del electrolito hacia los sitios de reacción.

Tanto el oxígeno como el hidrógeno que son suministrados a la celda pueden disminuir su concentración en la cercanía de los electrodos en la medida que estos sean consumidos por la reacción, estas caídas de presión están relacionadas con la forma en que la corriente es extraída desde la celda y a factores físicos relacionados con la eficiencia de la circulación de los gases en la estructura de los electrodos, así como la rapidez con que pueden ser reemplazados por los sistemas de suministro. El efecto de este cambio en la presión de los gases reactivos se puede apreciar en la ecuación de Nernst (ec. 2.1).

Para determinar el sobrepotencial por concentración en una celda de combustible tipo PEM se tiene que recurrir a la primera ley de Fick de la difusión. Esta nos dice que la tasa de transporte de masa para la superficie de un electrodo puede ser descrita en la mayoría de los casos por (ec. 2.6):

$$i = \frac{nFD(C_B - C_S)}{\delta} \quad (2.6)$$

donde D es el coeficiente de difusión de las especies reactantes, C_B es su concentración en el seno de la interfase, C_S es su concentración en la superficie y δ es el espesor de la capa difusora. La corriente límite i_L es una medida de la máxima tasa a la cual un reactante puede ser suministrado a un electrodo y ocurre cuando $C_S = 0$.

$$i_L = \frac{nFDC_B}{\delta} \quad (2.7)$$

Manipulando apropiadamente las ecuaciones 2.6 y 2.7, tenemos que:

$$\frac{C_S}{C_B} = 1 - \frac{i}{i_L} \quad (2.8)$$

Y la ecuación de Nernst para especies reactantes en condiciones de equilibrio o cuando la corriente no está fluyendo, es (2.9):

$$E_{i=0} = E^{\circ} + \frac{RT}{nF} \ln C_B \quad (2.9)$$

Cuando la corriente fluye, la concentración en la superficie es menor que la concentración en el seno y la ecuación de Nernst se convierte en (2.10):

$$E = E^{\circ} + \frac{RT}{nF} \ln C_S \quad (2.10)$$

La diferencia de potencial (ΔE) producida por un cambio de concentración en el electrodo es llamada sobrepotencial por concentración, (ec. 2.11):

$$\Delta E = \eta_{conc} = \frac{RT}{nF} \ln \frac{C_S}{C_B} \quad (2.11)$$

Si sustituimos la ecuación 2.8 en 2.11 tenemos que el sobrepotencial por concentración es dado por la ecuación 2.12:

$$\eta_{conc} = \frac{RT}{nF} \cdot \ln \left(1 - \frac{i}{i_L} \right) \quad (2.12)$$

En este análisis de sobrepotencial por concentración, el sobrepotencial de activación se desprecia. La reacción de transferencia de carga tiene una densidad de corriente tan alta que el sobrepotencial de activación es despreciable en comparación con el sobrepotencial por concentración.

Además existe una densidad de corriente límite, i_L a la cual la densidad de corriente i no podrá superar independientemente de que aumente el suministro de combustible, por lo que es una medida de la máxima velocidad de suministro del reactivo hacia el electrodo.

Este fenómeno es especialmente severo para el cátodo de una celda, el oxígeno es retenido debido a la presencia de agua líquida dentro de la estructura porosa del electrodo y sobre la superficie catalizador-membrana y actúa como una barrera adicional al transporte de oxígeno hacia los sitios de reacción. Minimizando estas pérdidas podemos prolongar la región óhmica, obteniendo así una mayor densidad de potencia. [27]

Para saber como se reflejan gráficamente las pérdidas por concentración en durante la operación de la celda de combustible se hará lo siguiente:

La ecuación 2.12 puede escribirse como

$$\Delta V = \frac{RT}{nF} \cdot \ln \left(1 - \frac{i}{i_L} \right) \quad (2.13)$$

que es el cambio en el voltaje debido a las perdidas por transporte de masa (ec. 2.13).

Agrupando el término $RT/2F$ en una constante B y considerando que este tipo de pérdida ocurre solo en un electrodo, se tiene que el voltaje de operación en la celda de combustible es (ec. 2.14):

$$\Delta V = E + B \cdot \ln \left(1 - \frac{i}{i_L} \right) \quad (2.14)$$

Para valores apropiados de las constantes, $E = 1.2\text{volts}$, $B = 0.016$ volts y $i_l = 1000$ mA, se obtiene la gráfica de la figura 2.4.

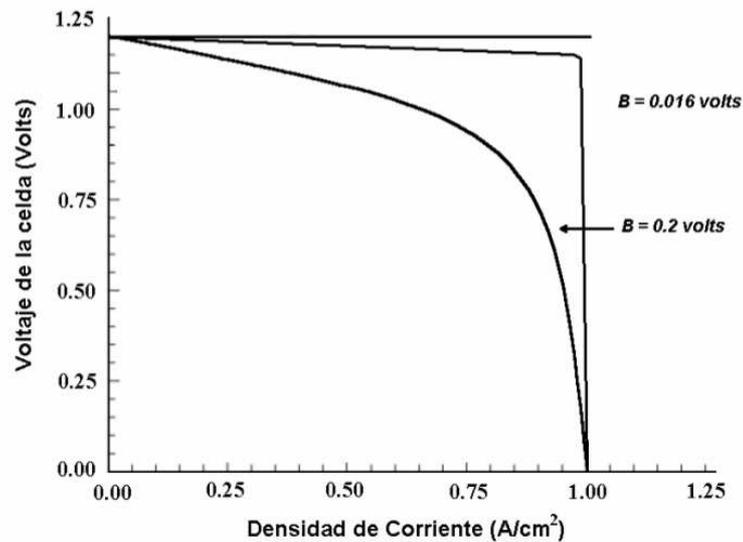


Figura 2.4: Efecto de la caída de voltaje debido a las pérdidas de transporte de masa en un electrodo para dos valores diferentes de la constante B .

Donde la no-linealidad de esta función, cuando se usa el valor teórico de B , es clara. En la práctica la desviación de pérdida por transporte de masa no es tan repentina y se podrían suponer valores más altos de B , como se ve en la segunda curva de la figura 2.4.

Esto es porque los cambios en la concentración y presión parcial también afectan las pérdidas por activación (debido a que la densidad de corriente de intercambio i_o es reducida). Esto puede ser modelado haciendo B más grande que el valor teórico. Sin embargo, es claro que una vez que la densidad de corriente alcanza el valor límite en un electrodo, el voltaje cae rápidamente a cero. Esto quiere decir que la ecuación 2.14 da una buena representación de la caída de voltaje por el transporte de masa. [2]

2.1.3. Energía Libre de Gibbs

Para explicar por qué las celdas de combustible han atraído tanto la atención desde el punto de vista de la eficiencia es necesario considerar algunos aspectos termodinámicos simples. Uno de ellos es la *Energía Libre de Gibbs* (ΔG); que es simplemente la energía química contenida por un material o la energía disponible para realizar un trabajo externo. En las celdas de combustible este trabajo externo es el que involucra el movimiento de electrones por un circuito externo.

El máximo trabajo eléctrico (W_{el}) que se puede obtener en una celda de combustible operando a presión y temperatura constante es dado por el cambio en la energía libre de Gibbs (ΔG) o la reacción electroquímica,

$$(W_{el}) = (\Delta G) = -nFE \quad (2.15)$$

donde n es el número de electrones que participan en la reacción, F es la constante de Faraday y E es el potencial ideal de la celda. Si se considera el caso de los reactantes y productos para condiciones estándar,

$$\Delta G^\circ = -nFE^\circ \quad (2.16)$$

donde el superíndice ($^\circ$) se refiere a las condiciones estándar o de referencia de (25°C y 1 atm).

Para una celda de combustible, el trabajo máximo disponible está relacionado con la energía libre de reacción (ec. 2.17),

$$\Delta G_r = \Delta H_r - T\Delta S_r \quad (2.17)$$

donde la diferencia entre ΔG_r y ΔH_r es proporcional al cambio en la entropía (ΔS_r). La máxima cantidad de energía eléctrica disponible es ΔG_r , y la energía disponible térmica es ΔH_r . La cantidad de calor que es producido por una celda de combustible operando reversiblemente es $T\Delta S_r$. [25]

2.1.4. Eficiencia de la Celda

La eficiencia térmica de un dispositivo de conversión de energía (ec. 2.18) se define como la cantidad de energía útil producida relativa al cambio en la energía química almacenada (energía térmica) que ocurre cuando el combustible reacciona con el oxidante.

$$\xi = \frac{\text{Energía útil}}{\Delta H} \quad (2.18)$$

El proceso de una máquina de combustión interna es térmico, mientras que el proceso de una celda de combustible es electroquímico. Las diferencias entre estos dos métodos de producción de energía útil son la raíz del punto de comparación de la eficiencia.

En el caso de un convertidor electroquímico, el cambio en la energía libre de Gibbs, ΔG , de la reacción está disponible como la energía eléctrica útil a la temperatura de conversión. Entonces, la eficiencia (ξ) ideal de una celda de combustible (ec. 2.19), operando irreversiblemente es:

$$\xi = \frac{\Delta G}{\Delta H} \quad (2.19)$$

La eficiencia de una celda de combustible está basada en el cambio de la energía libre estándar para la reacción 2.20:



donde el agua producida se encuentra en forma líquida. A las condiciones estándar de $25^\circ C$ y 1 atmósfera de presión, la energía química ($\Delta H = \Delta H_o$ en la reacción de hidrógeno/oxígeno es 286 kJ/mol y la energía libre disponible para obtener trabajo útil es de 237.3 kJ/mol. Así, la *eficiencia térmica* (ec. 2.21) de una celda de combustible ideal operando reversiblemente con hidrógeno y oxígeno puro a las condiciones estándar sería:

$$\xi_{ideal} = \frac{237.1}{285.8} = 0.83 \quad (2.21)$$

La eficiencia real de una celda de combustible puede ser expresada en términos del voltaje de operación de la celda y el potencial ideal. El voltaje real de la celda es menor que su potencial ideal debido a las pérdidas asociadas a los sobrepotenciales y a las pérdidas óhmicas de la celda.

Entonces, la eficiencia térmica puede ser escrita en términos del voltaje de celda (ec. 2.22).

$$\xi = \frac{\text{Energía útil}}{\Delta H} = \frac{\text{Potencia útil}}{\Delta G/0.83} = \frac{V_{\text{celda}} \cdot \text{Corriente}}{V_{\text{ideal}} \cdot \text{Corriente}/0.83} = \frac{(0.83)(V_{\text{celda}})}{V_{\text{ideal}}} \quad (2.22)$$

Como se mencionó anteriormente, el voltaje ideal o potencial ideal estándar de una celda de combustible operando reversiblemente con hidrógeno y oxígeno puros y a condiciones estándar es de 1.229 volts.

Y la eficiencia térmica de una celda operando a un potencial real V_{celda} , basada en el alto valor energético del hidrógeno, está dada por (ec. 2.23):

$$\xi_{\text{ideal}} = 0.83 \cdot V_{\text{celda}}/V_{\text{ideal}} = 0.83 \cdot V_{\text{celda}}/1.229 = 0.675 \cdot V_{\text{celda}} \quad (2.23)$$

Una celda de combustible puede ser operada a diferentes densidades de corriente. El voltaje de la celda correspondiente determina su eficiencia. Disminuciones en la densidad de corriente incrementa el voltaje y por lo tanto su eficiencia. Algo que se debe tomar en cuenta cuando la densidad de corriente disminuye, es el área activa de la celda; la cual debe incrementarse para obtener la cantidad de potencia necesaria. De esta manera, diseñar celdas de combustible con altas eficiencias provoca que el costo de producción aumente, pero que el costo de operación disminuya. [24]

2.2. Fenómenos de Transporte en la PEMFC

Dentro de la celda de combustible tipo PEM se llevan a cabo diferentes procesos que influyen considerablemente en su desempeño y uno de ellos es el transporte de masa acoplado a las reacciones electroquímicas. Este proceso a su vez, tiene un fuerte impacto en dos aspectos operacionales de la celda: a) La distribución de agua en su interior, b) las limitaciones de transporte de masa [28, 29] y la eficiencia con que se llevan a cabo dependerá directamente de los componentes que la conforman y de las condiciones de operación en las que trabaja la celda.

La distribución adecuada de agua en su interior garantiza que la membrana quede completamente hidratada y mantenga una buena conductividad iónica, lo cual se ve reflejado en la densidad de corriente que puede ser obtenida; por otro lado, una mala distribución de agua provoca en el lado del cátodo la obstrucción de poros del difusor por medio de gotas de agua y estas traen como consecuencia el bloqueo del gas para que fluya desde los canales del plato bipolar hasta las zonas catalíticas del electrodo.

A continuación se muestran esquemáticamente los procesos de transporte de masa y algunos parámetros que intervienen en el funcionamiento de la celda:

P = presión	C = concentración	δ = espesor del difusor
T = temperatura	k = permeabilidad	ϵ = porosidad
H = humedad relativa	α = arrastre osmótico	λ = contenido de agua

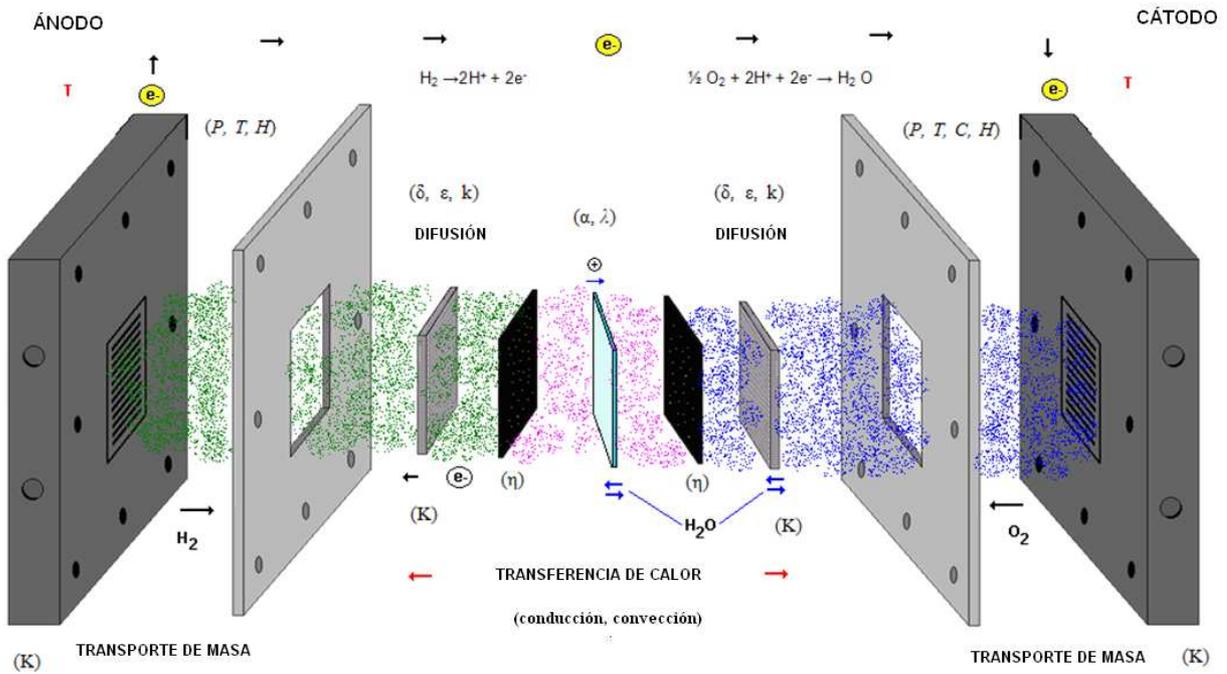


Figura 2.5: Transporte de masa en la celda y variables involucradas en el proceso.

2.2.1. Variables de Operación en la PEMFC

Como se observa en la figura 1, el funcionamiento de las celdas de combustible como muchos otros sistemas es afectado por las variables de operación (presión, temperatura, composición de los gases, consumo de los reactantes, etc); así como algunos factores (impurezas, vida útil de los materiales, etc) que influyen de manera considerable en el potencial ideal de la celda y en la magnitud de los sobrepotenciales por activación, por resistencia óhmica y por concentración que ocurren en ella. Es por esto que muchos estudios están enfocados a la evaluación de estos parámetros que sirven para optimizar las condiciones de operación en estos dispositivos.

En el siguiente apartado se da una breve descripción del efecto que existe entre estas variables de operación y el desempeño de la celda:

Efecto de la Presión y de la Temperatura

Un incremento en la presión de operación tiene muchos efectos que benefician el desempeño de la celda, puesto que la presión parcial de los reactantes, la solubilidad del gas y la velocidad de transferencia de masa son mayores. Sin embargo, un aumento en la presión puede afectar a la densidad de corriente de intercambio (por la presión del oxígeno) y al potencial de equilibrio. Generalmente los cambios en estas variables se ven reflejados en el sobrepotencial por concentración.

La temperatura también juega un papel muy importante en el desempeño de la celda ya que influye en variables tales como: el grado de hidratación de la membrana, su conductividad (permitiendo una mayor difusividad de protones) y su resistencia mecánica; la presión parcial de los gases y su difusión; la densidad de corriente de intercambio (favoreciendo la cinética de la reacción) y el potencial estándar (por la alta difusividad del hidrógeno)[21, 29].

Efecto de la Humedad y Concentración de los Gases

Otro de los factores que influyen en el funcionamiento de la celda son la humedad y la concentración de los gases. En la literatura [22] se ha reportado que conforme el nivel de humedad se incrementa en los gases de entrada, la densidad de corriente aumenta. Esto se debe a que la cantidad de corriente obtenida está fuertemente relacionada con el nivel de hidratación de la membrana. Si el nivel de humedad es mayor, la membrana estará mejor hidratada y esto nos llevará a tener un mejor desempeño de la celda. Sin embargo, esto es cierto sólo si el electrodo no se encuentra con exceso de agua líquida en su interior, lo cual actúa como barrera para que los gases lleguen hasta las capas catalizadoras donde se lleva a cabo la reacción electroquímica.

En cuanto a la concentración de los gases, sabemos que en el lado del cátodo se utiliza comúnmente aire como oxidante en lugar de oxígeno ya que el primero no necesita ser procesado y lo tenemos totalmente disponible. Sin embargo, la concentración de oxígeno en el aire, el cuál es el principal oxidante, es baja (21%). De esta manera el desempeño de la celda se verá afectado a menos que se aplique la suficiente presión en la entrada del gas como para que la concentración de oxígeno aumente, alcanzando así la capa catalizadora. Esto es por lo que la densidad de corriente en la celda se encuentra en función de la concentración de oxígeno.

2.2.2. Parámetros Importantes de la Celda

Sin considerar la parte catalítica de la celda, la cual también es un parámetro importante a estudiar, se dará una descripción de la importancia que tienen otros parámetros en su desempeño; tal como lo es la geometría de los diseños de canales en los platos bipolares.

Efecto de la Configuración y Dimensiones de los Canales en los Platos bipolares

En muchas aplicaciones de la celda de combustible la geometría juega un papel indispensable para su buen funcionamiento; esta debe diseñarse de tal forma que se pueda obtener la máxima cantidad de corriente de ella pero siendo lo más pequeña posible. Esto reducirá su tamaño, especialmente el de los stacks haciendo que los diseños sean más atractivos. De esta manera se tienen que hacer ciertas consideraciones a la relación que debe existir entre los canales de flujo y los bordes en el plato bipolar con una determinada área de la celda. Así también, la forma en que los gases deben ser distribuidos sobre los difusores para tener un máximo aprovechamiento de flujo en la celda, lo cual varía en cada diseño. Se han realizado varios estudios para las configuraciones de canales como los publicados por Xiangou Li [30] y R. G. Reddy, [31] el primero haciendo un análisis de diseño para seis tipos de configuraciones (pin-type, parallel, serpentine, interdigitated y el diseño metal sheets) con algunas variantes y el segundo realizando simulaciones para estudiar tres configuraciones generales (rectangular, triangular, hemisférica) además de un estudio detallado de la profundidad y ancho de los canales de flujo.

Particularmente los requerimientos de los platos bipolares, respecto a las características físico-químicas son: distribución uniforme de los gases reactantes sobre la superficie de los electrodos para minimizar el sobrepotencial por concentración; alta conductividad eléctrica; alta resistencia mecánica para la integración del stack; impermeabilidad a los gases para una operación segura; resistencia a la corrosión por el entorno de la celda, materiales de bajo costo y métodos económicos para su fabricación. [31, 32]

Hidratación de la Membrana

Como se mencionó anteriormente el contenido de agua en la membrana es indispensable para el buen desempeño de la celda, este se determina por medio del balance entre la producción de agua y los tres procesos de transporte de agua: el arrastre electro-osmótico, asociado con la migración de protones a través de la membrana desde el ánodo hasta el cátodo; la difusión de agua que hay desde el cátodo, por la reacción electroquímica que ocurre en este electrodo y la difusión de agua por la alimentación de los gases. De los trabajos reportados actualmente, podemos mencionar el de Kah Wai Lum [22] donde realizó un análisis de

la interacción entre el coeficiente de arrastre osmótico y el coeficiente de difusión, utilizando diferentes humedades relativas en el flujo de oxígeno. Así también se observó el efecto que tiene sobre la conductividad de la membrana. Una conductividad alta resultará en un incremento de la densidad de corriente local en la celda.

Difusores de Gas

El transporte de masa en los difusores de gas también tiene gran influencia en el desempeño de la celda y es uno de los menos estudiados. En el cátodo, el agua se acumula debido a la permeabilidad electro-osmótica de la membrana y a la reducción electroquímica de oxígeno. Si la humidificación de la membrana es baja, se incrementa su resistencia óhmica y por otro lado la presencia de agua líquida disminuye la capacidad de difusión de moléculas de oxígeno desde el difusor hacia los sitios de reacción. [33, 34]. En general, podemos decir que existen cinco fenómenos diferentes limitan el transporte de oxígeno a través del difusor de gas del lado del cátodo: a) La difusión en bulto para la fase gaseosa, b) la difusión de Knudsen, c) la convección, d) la condensación capilar del agua en poros pequeños y e) el transporte de agua líquida.

En resumen, las funciones específicas de los difusores son:

- Permeabilidad a los gases reactantes y productos: Los difusores deben proporcionar libre acceso al hidrógeno y al oxígeno desde los canales de los platos bipolares hasta las capas catalizadoras, así como proporcionar el camino para la remoción de agua líquida desde las capas catalizadoras hacia los canales del plato bipolar.
- Conductividad Térmica y Electrónica: Tienen que ofrecer suficiente capacidad térmica para intercambiar calor desde el ensamble membrana/electrodos hasta los platos bipolares donde se encuentran los canales de refrigeración y deben facilitar la conducción eléctrica entre los platos bipolares y las capas catalizadoras, incluyendo la conductividad en plano con las regiones adyacentes a los canales de flujo.
- Resistencia Mecánica: Deben ofrecer el soporte mecánico del ensamble membrana/electrodos en caso de que exista una diferencia de presión entre los gases reactantes y a su vez debe existir un buen contacto con las capas catalizadoras

Actualmente los que más se acercan a esto son: el papel carbón Toray y la tela de carbón. Sin embargo, aun tenemos muchas opciones para poder utilizar otro material (medio poroso metálico o malla de metal) como difusor de gas o en su defecto mejorar las propiedades de los difusores usados actualmente.

Capítulo 3

Modelación

3.1. Ecuaciones para Flujo de Fluidos

La modelación adecuada de los procesos involucrados en el funcionamiento de la celda de combustible ha permitido obtener grandes avances en aspectos relacionados con la optimización de sus diseños. Con tales estudios se han obtenido elementos clave para el desarrollo de nuevos materiales.

La esencia de la modelación de celdas de combustible es el desarrollo de una unidad computacional adecuada, capaz de describir ampliamente su operación dentro de un gran rango de condiciones. Para realizarlo es indispensable conocer los fundamentos de la dinámica de fluidos y los procesos físico/químicos que se llevan a cabo en la celda de combustible. A continuación se presentan las ecuaciones que los describen.

3.1.1. Ecuación de Continuidad

La ecuación de continuidad (ec. 3.1) o de conservación de masa en estado estacionario puede escribirse como:

$$\nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (3.1)$$

donde ρ es la densidad del fluido, \vec{v} es el vector de velocidad y el término $\nabla \cdot (\rho \vec{v})$ corresponde a la velocidad espacial de un volumen de control.

La ecuación de continuidad establece que la rapidez de crecimiento de la masa contenida en un volumen de control es exactamente igual al flujo neto de masa hacia el mismo volumen de control. Este es el principio de conservación de masa y se aplica a todos los fluidos en los cuales no se está llevando a cabo ninguna reacción.[35]

3.1.2. Ecuación de Conservación de Momentum

El principio de conservación de momentum es una aplicación de la segunda ley de Newton del movimiento a un elemento de fluido y establece que la tasa a la cual el momentum de una masa de fluido está cambiando es igual a la fuerza neta externa que actúa sobre la masa.

La ecuación de conservación de momentum (ec. 3.2) en estado estacionario y en un marco de referencia no inercial (no acelerado) es descrita por:

$$\nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\bar{\tau}) + S_m \quad (3.2)$$

donde p es la presión estática, $\bar{\tau}$ es el tensor de esfuerzos y S_m un término fuente que contiene "las características del medio poroso" (ver ecuación 3.5).

El tensor de esfuerzos (ec. 3.3) está dado por

$$\bar{\tau} = \mu \cdot \left[(\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T) - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{v} I \right] \quad (3.3)$$

donde μ es la viscosidad molecular, I es el tensor unitario y el segundo término del lado derecho es el efecto de expansión volumétrica.

Debido a que en el modelo se manejan medios porosos y se desprecia el efecto de gravedad; la ecuación (3.3) queda de la siguiente forma:

$$\frac{1}{\epsilon^2} \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) + \nabla p + \nabla \cdot \bar{\tau} + S_m \quad (3.4)$$

donde ϵ es la porosidad y S_m representa las características que definen el medio poroso:

$$S_m = \frac{\mu}{k} \cdot \vec{v} \quad (3.5)$$

en la cual μ es la viscosidad del gas ($kg/m \cdot s$), k la permeabilidad y \vec{v} es el vector de velocidad superficial en el medio poroso en (m/s). [36]

3.1.3. Ecuación de Transporte de Especies

Para calcular la fracción de masa local de cada especie y_i , se debe resolver la ecuación de convección-difusión de especies (ec. 3.6), la cual puede escribirse de la siguiente forma:

$$\nabla \cdot (\rho \vec{v} y_i) = -\nabla \cdot \vec{J}_i + S_i \quad (3.6)$$

donde S_i es la tasa de generación por la adición de una fase dispersa más cualquier otra fuente que pueda ser definida y \vec{J}_i es la difusión de especies i , la cual es calculada (para un flujo laminar) como:

$$\vec{J}_i = -\rho D_i \nabla y_i \quad (3.7)$$

donde D_i es el coeficiente de difusión para las especies i .

3.1.4. Ecuación de la Energía

La ecuación de la energía (ec. 3.8) puede escribirse de la siguiente manera:

$$\nabla \cdot (\vec{v} (\rho E + p)) = \nabla \cdot \left(k_{eff} \nabla T - \sum_j h_j \vec{J}_j \right) \quad (3.8)$$

donde \mathbf{E} es la energía total, k_{eff} es la conductividad efectiva y \vec{J}_j es el flujo de difusión de las especies j . Sin embargo, hay que resaltar que en ésta ecuación no se consideraron los efectos de disipación viscosa y no se agregó ningún término fuente. Los dos primeros términos del lado derecho de la ecuación representan la transferencia de energía debido a la conducción y difusión de especies, respectivamente. [36]

3.2. Modelo Electroquímico

En el modelo PEM de Fluent, los procesos electroquímicos de oxidación y reducción son tratados como reacciones heterogéneas que se llevan a cabo dentro de las superficies catalizadoras (en ambos lados de la membrana). Y la fuerza que promueve estas reacciones es el sobre potencial de superficie; que es la diferencia entre el potencial de la fase sólida y el potencial de la fase membrana. De tal manera se tienen las siguientes ecuaciones:

$$\nabla \cdot (\sigma_{sol} \nabla \phi_{sol}) + R_{sol} = 0 \quad (3.9)$$

$$\nabla \cdot (\sigma_{mem} \nabla \phi_{mem}) + R_{mem} = 0 \quad (3.10)$$

donde (ec. 3.9) es la ecuación de potencial para la fase sólida encargada del transporte de electrones "en los colectores de corriente y medios porosos" y (ec. 3.10) es la ecuación de potencial para la fase membrana o electrolito y representa el transporte iónico de los H^+ .

Las variables mostradas en estas ecuaciones corresponden a:

σ = conductividad eléctrica (1/ohm-m)

ϕ = potencial eléctrico (volts)

R = transferencia de corriente volumétrica o corriente de intercambio (A/m^3)

Para este modelo electroquímico (Ver Fig. 3.1) existen dos tipos de condiciones de frontera externas. Aquellas por las cuales pasa una corriente eléctrica y aquellas por las cuales no pasa corriente. Con respecto a la corriente protónica, ésta no interviene en las fronteras externas de la celda de combustible por lo que se establece una condición de frontera de flujo cero para el potencial de la fase membrana (ϕ_{mem}), en todas las fronteras externas.

Para el potencial de la fase sólida (ϕ_{sol}) existen fronteras externas en el lado del ánodo y del cátodo que están en contacto con el circuito eléctrico externo y solamente a través de estas fronteras pasa corriente eléctrica generada en la celda de combustible. En todas las otras fronteras externas existe una condición de frontera de flujo cero para ϕ_{sol} .

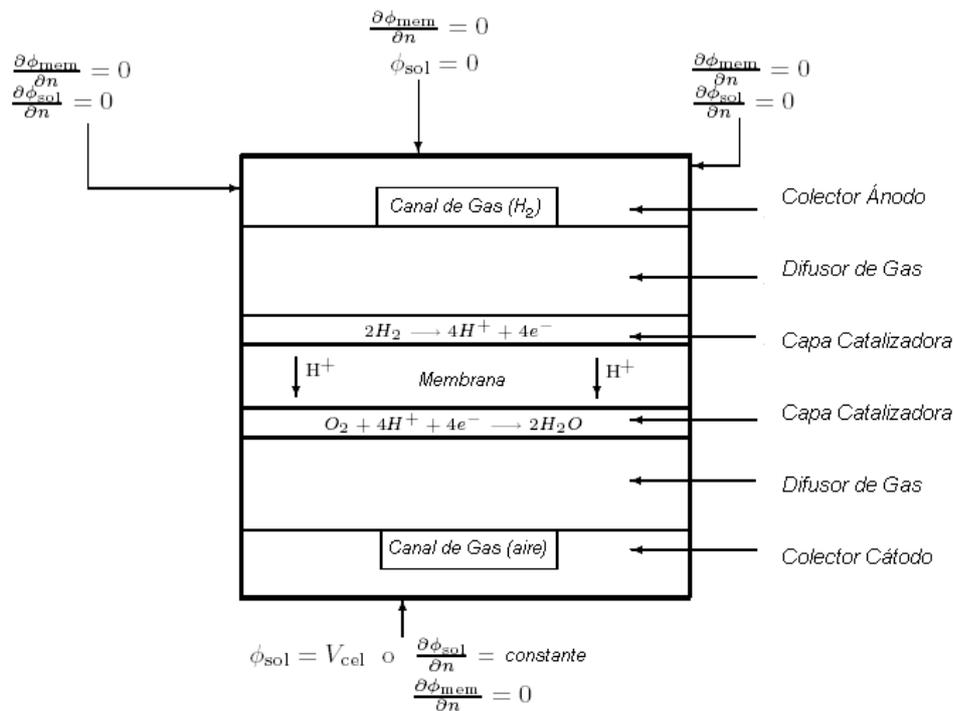


Figura 3.1: Condiciones de Frontera para ϕ_{sol} y ϕ_{mem} .

En las fronteras de contacto externo, se establecen valores arreglados para ϕ_{mem} "condiciones de frontera potencioestáticas". Si en el lado del ánodo se establece como cero, el valor establecido (positivo) en el lado del cátodo es el voltaje de la celda. Especificando un flujo constante de cero (digamos en el lado del cátodo) quiere decir que especificamos condiciones de frontera galvanostáticas.

La transferencia de corriente, o los otros términos fuente en las ecuaciones 3.9 y 3.10, son diferente de cero solamente dentro de las capas catalizadoras y son calculadas de la siguiente forma:

- Para la fase sólida, $R_{sol} = -R_{an} (< 0)$ en el lado del ánodo y $R_{sol} = +R_{cat} (> 0)$ en el lado del cátodo.
- Para la fase membrana, $R_{mem} = +R_{an} (> 0)$ en el lado del cátodo y $R_{mem} = -R_{cat} (< 0)$ en el lado del ánodo.

Los términos fuente de las ecuaciones 3.9 y 3.10 también son llamados densidad de corriente de intercambio (A/m^3) y se tienen las siguientes definiciones generales:

$$R_{an} = j_{an}^{ref} \left(\frac{H_2}{[H_2]_{ref}} \right)^{\gamma_{an}} \left(e^{\alpha_{an} F \eta_{an} / RT} - e^{-\alpha_{cat} F \eta_{an} / RT} \right) \quad (3.11)$$

$$R_{cat} = j_{cat}^{ref} \left(\frac{O_2}{[O_2]_{ref}} \right)^{\gamma_{cat}} \left(-e^{\alpha_{an} F \eta_{cat} / RT} + e^{-\alpha_{cat} F \eta_{cat} / RT} \right) \quad (3.12)$$

- j_{ref} = corriente de intercambio, referencia volumétrica (A/m^3)
- $[y_i], [y_i]_{ref}$ = concentración local de especies, valor de referencia ($kgmol/m^3$)
- γ = dependencia de concentración (adimensional)
- α = coeficiente de transferencia (adimensional)
- F = constante de Faraday (9.65×10^7 C/kgmol)

Las ecuaciones 3.11 y 3.12 son una formulación general de la función de Butler-Volmer. Una simplificación a ésta es la formulación de Tafel (ecs. 3.13 y 3.14):

$$R_{an} = j_{an}^{ref} \left(\frac{H_2}{[H_2]_{ref}} \right)^{\gamma_{an}} \left(e^{\alpha_{an} F \eta_{an} / RT} \right) \quad (3.13)$$

$$R_{cat} = j_{cat}^{ref} \left(\frac{O_2}{[O_2]_{ref}} \right)^{\gamma_{cat}} \left(e^{-\alpha_{cat} F \eta_{cat} / RT} \right) \quad (3.14)$$

que es usada por default en el modelo PEM de Fluent para calcular la transferencia de corriente en las capas catalizadoras.

La fuerza que promueve la cinética es: el sobrepotencial de superficie local, η , también conocido como las *pérdidas por activación*. Esto generalmente es la diferencia entre el potencial de la fase sólida y el potencial de la fase membrana, ϕ_{sol} y ϕ_{mem} .

La ganancia de potencial eléctrico debido al cruce del ánodo al cátodo puede ser tomado en cuenta restando el voltaje a circuito abierto V_{oc} del cátodo.

$$\eta_{an} = \phi_{sol} - \phi_{mem} \quad (3.15)$$

$$\eta_{cat} = \phi_{sol} - \phi_{mem} - V_{oc} \quad (3.16)$$

Por medio de las ecuaciones 3.9 a la 3.16, los dos campos de potenciales pueden ser obtenidos.

3.2.1. Conservación de Masa y Corriente

Los términos fuente volumétricos (kg/m^3s) para la ecuación de especies (ec. 3.6) están dados por las ecuaciones:

$$S_{H_2} = -\frac{M_{w,H_2}}{2F} R_{an} \quad (3.17)$$

$$S_{O_2} = -\frac{M_{w,O_2}}{4F} R_{cat} \quad (3.18)$$

$$S_{H_2O} = -\frac{M_{w,H_2O}}{2F} R_{cat} \quad (3.19)$$

donde $M_{w,i}$ es el peso molecular de las especies en ($kg/kgmol$), R_{an} y R_{cat} son las densidades de corriente volumétricas dadas en las ecuaciones (3.11 - 3.14) y F la constante de Faraday.

Por otro lado, cabe mencionar que las concentraciones de especies de hidrógeno y oxígeno que aparecen en las ecuaciones (3.11 - 3.14) son valores de superficie y las reacciones que se llevan a cabo en las capas catalizadoras son tratadas como tales.

Así, el flujo difusivo (lado izquierdo de la ecuación 3.20) de cualquier especie reactante estará balanceada por su tasa de producción (lado derecho de la ecuación 3.20):

$$\frac{\rho D_i}{\delta} (y_{i,sup} - y_{i,cent}) \eta - \frac{M_{w,i}}{nF} R_{an,cat} \quad (3.20)$$

- D_i = difusividad de especies i (m^2/s)
- η = área específica de la superficie reactante ó relación superficie-volumen ($1/m$)
- $y_{i,sup}$ = fracción masa de especies i en la superficie reactante
- $y_{i,cent}$ = fracción masa de especies i en el centro de la celda
- δ = distancia promedio entre las superficies reactantes y el centro de la celda (m)

La distancia promedio del centro de la celda a la superficie reactante es estimada como $\delta = 1/s$. La ecuación 3.20 es usada para obtener los valores de superficie de las concentraciones de H_2 y O_2 , aplicando un procedimiento de solución Newtoniano. Estos valores de superficie son usados para calcular las tasas de cambio de las ecuaciones 3.17 a la 3.19.

3.2.2. Formación de Agua Líquida, Transporte y sus Efectos.

Puesto que las PEMFC's operan relativamente a bajas temperaturas ($< 100^\circ C$), el vapor de agua puede condensarse en agua líquida, especialmente a altas densidades de corriente. Mientras que la existencia de agua líquida mantiene la membrana hidratada, ésta también bloquea el camino de la difusión de los gases, reduce la tasa de difusión, el área de superficie reactante efectiva y por lo tanto el desempeño de la celda.

Para modelar la formación y transporte de agua líquida, se utiliza el modelo de saturación [7, 20]. En esta aproximación la formación de agua líquida y transporte está gobernada por la siguiente ecuación de conservación para la saturación de agua (s), (ec. 3.21).

$$\frac{\partial (\epsilon \rho_l s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l \vec{V}_l s) = r_w \quad (3.21)$$

donde el subíndice l representa el agua líquida, r_w es la tasa de condensación (ec. 3.22) que es modelada como,

$$r_w = c_\Gamma \max \left[(1 - s) \frac{P_{WV} - P_{sat}}{RT} M_{w,H_2O} - s \rho_l \right] \quad (3.22)$$

donde r_w es un término que se agrega a la ecuación de vapor de agua, así como el factor de corrección de presión (fuente de generación masa).

La tasa de condensación constante está relacionada con $cr = 100s^{-1}$. Suponiendo que la velocidad del líquido, V_l , es equivalente a la velocidad del gas dentro de los canales del plato. Dentro de las zonas porosas de alta resistencia, el uso del término de difusión capilar nos permite reemplazar el término convectivo en la ecuación 3.21:

$$\frac{\partial(\epsilon\rho_l s)}{\partial t} + \nabla \cdot \left[\rho_l \frac{Ks^3}{\mu_l} \frac{dp_c}{ds} \nabla s \right] - r_w \quad (3.23)$$

Dependiendo de la fase húmeda, la presión capilar es calculada como una función de s (La función de Leveret),

$$p_c = \begin{cases} \frac{\sigma \cos \theta_c}{\left(\frac{K}{\epsilon}\right)^{0.5}} (1.417(1-s) - 2.12(1-s)^2 + 1.263(1-s)^3) & \theta_c < 90^\circ \\ \frac{\sigma \cos \theta_c}{\left(\frac{K}{\epsilon}\right)^{0.5}} (1.417s - 2.12s^2 + 1.263s^3) & \theta_c > 90^\circ \end{cases}$$

donde ϵ es la porosidad, σ es la tensión superficial (N/m^2), θ_c es el ángulo de contacto y K la permeabilidad absoluta.

La ecuación 3.21 modela varios procesos físicos tales como la condensación, vaporización, difusión capilar y tensión superficial. La obstrucción del medio poroso y la inundación de la superficie de reacción son modeladas por la multiplicación de la porosidad y el área de superficie activa por $(1-s)$, respectivamente.

3.3. Consideraciones del Modelo

Antes de mencionar las consideraciones que se tomaron en cuenta para resolver el modelo de simulación hay que resaltar dos puntos que son esenciales para la modelación de una celda de combustible.

1. Que el modelo electroquímico esté directamente acoplado con las soluciones de las ecuaciones de continuidad, de momentum y de energía.
2. Que estén considerados los tres mecanismos principales de una celda de combustible: el sobrepotencial por activación, el sobrepotencial por resistencia óhmica y el sobrepotencial por concentración.

Para el modelo utilizado en este trabajo esto puede demostrarse por medio de la relación que existe entre las ecuaciones descritas en el capítulo 2 y las ecuaciones del capítulo 3; lo cual es presentado de la siguiente manera: el sobrepotencial por activación (ec. 2.3) y el sobrepotencial por concentración expresado en términos de concentraciones (ec. 2.11) se encuentran agrupados en las ecuaciones del modelo matemático (ecs. 3.11-3.12). El sobrepotencial por resistencia óhmica (ec. 2.5) es considerado en los potenciales de la fase sólida y membrana (ecs. 3.9-3.10). Y la forma en que están acopladas estas ecuaciones a la parte de dinámica de fluidos es por medio de la ecuación de flujo difusivo/producción de especies (ec. 3.20) que involucra tanto el término de densidad como los términos de concentración, estos últimos calculados con la ecuación de transporte de especies (ec. 3.6).

Las consideraciones del modelo fueron las siguientes:

- Flujo laminar y Condiciones en estado estacionario
- La membrana es impermeable a los gases
- Medios porosos isotrópicos
- El flujo protónico es uni-dimensional (a través del ensamble membrana/electrodos)
- Distribución de catalizador uniforme

3.4. Solución numérica de las ecuaciones

Las ecuaciones presentadas anteriormente describen en gran parte todos los procesos involucrados en el funcionamiento de la celda de combustible; sin embargo, la mayoría de estas no pueden resolverse analíticamente (sólo en casos especiales), por lo que es necesario recurrir a soluciones numérica que emplean *métodos de discretización*, los cuales consisten en aproximar las ecuaciones diferenciales parciales a un sistema de ecuaciones algebraicas y que posteriormente son resueltas en una computadora por medio de algún método iterativo. En Fluent se trabaja con dos métodos numéricos: el segregado y el acoplado; los cuales emplean un proceso de discretización similar (volumen-finito), pero la aproximación usada para linealizar y resolver las ecuaciones discretizadas son diferentes. El método segregado consiste en especificar un flujo de masa y una solución inicial para el inicio de las iteraciones. El método acoplado trabaja con condiciones periódicas (que no es el caso) para resolver las ecuaciones en sistemas simétricos. A continuación se da una descripción más detallada de este método.

Método Segregado: Este método numérico resuelve secuencialmente las ecuaciones de flujo de fluidos. Debido a que estas ecuaciones son no lineales (acopladas) se tienen que efectuar algunas iteraciones de la solución enlazada antes de que se obtenga la solución corregida. Cada paso de esta iteración se describe a continuación y se muestra en el diagrama de la figura 3.2.

1. Se proponen valores iniciales de flujos másicos, fracciones masa (y_i), presión (p), temperatura (T) y los potenciales de celda (ϕ_{sol} y ϕ_{mem}), los cuales serán actualizados conforme se van resolviendo las ecuaciones.
2. Las ecuaciones de momento para u , v y w son resueltas en orden usando los valores iniciales de la presión y los flujos de masa en las caras de cada volumen de control para actualizar el campo de velocidad.
3. Puesto que las velocidades obtenidas en el paso 2 pueden no satisfacer la ecuación de continuidad localmente, se deriva una ecuación de *Poisson* para la corrección de presión de las ecuaciones linealizadas de continuidad y momento. Esta ecuación de corrección de presión se resuelve para obtener las correcciones necesarias de los campos de presión, velocidad y flujos de masa, tales que, la ecuación de continuidad se satisface.
4. Cuando es apropiado las ecuaciones escalares del modelo electroquímico, energía y especies se empiezan a resolver usando los valores actuales de las otras variables.
5. Se realiza una revisión de la ecuación establecida para la convergencia.

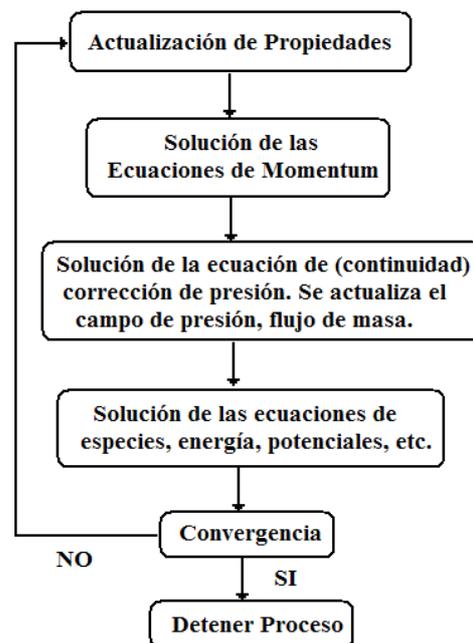


Figura 3.2: Diagrama de solución del método segregado

3.5. Modelo Computacional

En este capítulo se presenta el procedimiento para elaboración de los modelos en 3D con diferente configuración de canales, la selección de la malla, las condiciones de frontera y por último se presenta la metodología que se utilizó para llevar a cabo el estudio del transporte de masa en la celda de combustible PEM.

Para el desarrollo de este trabajo se utilizó el preprocesador (Gambit 2.3) como software de diseño y el código de computadora comercial CFD (Fluent 6.2.13) con el módulo de Celdas de Combustible para realizar las simulaciones.

3.5.1. Geometría

En la actualidad existen una infinidad de diseños de configuraciones de canales que son usadas en los platos bipolares como distribuidor de flujo; sin embargo, la mayoría de estas siguen un patrón que se puede agrupar en cuatro configuraciones básicas, las cuales son mostradas en la Figura 3.3.

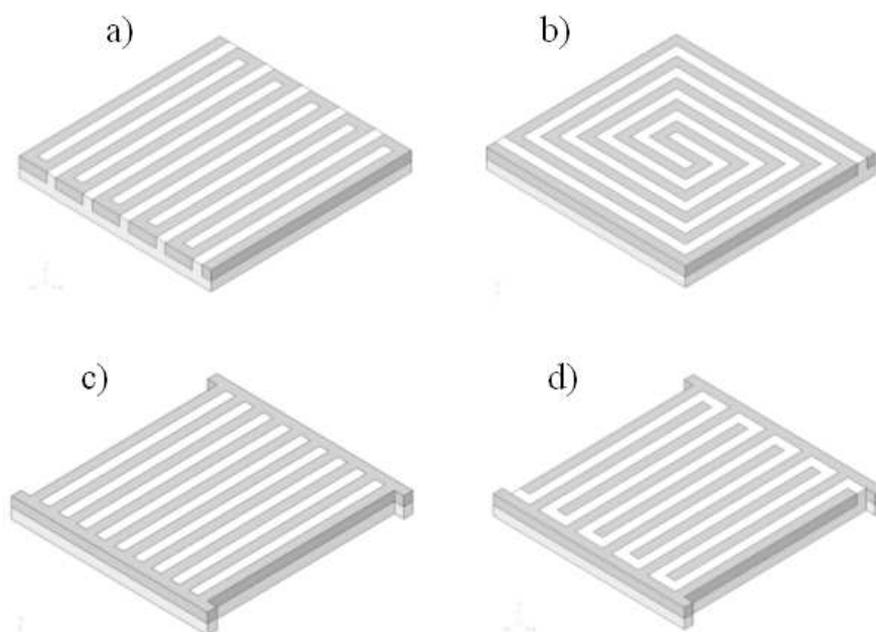


Figura 3.3: Configuraciones de canales. a) Serpentin, b) Espiral, c) Conectado, d) Interdigitado.

El diseño de la celda experimental *Electrochem* (EFC05-01SP) sigue el patrón de la configuración de serpentin pero con tres canales en paralelo (Figura 3.4). Tomando como referencia a la celda experimental y con la finalidad de realizar una comparación adecuada entre cada diseño se utilizaron las dimensiones de la figura 3.5 con un área del ensamble membrana/electrodos de 22 x 21 mm.

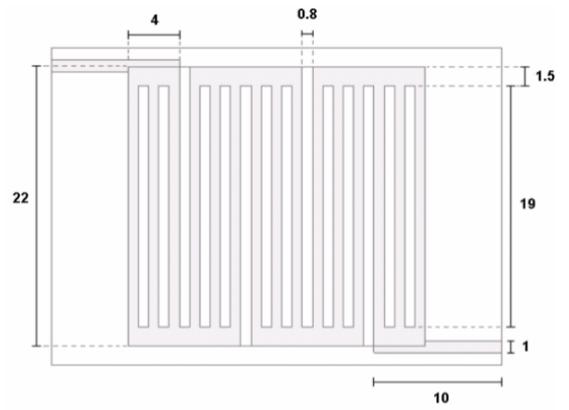
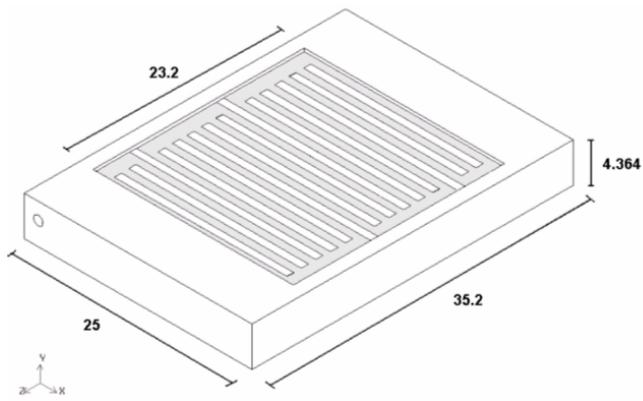


Figura 3.4: Dimensiones del diseño de serpentin triple. (mm)

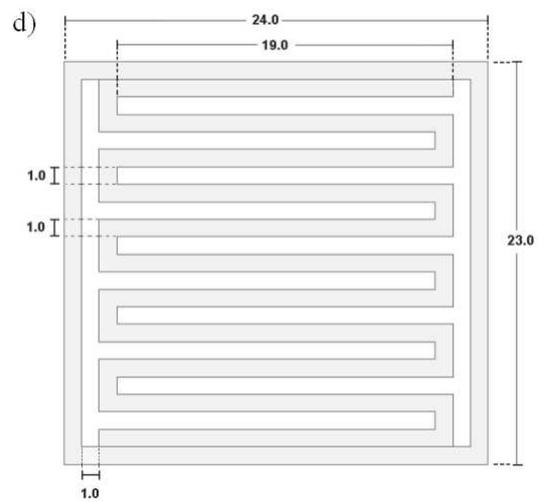
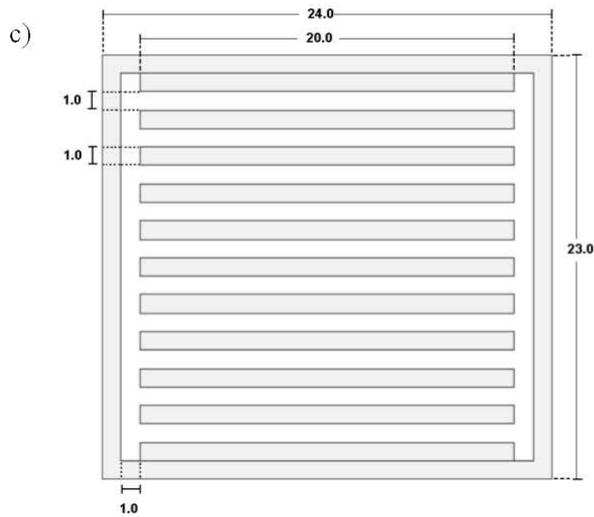
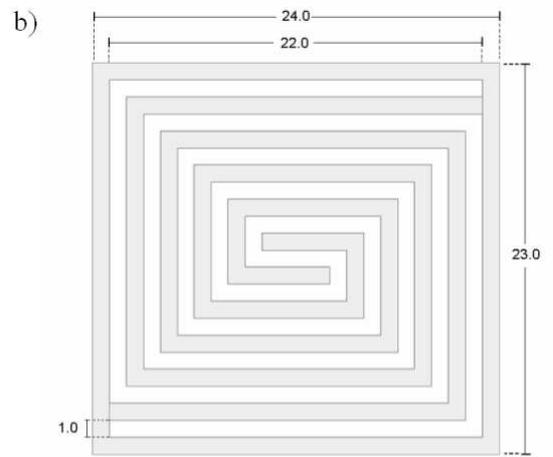
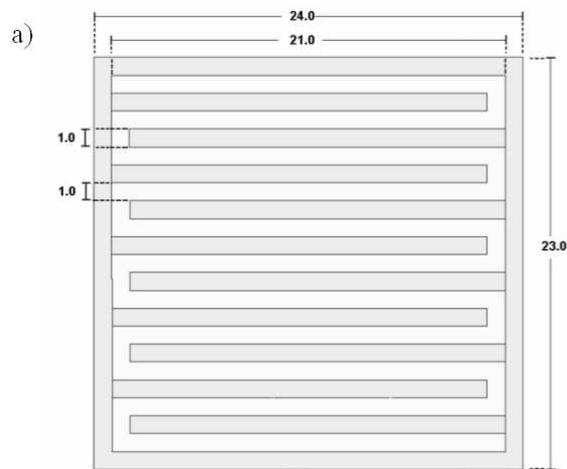


Figura 3.5: Dimensiones de los diseños: a) serpentin, b) espiral, c) conectado, d) interdigitado. (mm)

3.5.2. Malla

La malla generada para los cinco diseños fue la de tipo *Hexaedral*, resultando con una cantidad aproximada de 507,000 nodos por modelo. El intervalo de celda que se utilizó para cada componente fue el siguiente: canales y platos bipolares (0.2), difusores de gas (0.08), membrana y capas catalizadoras (0.02). Este intervalo fue el que mostró mejores resultados después de realizar un estudio con cinco tamaños de malla diferentes.

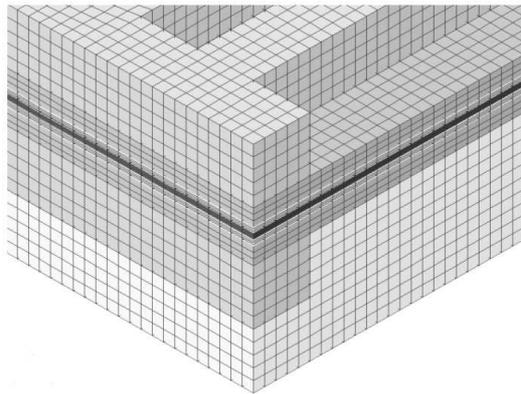


Figura 3.6: Malla Hexaedral utilizada en los modelos (mm).

3.5.3. Condiciones de Frontera (Gambit)

Las condiciones de frontera y los tipos de zonas establecidas en Gambit fueron las siguientes:

1. Interior: Interfases (ánodo/cátodo) membrana, capas catalizadoras y difusores.
2. Mass flow inlet: Entradas de gas (Hidrógeno/Oxígeno).
3. Pressure Outlet: Salidas de gas (Hidrógeno/Oxígeno).
4. Wall: Defaults y Contactos externos (ánodo y cátodo).

Para el tipo de zonas (volúmenes) todos los componentes se especificaron como "*Fluid*".

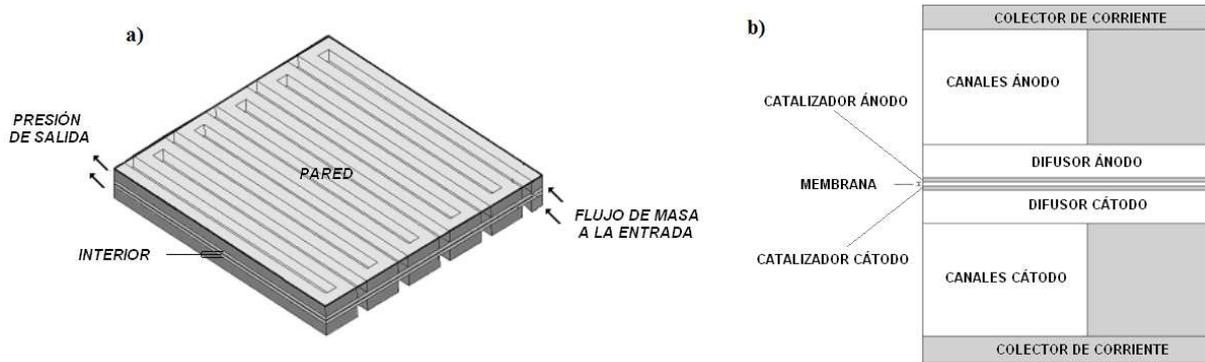


Figura 3.7: a) Condiciones de Frontera y b) Zonas del modelo de Simulación.

3.5.4. Condiciones de Frontera (Fluent)

Las condiciones de frontera y las propiedades de los materiales empleadas en los modelos de simulación (Tablas 3.1 y 3.2) están basadas en los valores utilizados de la celda experimental *Electrochem* (EFC05-01SP) y los de la literatura. [22, 36, 37, 38]

Tabla 3.1 Condiciones de frontera usadas en el modelo.

CONDICIONES DE FRONTERA / Valores Experimentales		
Flujos	Ánodo	Cátodo
Flujo de Masa a la Entrada (kg/s)	1.1×10^{-7}	1.9×10^{-6}
Fracción Masa de H_2 , O_2	0.1 - 0.9	0.18 - 0.8
Fracción Masa de H_2O	0.1 - 0.7	0.05 - 0.2
Temperatura (K)	298	298
Potencial Fase Sólida (UDS 0)	0	0 - 0.9
Carga Aplicada (Ohms)	0 - 20	0 - 20
Voltaje a Circuito Abierto	0.95	0.95
Densidad de Corriente de Ref. (A/m^3)	1.00×10^9	400,000
Exponente de Concentración	0.5	1
Coefficiente de Intercambio	1	1.25
Difusividad: H_2 , H_2O y Otros	8.00×10^{-5}	8.00×10^{-5}
O_2		3.50×10^{-5}

Las propiedades de cada componente se presentan en la tabla 3.2. tabla:

Tabla 3.2 Propiedades de los materiales.

		Plato Bipolar	Difusor	Catalizador	Membrana
PROPIEDAD	Unidad	<i>Grafito</i>	<i>Carbón</i>	<i>Carbón</i>	<i>Nafion</i>
Densidad	(kg/m^3)	1,900	2,267	2,267	-
Cp	(J/kg-K)	810	710	710	-
Conductividad Térmica	(W/m-K)	470	952	952	-
Conductividad Eléctrica	(1/ohm-m)	200,000	61,000	61,000	-
Espesor	(m)	0.002	0.0003	0.00001	0.00001
Porosidad	(%)	-	0.75	0.2	-
Resistencia Viscosa	($1/m^2$)	-	3.75×10^{10}	5.00×10^{13}	-
Relación Superficie-Área	($1/m$)	-	-	200,000	-
Peso Equivalente	($kg/kmol$)	-	-	-	1,100
Coef. Conducción Prot.	-	-	-	-	1

3.6. Metodología

La metodología a seguir para llevar a cabo el análisis completo y detallado del fenómeno de transporte de masa fue la siguiente:

1. Realizar un análisis de presión en los canales y en la interfase difusor/capa catalizadora para cada diseño del distribuidor de flujo con la finalidad de encontrar la configuración que distribuya mejor los gases en el interior de la celda.
2. Llevar a cabo un análisis del porcentaje de humedad en los gases para conocer el efecto que tiene sobre las condiciones de humectación de la membrana y difusores de gas.
3. Determinar la concentración adecuada de oxígeno en el flujo de alimentación del lado del cátodo para los casos donde se utilice aire como oxidante.

3.6.1. Análisis de Presión

Un aumento en la presión de los gases en el interior de la celda puede beneficiar su desempeño, puesto que la presión parcial, la solubilidad del gas y la velocidad de transferencia de masa son mayores. Sin embargo, un mal control de esta variable también puede afectar a la densidad de corriente de intercambio (por la presión de oxígeno) y al potencial de equilibrio.[21]

La distribución adecuada de los gases en los canales de flujo y en la interfase difusor/capa catalizadora influye considerablemente en la cantidad de electrones que son generados en el lado del ánodo de la celda (suponiendo un área catalítica activa efectiva).

De tal manera, se realizará un estudio de este parámetro para las configuraciones de canales en los modelos: a) Serpentín simple, b) serpentín triple, c) espiral, d) conectado y e) interdigitado. Este incluye un análisis de contornos de presión en los canales y la interfase difusor/capa catalizadora.

3.6.2. Análisis de Humedad en los Gases

Como se mencionó en el capítulo anterior, la humedad en los gases es un factor que influye considerablemente en el desempeño de la celda. Si la humedad es baja existirá una mayor concentración de hidrógeno y oxígeno a la entrada de la celda y permitirá que se lleve a cabo una reacción más rápida en la capa catalizadora pero de la otra forma la membrana podría permanecer mejor hidratada y favorecer el arrastre osmótico. Por lo tanto, es indispensable realizar un análisis de estos parámetros para determinar que porcentaje de humedad es el adecuado para tener un aprovechamiento total del combustible y oxidante para tener un buen desempeño de la celda.

El estudio se realizó comparando curvas de polarización para diferentes humedades y analizando por medio de contornos de concentración el proceso de transporte de masa que se lleva a cabo en las interfases difusores/capas catalizadoras/membrana. Entonces, para conocer la influencia que tiene la humedad en los gases reactantes de la celda se consideraron tres casos: Humedad baja, Humedad Media y Humedad Alta.

Tabla 3.3 Valores utilizados para el análisis de humedad.

Baja		Media		Alta	
<i>Ánodo</i>		<i>Ánodo</i>		<i>Ánodo</i>	
H_2	0.7	H_2	0.7	H_2	0.7
H_2O	0.3	H_2O	0.3	H_2O	0.3
<i>Cátodo</i>		<i>Cátodo</i>		<i>Cátodo</i>	
O_2	0.25	O_2	0.25	O_2	0.25
H_2O	0.05	H_2O	0.05	H_2O	0.05

3.6.3. Análisis de Concentración de Oxígeno

En cuanto a la concentración de oxígeno para el flujo de alimentación en el cátodo, se utiliza comúnmente aire como oxidante en lugar de oxígeno; de tal modo el desempeño de la celda se verá afectado a menos que se aplique la suficiente presión en la entrada del gas como para que la concentración de oxígeno aumente, alcanzando así la capa catalizadora.

De esta manera, se propuso realizar un análisis sobre la concentración de oxígeno en el flujo del cátodo con la finalidad de poder determinar una concentración óptima de este gas para el caso donde se utilice aire como oxidante. En las siguientes tablas se muestran estos valores.

Tabla 3.4 Valores utilizados para el análisis de concentración de oxígeno.

Muy Baja		Baja		Media		Alta	
<i>Ánodo</i>		<i>Ánodo</i>		<i>Ánodo</i>		<i>Ánodo</i>	
H_2	0.5	H_2	0.5	H_2	0.5	H_2	0.5
H_2O	0.5	H_2O	0.5	H_2O	0.5	H_2O	0.5
<i>Cátodo</i>		<i>Cátodo</i>		<i>Cátodo</i>		<i>Cátodo</i>	
O_2	0.2	O_2	0.4	O_2	0.6	O_2	0.8
H_2O	0.05	H_2O	0.05	H_2O	0.05	H_2O	0.05

Los valores están basados en el estudio realizado por K. W. Lum y J. J. McGuirk [22] y el porcentaje de humedad establecido para el flujo del ánodo fue seleccionado con base en los resultados previamente obtenidos en el análisis anterior.

Capítulo 4

Resultados

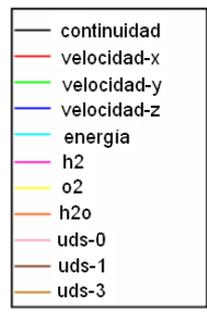
En este capítulo se presentan los resultados obtenidos de la simulación para los cinco modelos estudiados; los cuales se dividen en 5 secciones: 1) Gráficas de residuales para cada modelo; 2) Contornos de presión en los canales de flujo y en el difusor de gas, 3) Contornos de humedad en el cátodo/membrana y de densidad de corriente para el ánodo, 4) Contornos de concentración de hidrógeno/oxígeno en los electrodos y de densidad de corriente y 5) Curvas de polarización para las condiciones de operación planteadas.

4.1. Residuales

El número de iteraciones a las cuales las soluciones de las ecuaciones llegaron a la convergencia fue de 140 a 700; sin embargo, este número variaba en función del voltaje establecido, entre menor era el voltaje mayor número de iteraciones se requerían para estabilizar el modelo y pudiera llegar a la convergencia. El criterio de convergencia establecido inicialmente fue de 1×10^{-3} , después se redujo a 1×10^{-4} para verificar la precisión de los resultados y estos últimos fueron similares a los del primer criterio. Por tanto, el valor utilizado en las simulaciones fue el de 1×10^{-3} para reducir el tiempo de iteración, tomando en cuenta la capacidad del CPU.

En las figuras (4.1-4.5) se muestran las gráficas de los residuales para cada modelo de celda, en éstas se puede apreciar la estabilidad de las soluciones para cada variable, excepto para la del hidrógeno que en el caso del diseño de serpentín triple, espiral y conectado mostró mucha inestabilidad. También, cabe mencionar que en los modelos se utilizaron tres tamaños de malla y conforme se iba reduciendo el tamaño de celda las soluciones tendían a ser más cercanas a las condiciones de frontera establecidas; por lo tanto, el modelo fue consistente.[39]

(Criterio de Convergencia 1×10^{-4})



Residuales¹

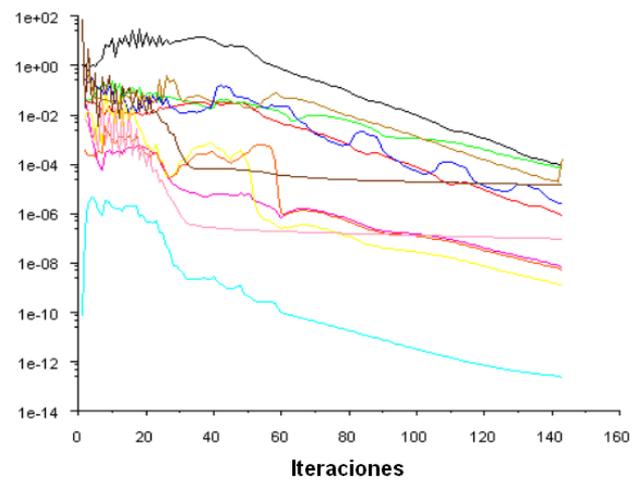


Figura 4.1 Modelo de Serpentin Simple.

Residuales¹

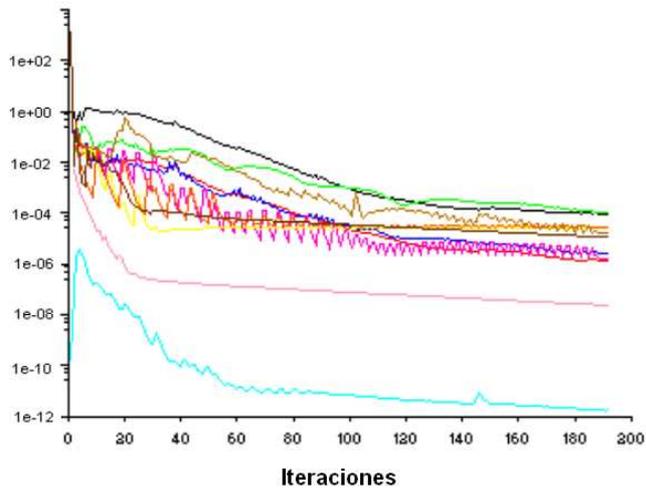


Figura 4.2 Modelo de Serpentin Triple.

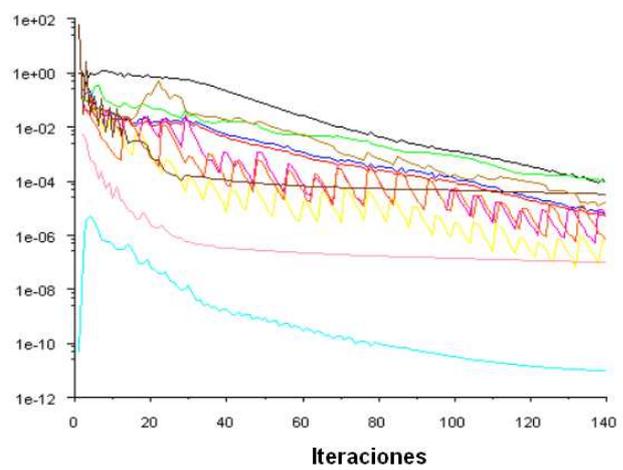


Figura 4.3 Modelo en Espiral.

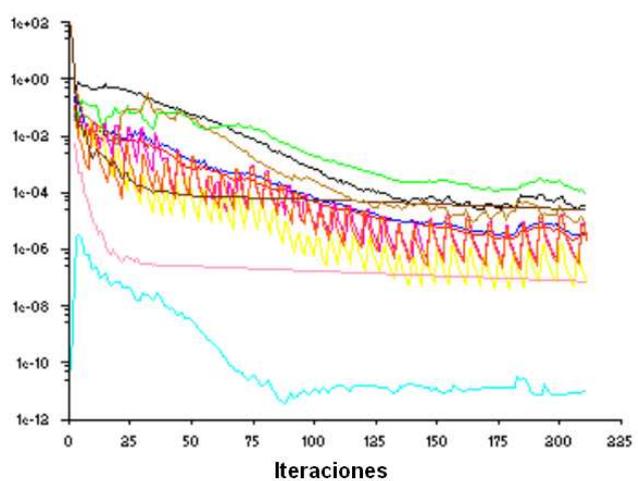


Figura 4.4 Conectado.

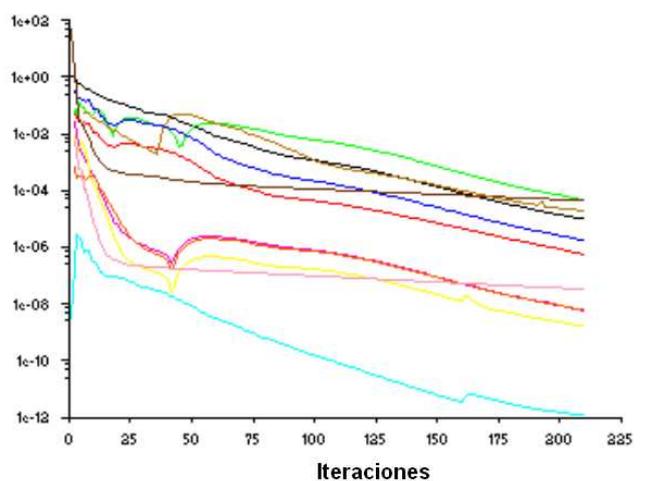


Figura 4.5 Interdigitado.

¹UDS-0: Potencial en la Fase Sólida, UDS-1: Potencial en la Fase membrana, UDS-3: Contenido de Agua

4.2. Contornos de Presión

La presión y distribución de los gases en el interior de la celda influye fuertemente en su desempeño. Una distribución homogénea de estos gases en los electrodos se ve reflejado en la cantidad de electrones que pueden ser liberados en el ánodo. Siendo así la zona de la interfase (GDL/CL) "difusor de gas/capa catalizadora" la más importante en términos de presión.

4.2.1. Diseño de Serpentín Simple

Para la configuración de serpentín simple se observó que el flujo de gas que pasa a través de cada canal se ve afectado por el cambio repentino de la dirección de los canales, provocando así una caída de presión que se ve reflejada sobre la superficie del catalizador; ésta disminuye en forma gradual desde la entrada del gas hasta su salida (Figuras 4.6-4.9).

Intervalo de Presión: 0 - 25 psi

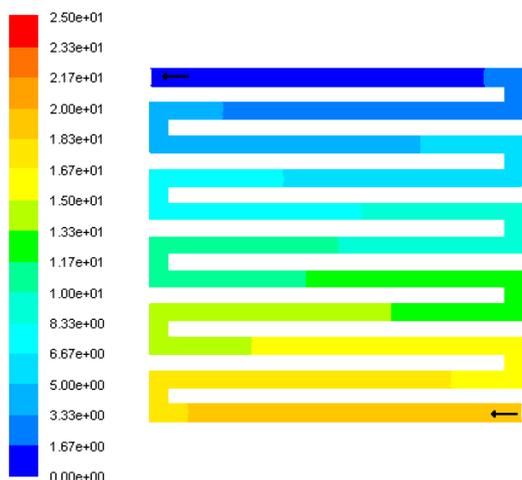


Figura 4.6 Canales (ánodo)

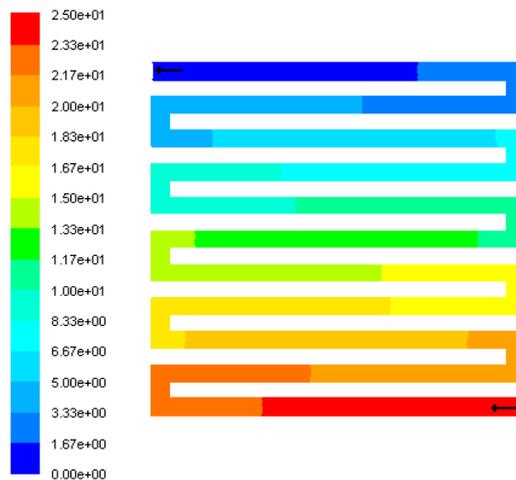


Figura 4.7 Canales (cátodo)

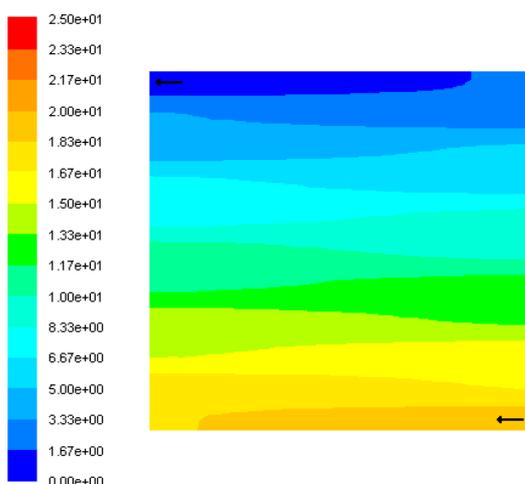


Figura 4.8 Interfase GDL/CL (ánodo)

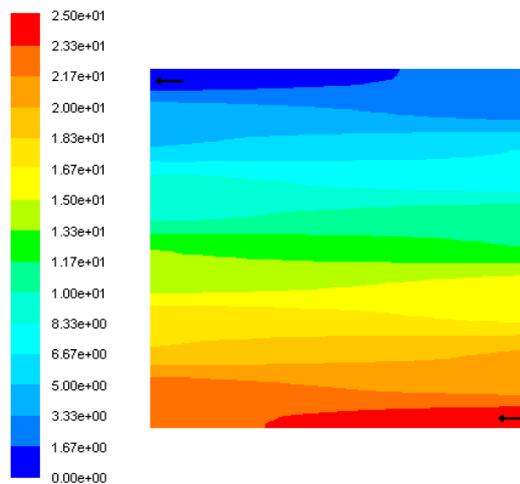


Figura 4.9 Interfase GDL/CL (cátodo)

Promedio: 10.01 psi

Promedio: 12.49 psi

4.2.2. Diseño de Serpentín Triple

El diseño de la Celda Electrochem” muestra una mejoría comparado con el diseño anterior, la configuración de tres canales favorece la distribución del gas en la superficie del catalizador (Fig. 4,12 - 4.13) pero la reducción gradual de presión en los canales es un patrón para estos diseños. Como se puede observar en las figuras 4.10 -4.11, la presión del hidrógeno disminuye gradualmente de 14 a 9 Psi en cinco secciones.

Intervalo de Presión: 0 - 25 psi

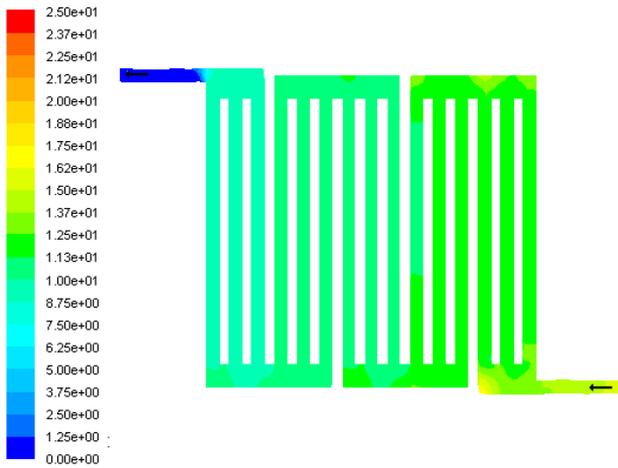


Figura 4.10 Canales (ánodo)

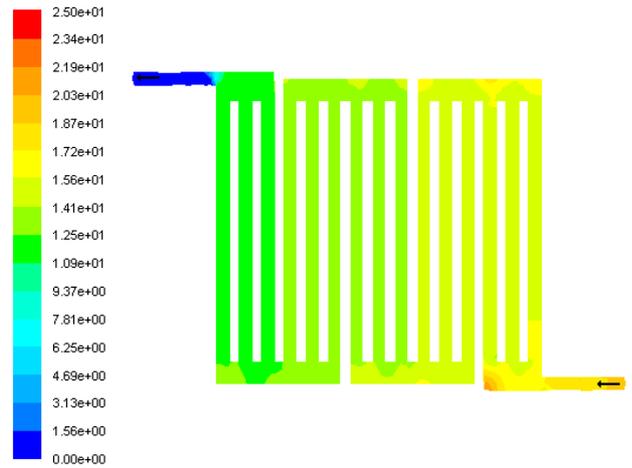


Figura 4.11 Canales (cátodo)

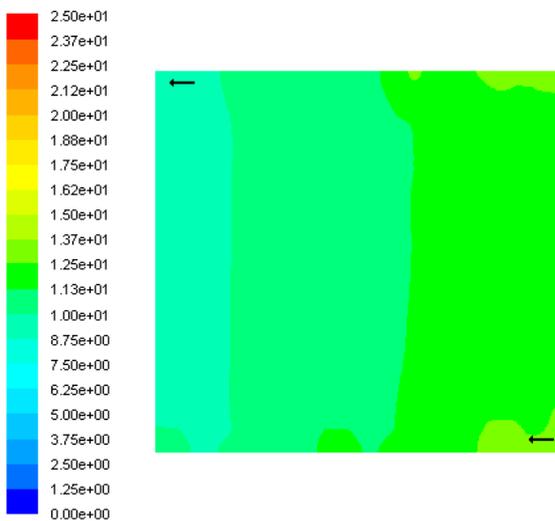


Figura 4.12 Interfase GDL/CL (ánodo)

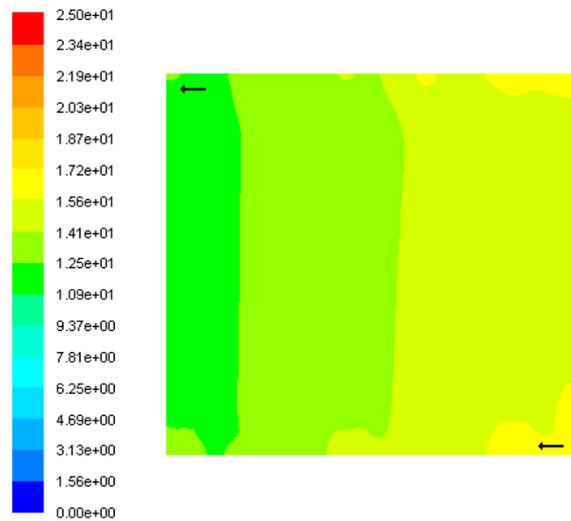


Figura 4.13 Interfase GDL/CL (cátodo)

Promedio: 11.06 psi

Promedio: 13.89 psi

4.2.3. Diseño en Espiral

Este diseño presenta mejores resultados que los de serpentín, sus canales con cambio de dirección de 90° (Fig. 4.14 - 4.15) influyen positivamente en la distribución de los gases, tanto en el interior como en la superficie. Esta configuración distribuye el flujo principalmente en el área central del difusor (Fig. 4.16 - 4.17) adaptándose a la geometría cuadrada de la celda; siendo así una de las mejores configuraciones.

Intervalo de Presión: 0 - 25 psi

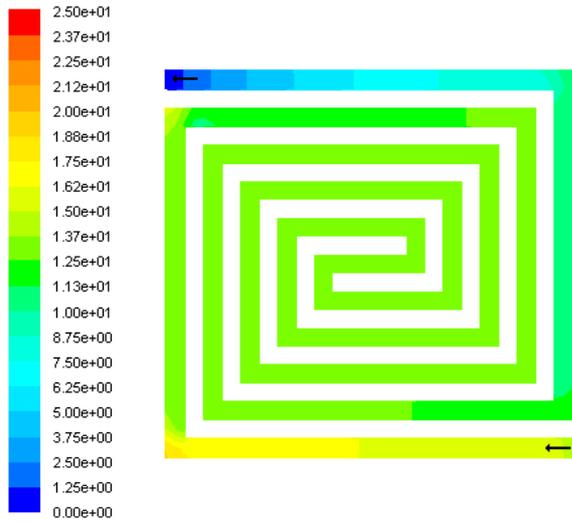


Figura 4.14 Canales (ánodo)

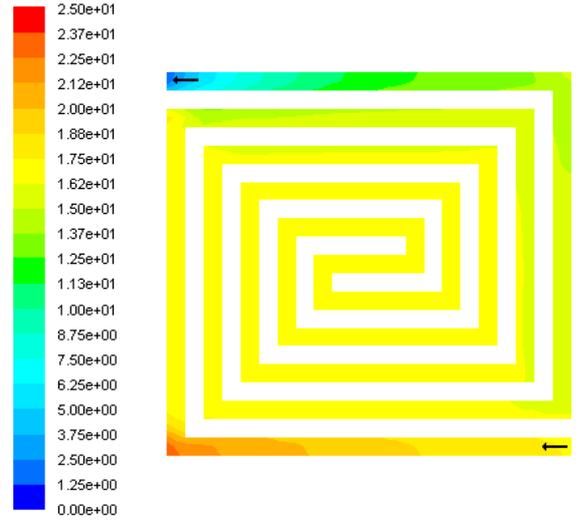


Figura 4.15 Canales (cátodo)

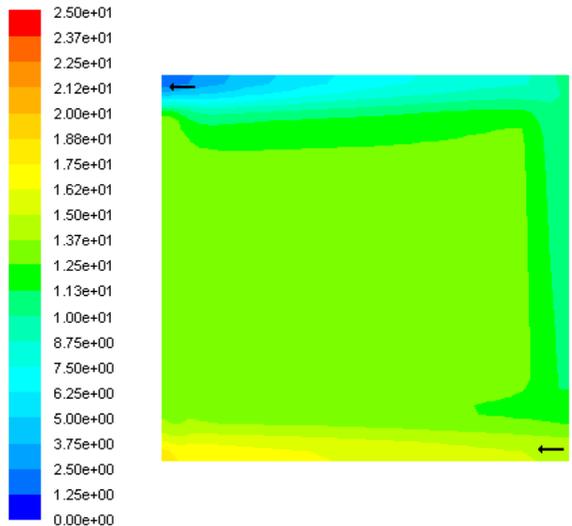


Figura 4.16 Interfase GDL/CL (ánodo)

Promedio: 12.39 psi

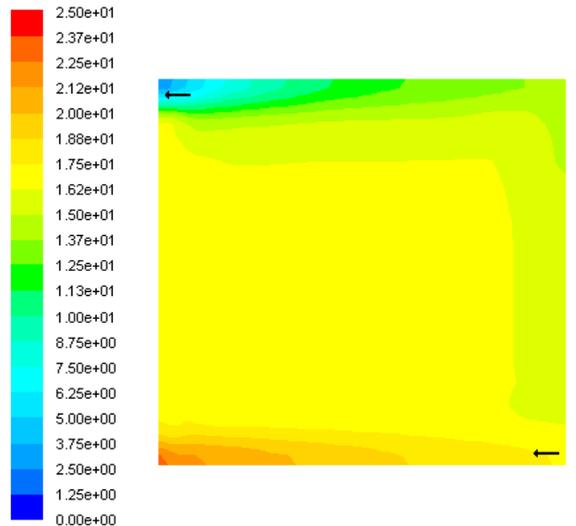


Figura 4.17 Interfase GDL/CL (cátodo)

Promedio: 16.06 psi

4.2.4. Diseño con Canales Conectados

El diseño con canales conectados es una configuración que ayuda a distribuir el flujo de manera transversal en los canales que se encuentran perpendicularmente al canal de alimentación (Fig. 4.18 - 4.19). Este diseño muestra mejor distribución de gases (en la superficie) que los diseños de serpentín. Sin embargo, la distribución de gases para el diseño en espiral es más uniforme.

Intervalo de Presión: 0 - 25 psi

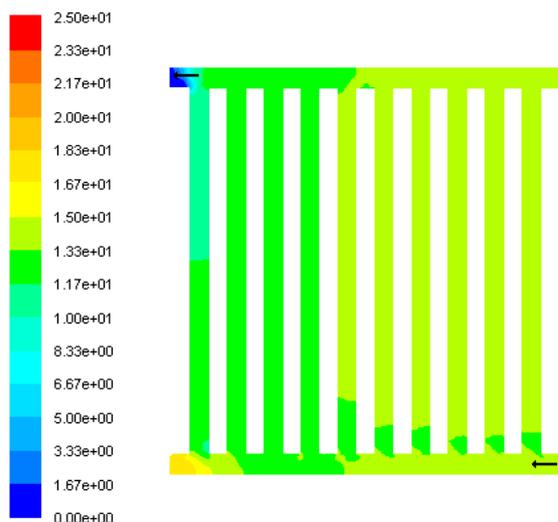


Figura 4.18 Canales (ánodo)

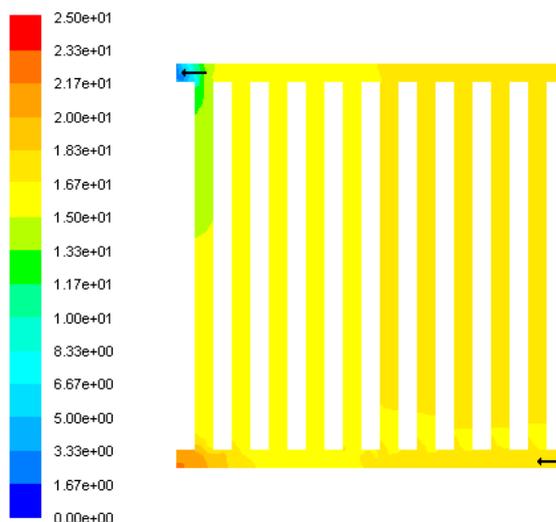


Figura 4.19 Canales (cátodo)

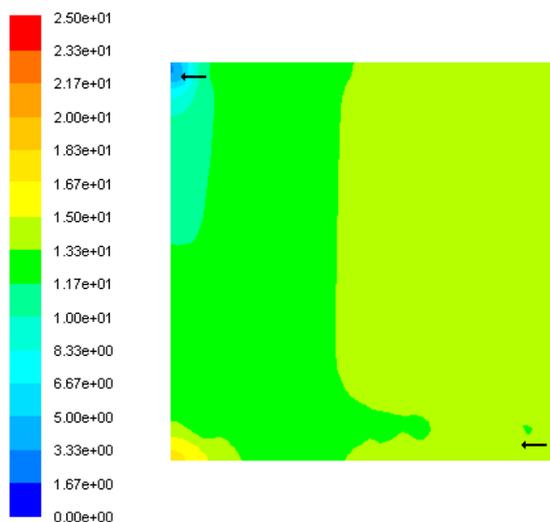


Figura 4.20 Interfase GDL/CL (ánodo)

Promedio: 13.71 psi

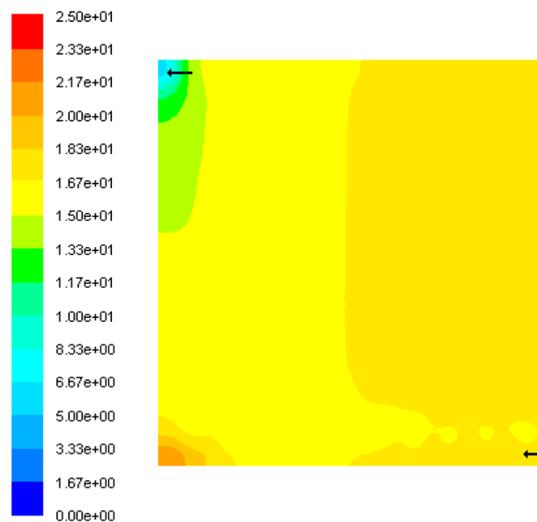


Figura 4.21 Interfase GDL/CL (cátodo)

Promedio: 16.45 psi

4.2.5. Diseño Interdigitado

Esta configuración de canales similar a la de canales conectados fue diseñada para aprovechar las propiedades que tienen los medios porosos que es "la interconexión de conductos y huecos del material con los canales". El gas entra en la esquina inferior derecha (Figs. 4.22 - 4.23) y se distribuye como en el diseño de canales enlazados, después choca con las paredes de lo canales y provoca que este salga a través del medio poroso, la parte que no reaccione con el catalizador será obligada a encontrar una salida en sentido opuesto y ésta será a través del medio poroso para llegar así a los canales vacíos del colector. Este diseño muestra buenos resultados, similares al diseño anterior pero distinguiéndose favorablemente por el efecto que causa el uso del material poroso.

Intervalo de Presión: 0 - 25 psi

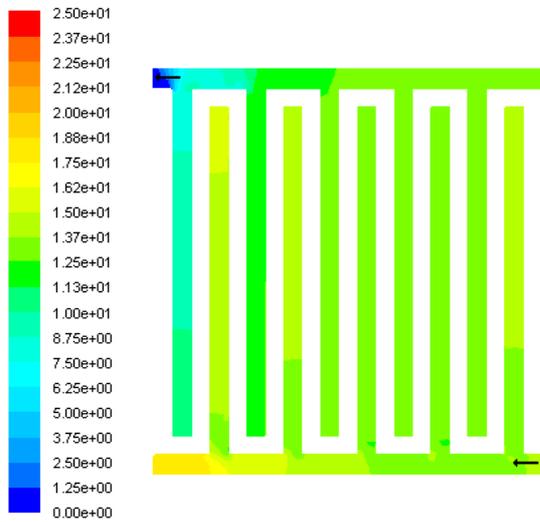


Figura 4.22 Canales (ánodo)

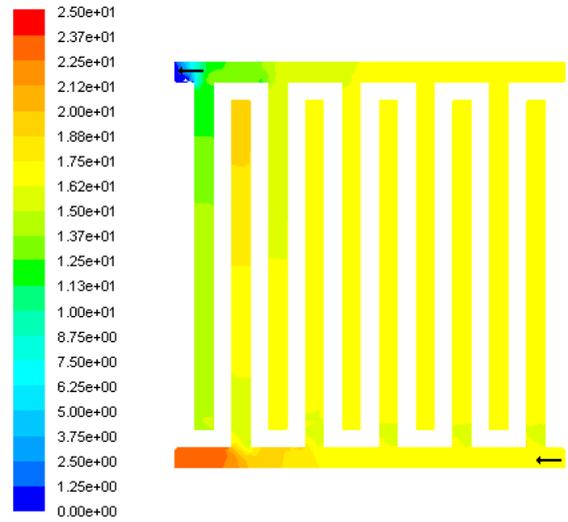


Figura 4.23 Canales (cátodo)

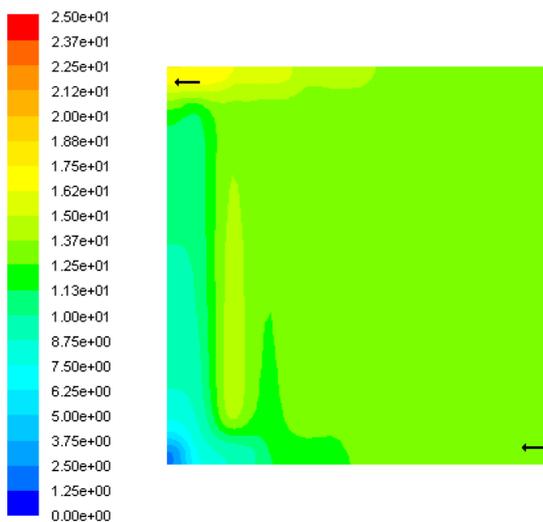


Figura 4.24 Interfase GDL/CL (ánodo)

Promedio: 12.93 psi

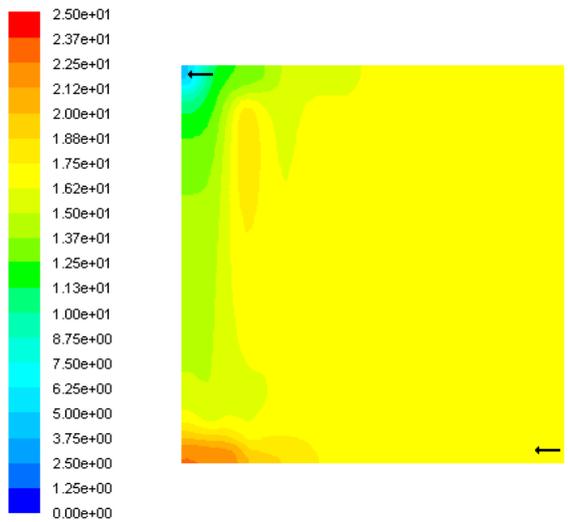


Figura 4.25 Interfase GDL/CL (cátodo)

Promedio: 16.43 psi

En la literatura este diseño se reporta como el modelo que ofrece mayor cantidad de corriente por área de canales (en comparación con los demás modelos) y se debe principalmente al obstáculo que se le impone al obligar la acumulación del gas en la zona catalítica, así hasta que alcance una presión máxima de saturación y reaccione la mayor cantidad gas posible en el electrodo. Algunos de estos estudios que respaldan la teoría son los reportados por [9, 13].

4.3. Contornos de Humedad

Los contornos obtenidos para el análisis de humedad se clasifican de la siguiente manera:

1. Humedad Baja: 30 % Ánodo y 5 % Cátodo.
2. Humedad Media: 50 % Ánodo y 10 % Cátodo.
3. Humedad Alta: 70 % Ánodo y 20 % Cátodo

Cabe mencionar que los resultados presentados a partir de ésta sección son sólo para el modelo en espiral, puesto que es más práctico para analizar y los datos obtenidos pueden ser considerados para los demás modelos (excepto para el interdigitado por el tipo de configuración). Así también, el tiempo de convergencia es menor (aprox. 10 hrs). Los resultados que se presentan corresponden a un voltaje de 0.1 Volts, un rango de densidad de corriente de 0 - 0.7 A/cm^2 y un rango de porcentaje de humedad de 0 - 0.7; esto con la finalidad de hacer una comparación adecuada entre los resultados de cada análisis.

4.3.1. Humedad Baja

Para este rango de humedad la densidad de corriente máxima alcanzada fue de 0.85 A/cm^2 (Figura 4.26); siendo la más alta para este análisis. Así mismo, la distribución de corriente local para la interfase GDL/CL fue la que mostró mejores resultados, considerando así que un porcentaje de humedad del 30 % para el flujo de alimentación en el lado del ánodo y del 5 % para el cátodo es el adecuado para tener una mayor eficiencia de la celda. (Fig. 4.27)

En cuanto a la distribución de agua en los canales del ánodo (Fig. 4.28) hubo una disminución total en los primeros cinco canales, mucho antes de que este llegara al centro de la celda; esto nos indica que la membrana no podría depender a largo plazo de la hidratación que provee el flujo de hidrógeno para este porcentaje de humedad. Sin embargo, para el caso de los canales en el cátodo, la distribución de agua fue diferente debido a que en este electrodo ocurre la formación de agua por la reacción de reducción (Fig. 4.29 - 4.30). El porcentaje de humedad que se obtuvo en la membrana (Interfase CL/mem) fue del 10 al 30 %, distribuyéndose uniformemente. (Fig. 4.31)

4.3.2. Humedad Media

Para una humedad del 50% - 10% en el ánodo y cátodo respectivamente se obtuvo una densidad de corriente máxima de $0.84 A/cm^2$, (Figura 4.32) siendo relativamente la misma que para el porcentaje de humedad baja. La distribución de corriente local (Fig. 4.33) en la interfase GDL/CL del ánodo es similar a la anterior; sin embargo, se alcanza a distinguir una pequeña variación en el canal de entrada con un aumento de densidad de corriente y una disminución en la parte superior en el canal de salida (comparado con la anterior). Así mismo y en base a un cálculo de "*Average-Weighted-Area*" la densidad de corriente local que se obtuvo fue ligeramente superior al otro caso.

En la parte de los canales del ánodo (Fig. 4.34-4.35) la distribución de agua se comportó de manera similar; pero hubo un notable aumento de concentración de agua en los tres primeros canales y disminuyó totalmente mucho antes de que llegara al centro de la celda. El porcentaje de humedad que se mantuvo para los canales del cátodo y la interfase CL/mem estuvo dentro del rango del 13 - 35% siguiendo el mismo patrón de distribución anterior pero con un porcentaje más alto y mayor uniformidad (4.36 - 4.37); resultando así que la membrana permanezca mejor hidratada.

4.3.3. Humedad Alta

Para una humedad alta la densidad de corriente máxima fue de $0.748 A/cm^2$, (Figura 4.38) siendo así la más baja de los tres casos. Un aspecto importante a resaltar es el comportamiento de la curva para los voltajes de 0.1 y 0.2 volts, en los cuales se ve como afecta el sobrepotencial por concentración y las limitaciones por el transporte de masa. Esto quiere decir que tanto el hidrógeno como el oxígeno no tienen un libre acceso a la zona de catálisis, ya que el agua impide que lleguen hasta ahí. En cuanto a la distribución de corriente local es evidente la poca actividad electrónica en el centro de la celda y su distribución no fue homogénea (Fig. 4.39).

Para los canales del ánodo hubo un mayor porcentaje de humedad en la entrada de la celda pero fue consumiéndose por la membrana mucho más rápido que en los otros casos (Fig.4.40-4.41). La concentración de agua para la zona del cátodo obviamente fue mayor, mostrando buena distribución en la interfase CL/mem (Fig. 4.42 - 4.43) pero ésta particularidad afectó a la densidad de corriente por razones mencionadas anteriormente. Por lo tanto un porcentaje alto de humedad en los gases no favorece a la densidad de corriente que puede ser obtenida de la celda, sin embargo mantiene mejor hidratada a la membrana.

Humedad Baja

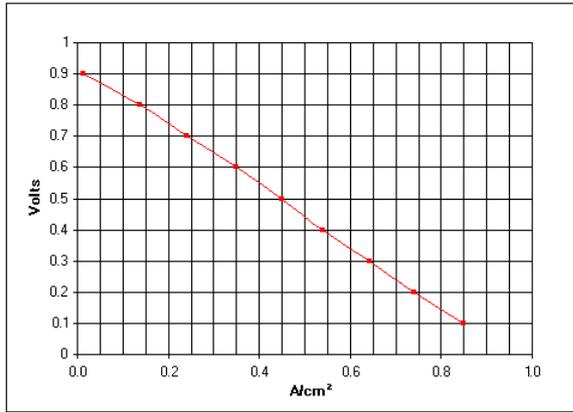


Figura 4.26 Curva de Polarización.

Densidad de Corriente 0 – 0.7A/cm²

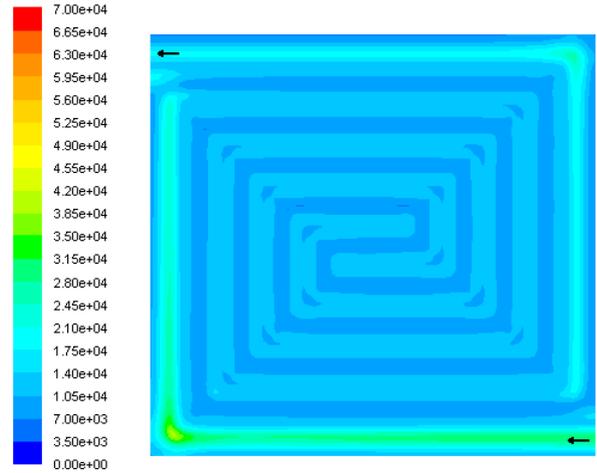


Figura 4.27 Interfase GDL/CL (ánodo)

Fracción Masa H₂O: 0 - 0.7

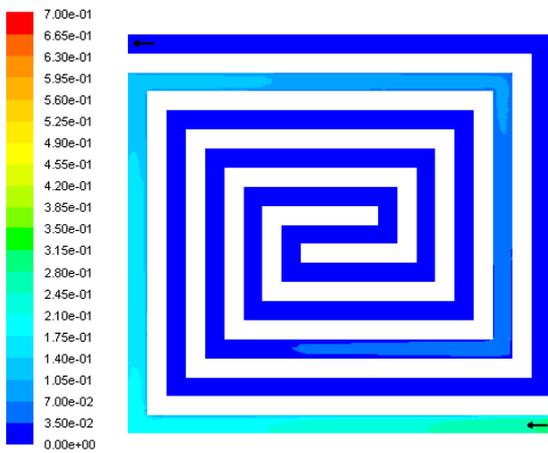


Figura 4.28 Canales (ánodo)

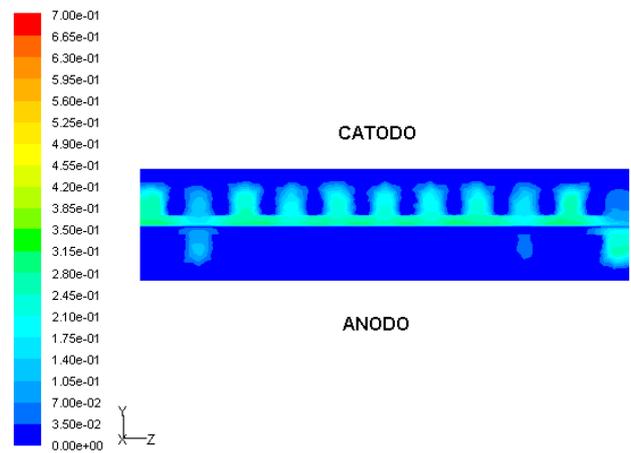


Figura 4.29 Corte transversal - canales

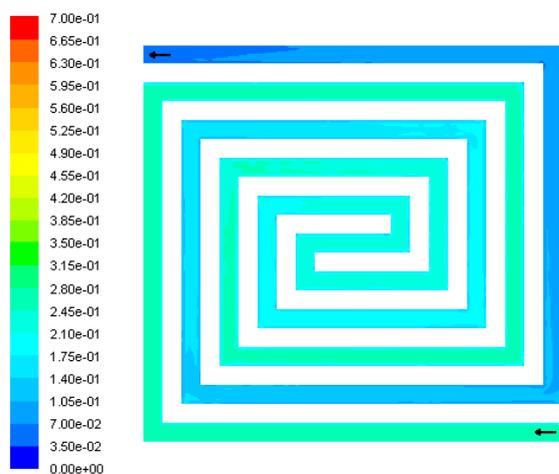


Figura 4.30 Canales (cátodo)

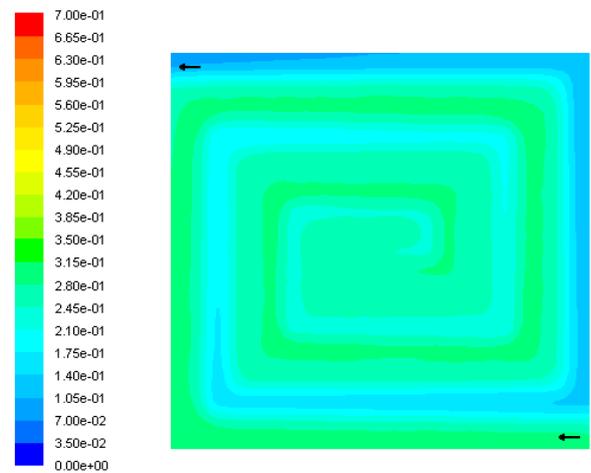


Figura 4.31 Interfase CL/mem (cátodo)

Humedad Media

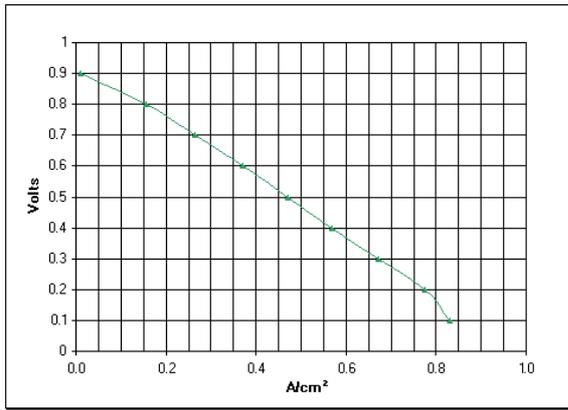


Figura 4.32 Curva de Polarización.

Densidad de Corriente 0 – 0.7A/cm²

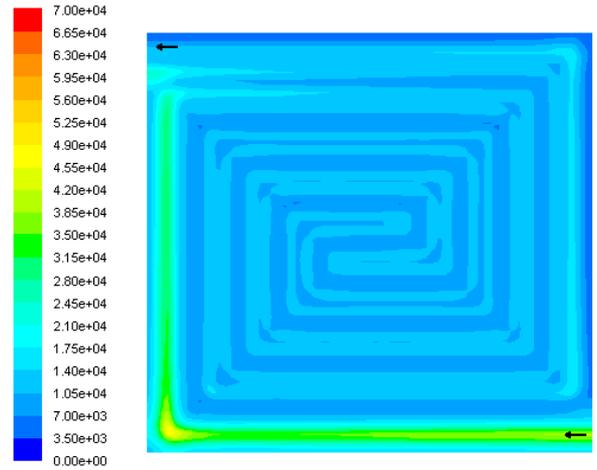


Figura 4.33 Interfase GDL/CL (ánodo)

Fracción Masa H₂O: 0 - 0.7

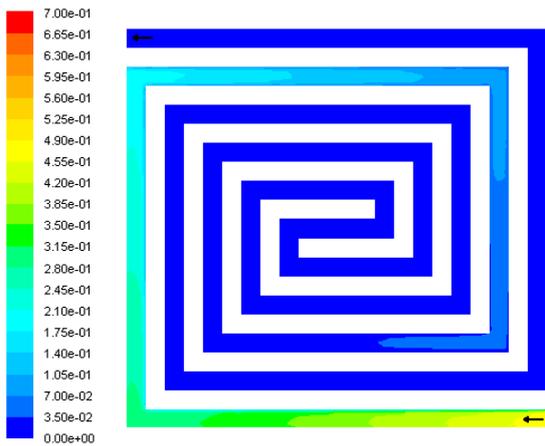


Figura 4.34 Canales (ánodo)

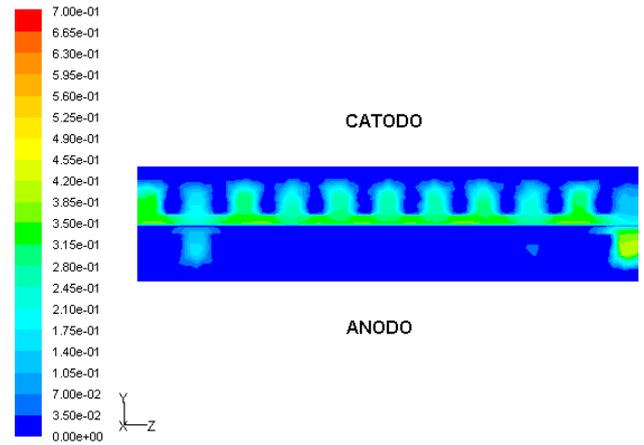


Figura 4.35 Corte transversal - canales

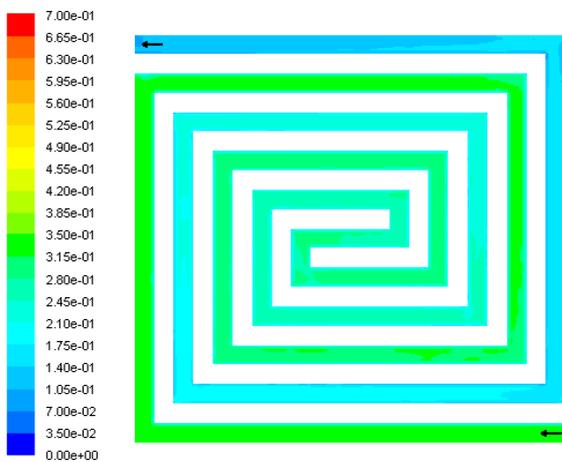


Figura 4.36 Canales (cátodo)

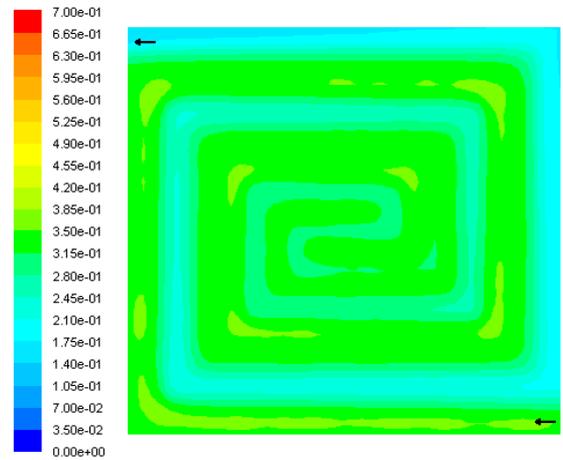


Figura 4.37 Interfase CL/mem (cátodo)

Humedad Alta

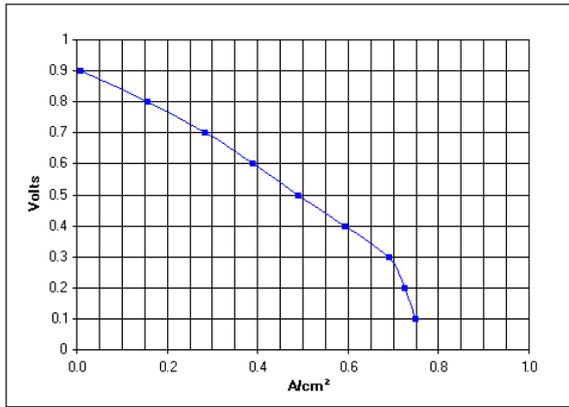


Figura 4.38 Curva de Polarización.

Densidad de Corriente 0 – 0.7A/cm²

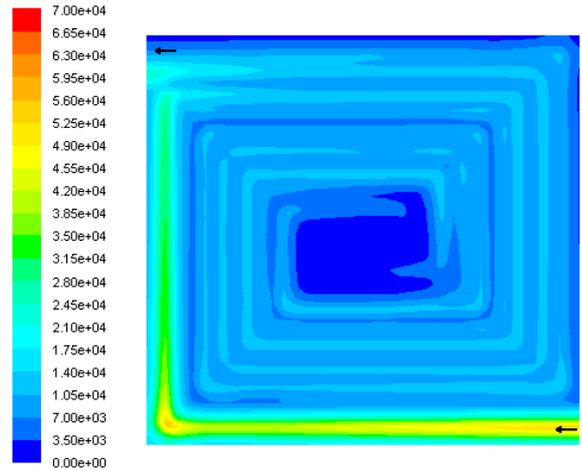


Figura 4.39 Interfase GDL/CL (ánodo)

Fracción Masa H₂O: 0 - 0.7

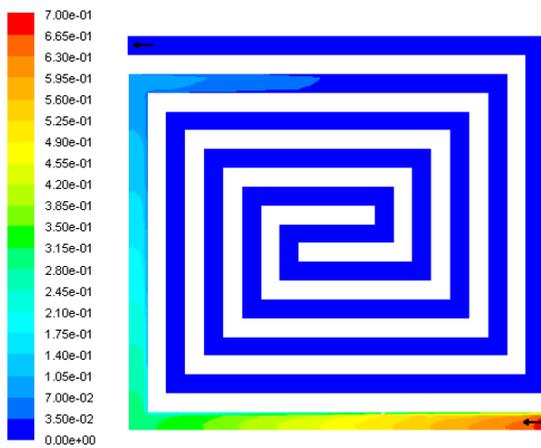


Figura 4.40 Canales (ánodo)

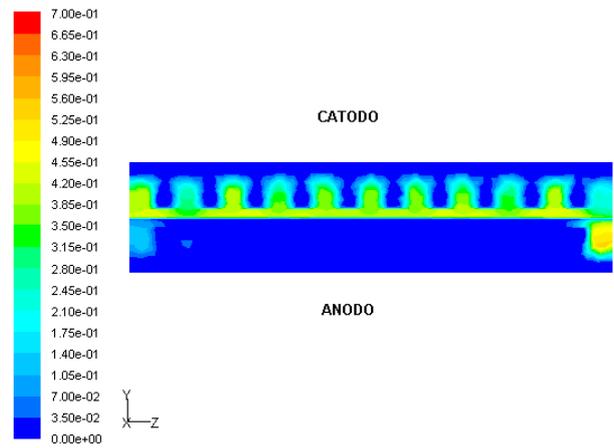


Figura 4.41 Corte transversal - canales

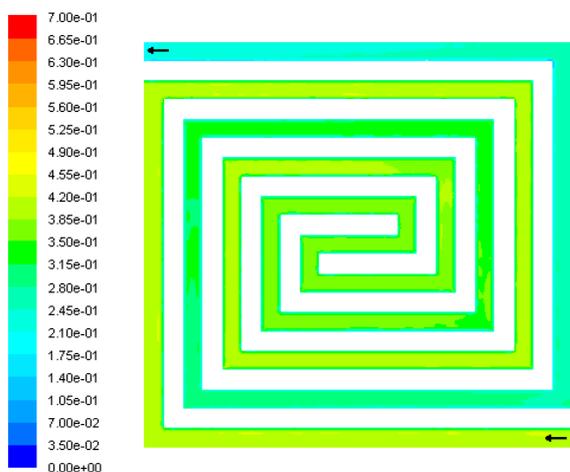


Figura 4.42 Canales (cátodo)

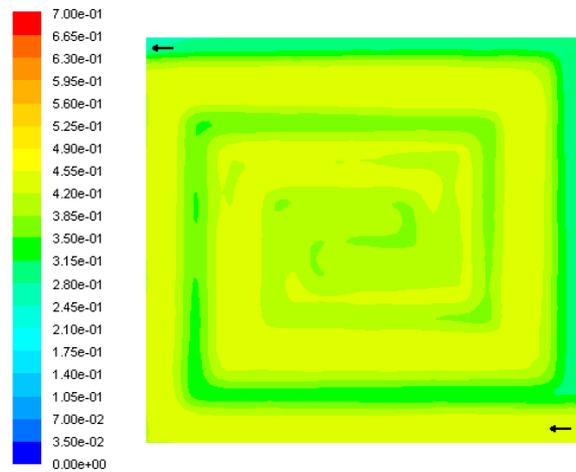


Figura 4.43 Interfase CL/mem (cátodo)

4.4. Contornos de Concentración de Oxígeno

1. Concentración Muy Baja: 20 % Oxígeno
2. Concentración Baja: 40 % Oxígeno
3. Concentración Media: 60 % Oxígeno
4. Concentración Alta: 80 % Oxígeno

De igual manera que en el análisis anterior, los resultados que se presentan a continuación manejan un rango fijo para los contornos de densidad de corriente y para la concentración de humedad el cual fue de 0 - 0.7 A/cm^2 y 0 - 0.83 respectivamente.

4.4.1. Concentración Muy Baja

Para ésta concentración de oxígeno del 20 % (aire = 21 %) la densidad de corriente resultó ser la más baja de los cuatro casos, llegando a los 0.828 A/cm^2 (Fig. 4.44), así también la distribución local de densidad de corriente en la interfase GDL/CL del ánodo fue la que mostró menor actividad electrónica (Fig. 4.45). La variación de concentración de oxígeno en los canales del cátodo (Fig. 4.46) y la interfase (Fig. 4.47) se mantuvo dentro del rango de 0.06 - 0.23 % y fue uniforme.

4.4.2. Concentración Baja

Con una concentración del 40 %, se obtuvo una densidad de corriente de 0.908 A/cm^2 (Fig. 4.48), siendo mayor que la anterior. La distribución de densidad de corriente local (Fig. 4.49) fue similar a la del caso de un porcentaje de humedad media. La concentración de oxígeno en los canales del cátodo y la interfase GDL/CL aumentó y se mantuvo entre 0.18 - 0.38 % y también se distribuyó uniformemente en ésta zona (Fig. 4.50 - 4.51).

4.4.3. Concentración Media

En este caso la densidad de corriente obtenida fue de 0.928 A/cm^2 (Figura 4.52), un poco más alta que para la de concentración baja. La densidad de corriente local (Fig. 4.53) mostró mejor distribución que la anterior y la concentración de oxígeno se ubicó en el rango de 35 - 60 %. (Fig. 4.54 - 4.55).

4.4.4. Concentración Alta

Con esta concentración de oxígeno se pudo alcanzar una densidad de corriente de 1.01 A/cm^2 , (Fig. 4.56) la más alta del análisis. También la distribución de densidad de corriente local (Fig. 4.57) fue la que mostró mejor actividad electrónica y la concentración de oxígeno aumento notablemente (Fig. 4.58-4.59), ubicándose entre el 0.56 - 0.80 %.

Concentración Muy Baja

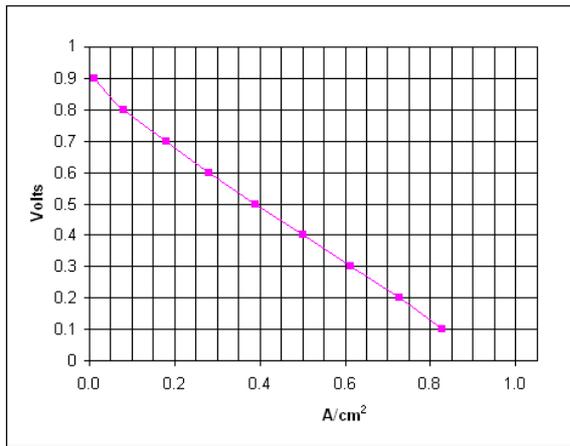


Figura 4.44 Curva de Polarización.

Densidad de Corriente 0 – 0.7A/cm²

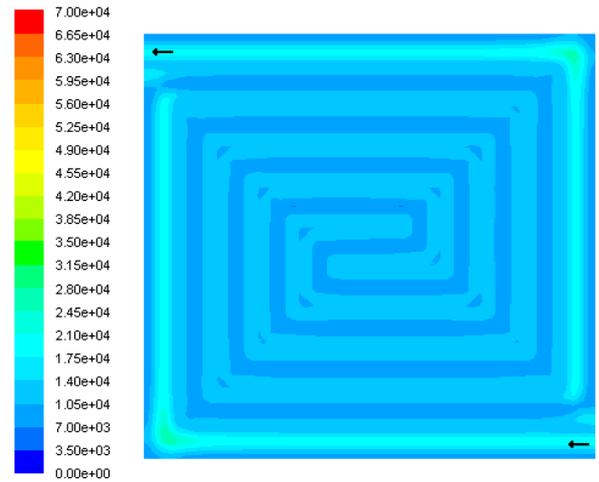


Figura 4.45 Interfase GDL/CL (ánodo) A/cm^2

Fracción Masa O₂: 0 - 0.83

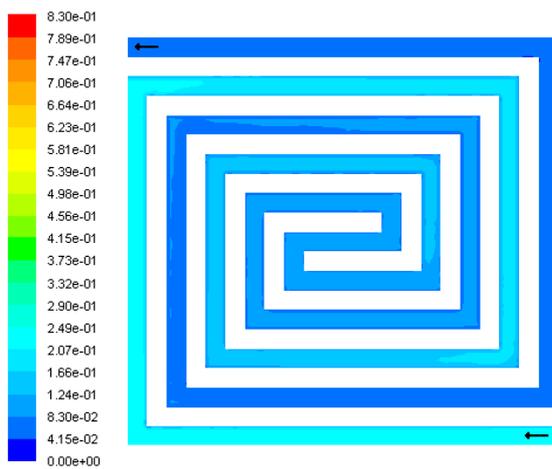


Figura 4.46 Canales (cátodo)

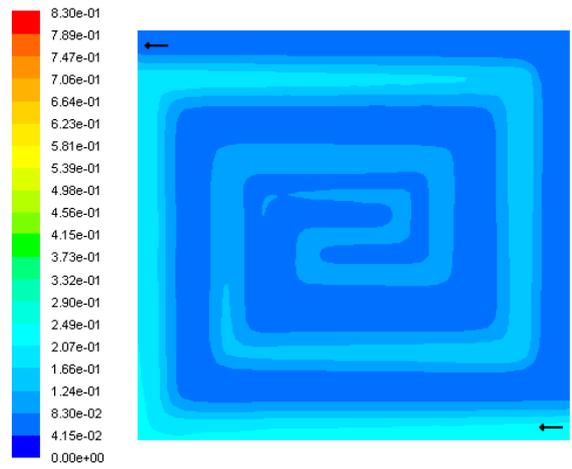


Figura 4.47 Interfase CL/mem (cátodo)

Concentración Baja

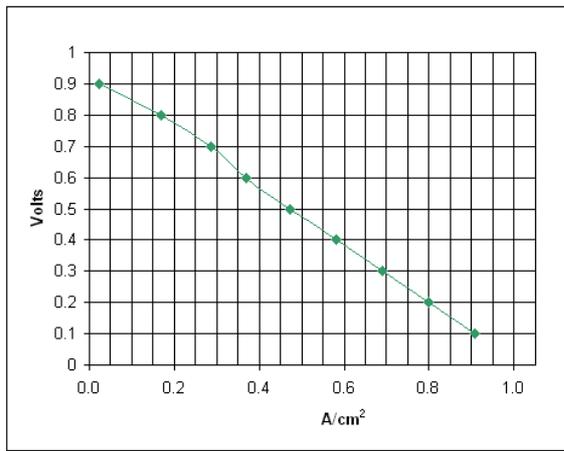


Figura 4.48 Curva de Polarización.

Densidad de Corriente 0 – 0.7A/cm²

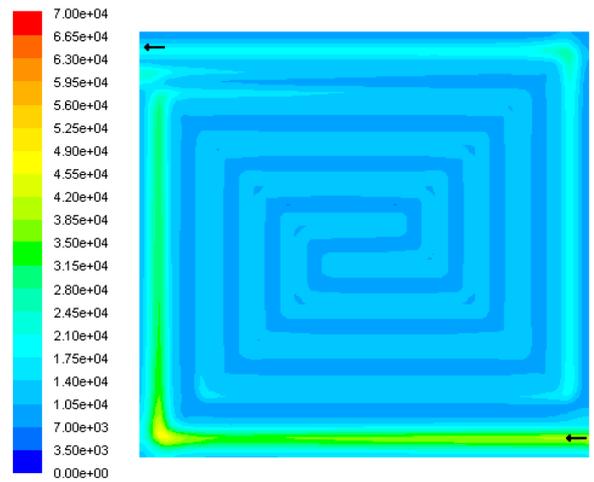


Figura 4.49 Interfase GDL/CL (ánodo) A/m²

Fracción Masa O₂: 0 - 0.83

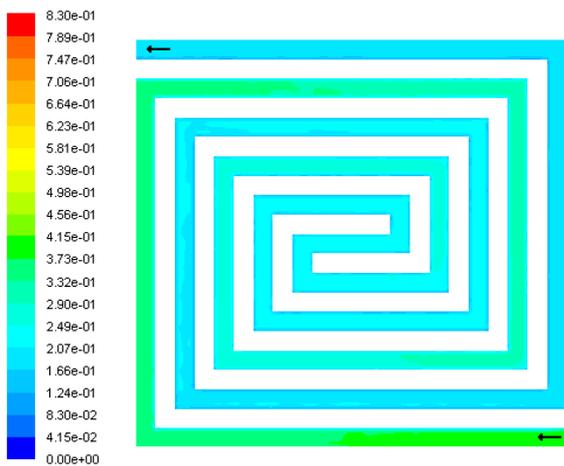


Figura 4.50 Canales (cátodo)

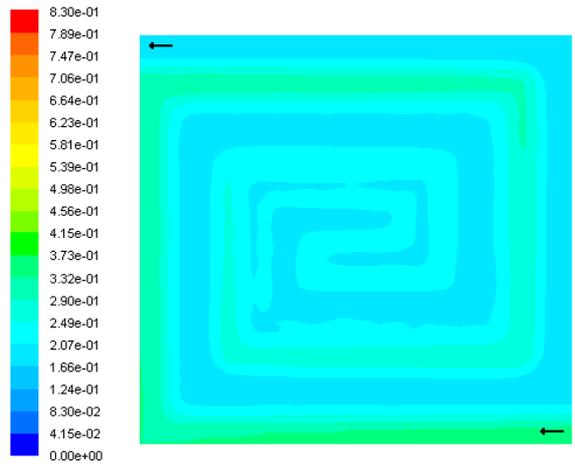


Figura 4.51 Interfase CL/mem (cátodo)

Concentración Media

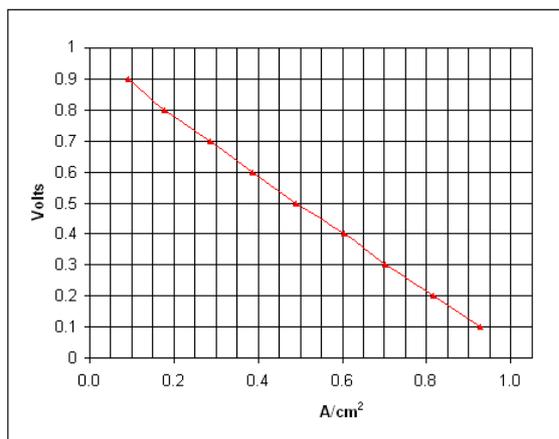


Figura 4.52 Curva de Polarización.

Densidad de Corriente 0 – 0.7A/cm²

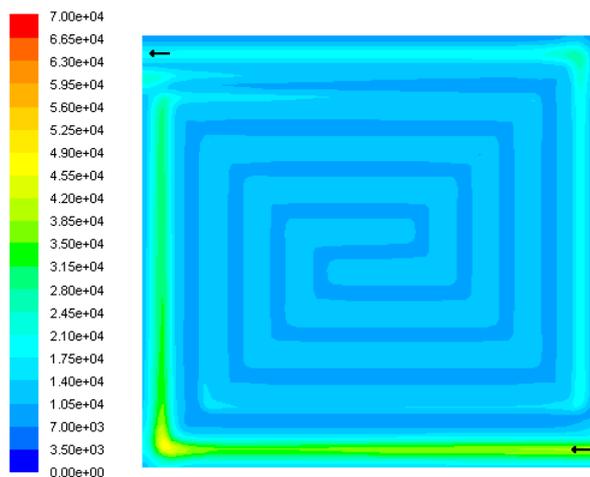


Figura 4.53 Interfase GDL/CL (ánodo)A/m²

Fracción Masa O₂: 0 - 0.83

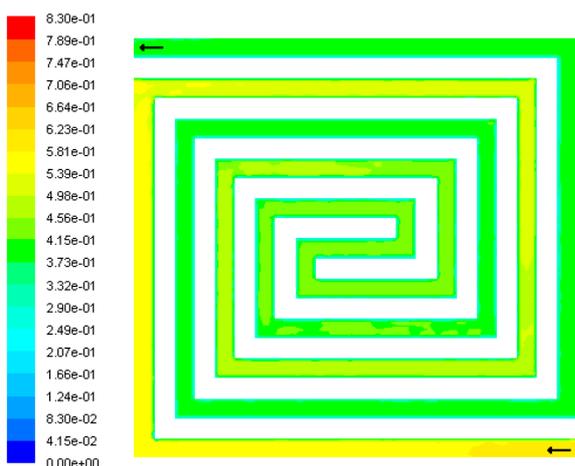


Figura 4.54 Canales (cátodo)

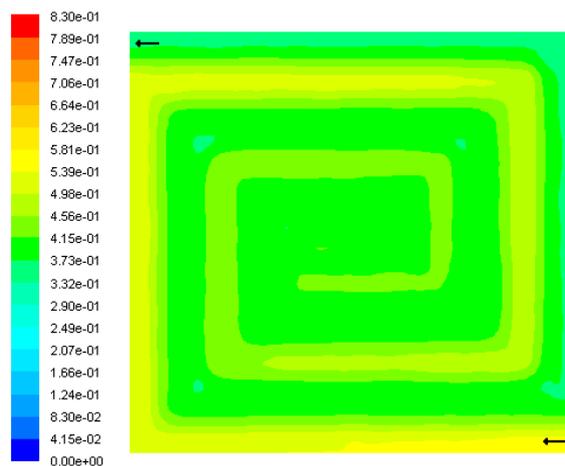


Figura 4.55 Interfase CL/mem (cátodo)

Concentración Alta

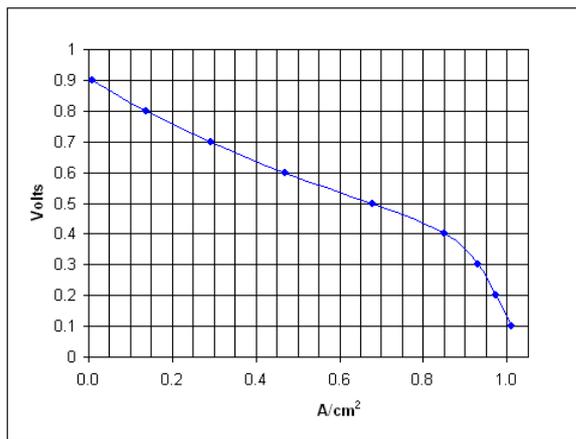


Figura 4.56 Curva de Polarización.

Densidad de Corriente 0 – 0.7A/cm²

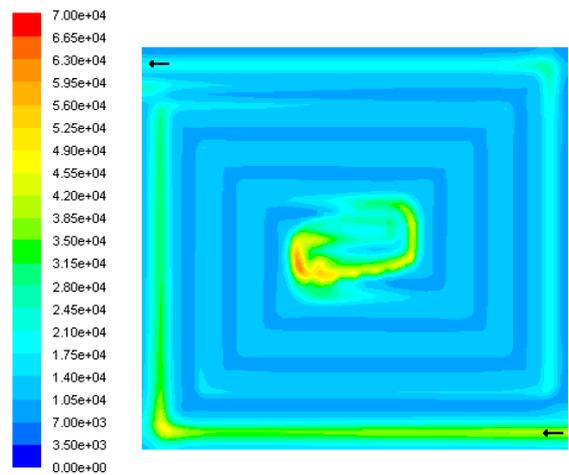


Figura 4.57 Interfase GDL/CL (ánodo) A/m²

Fracción Masa O₂: 0 - 0.83

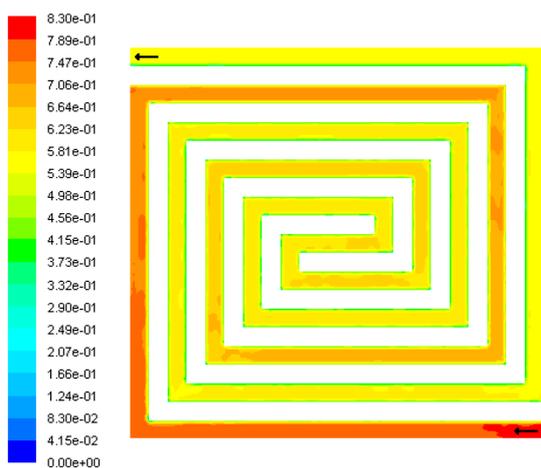


Figura 4.58 Canales (cátodo)

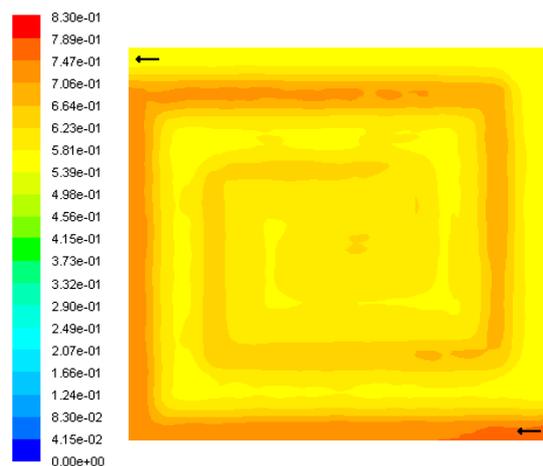


Figura 4.59 Interfase CL/mem (cátodo)

4.5. Curvas de Polarización

En esta última sección se presentan las curvas de polarización simuladas para el análisis de humedad y concentración de oxígeno, así como una comparación de los datos experimentales de *E. Valenzuela* [24] para el modelo de serpentín triple y la simulada para el modelo en espiral.

Las condiciones de operación utilizadas en la simulación fueron las mismas que las experimentales. (Ver Tabla 3.1)

La figura 4.60 muestra las curvas de polarización para el análisis de humedad. En éstas se observa que las pérdidas por transporte de masa se incrementan conforme el porcentaje de humedad en los flujos es mayor. Sin embargo, para las condiciones experimentales (humedad = 10% ánodo y 5% cátodo) también se observan bajas densidades de corriente. Esta disminución en la densidad de corriente se debe a dos factores: 1) Que la membrana no está lo suficientemente hidratada y 2) Que hay un exceso de agua líquida en la zona catalítica e impide que exista una concentración alta de hidrógeno y oxígeno en los sitios activos de reacción, provocando así caídas mínimas de densidad de corriente en las curvas I-V (humedad alta).

De esta manera, se puede ver que la humedad en los flujos de alimentación de la celda sí influye en la densidad de corriente. Por esto, es necesario mantener un nivel de humedad adecuado en los flujos para un buen desempeño de la celda.

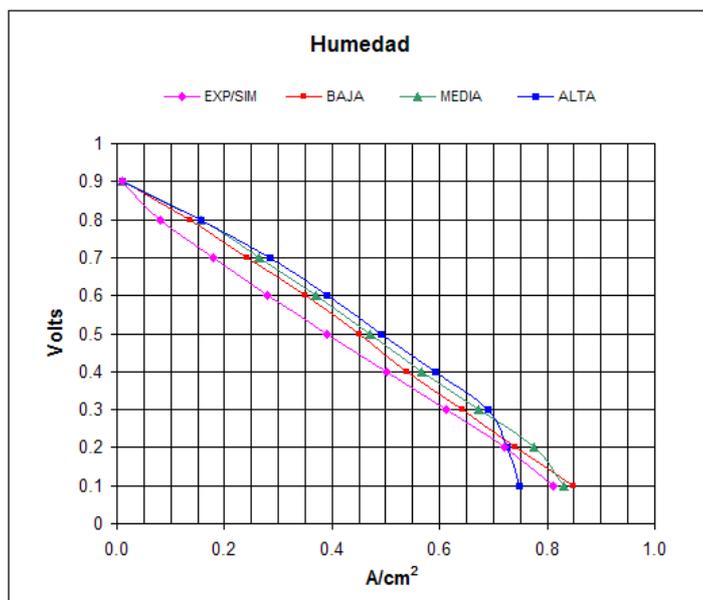


Figura 4.60 Curva de Polarización. (Humedad)

En la figura 4.61 se presentan las curvas de polarización simuladas para el análisis de concentración de oxígeno del modelo de simulación. En este caso la curva con concentración muy baja corresponde a la curva que se simuló con los datos experimentales.

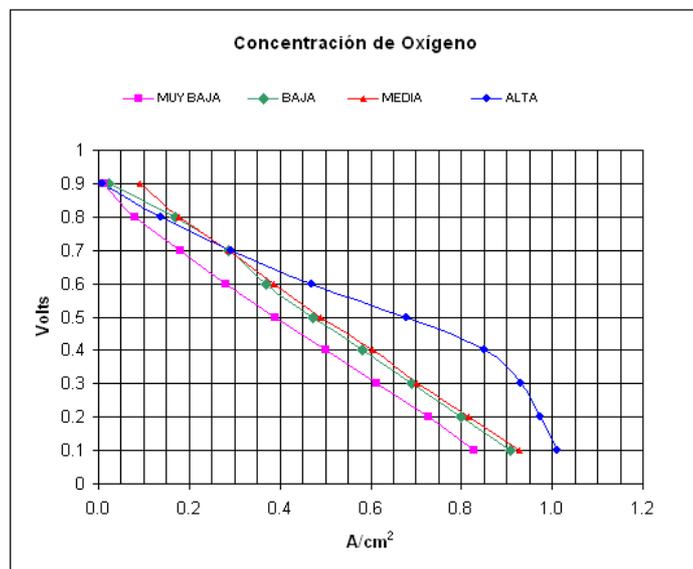


Figura 4.61 Curva de Polarización. (Concentración de Oxígeno)

En esta figura, se puede observar que la densidad de corriente aumenta conforme la concentración de oxígeno es mayor en el flujo del cátodo; así también se observa que la influencia de ésta variable es más grande que la observada en las curvas de humedad (Concentración Alta).

En la figura 4.62 se presenta una comparación entre la curva experimental de la "Celda Electrochem" y la simulada para el modelo en "Espiral", la diferencia que existe entre ellas se debe principalmente al tipo de configuración de canales y a las variaciones que pudieran existir por las consideraciones del modelo de simulación y las condiciones de experimentales la celda *Electrochem*.

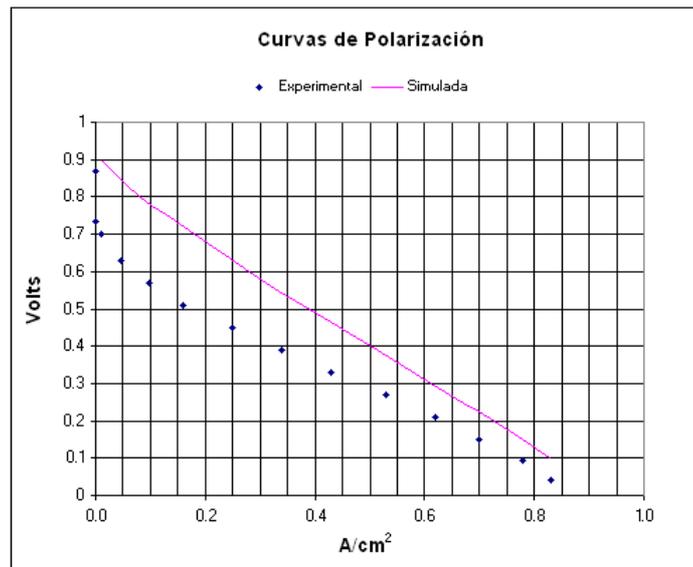


Figura 4.62 Curva de Polarización. (Experimental/Simulada)

Capítulo 5

Conclusiones

Con el desarrollo de este trabajo se demostró que el uso de las técnicas de CFD pueden ser empleadas fácilmente como herramienta de diseño y de análisis para las celdas de combustible, ya sea para determinar condiciones óptimas de operación, modificación de parámetros o algún cambio en la geometría de la celda. Y esto se puede lograr sin tener que recurrir a las pruebas experimentales de laboratorio que muchas veces resultan lentas y costosas.

Así mismo, se presentó el procedimiento para la elaboración de los diferentes modelos computacionales de una celda de combustible, lo cual no se encuentra reportado en la literatura. También, se planteó una metodología para realizar un análisis de presión, humedad y concentración de oxígeno, los cuales forman parte del proceso de transporte de masa que se lleva a cabo en la celda de combustible.

Con base en los resultados obtenidos, las conclusiones son las siguientes:

Para el estudio de presión, se encontró que los diseños de serpentín provocan fuertes caídas de presión desde la entrada hasta la salida del gas, debido a los cambios de dirección en su configuración, lo cual se ve reflejado en la interfase difusor/catalizador. El diseño en espiral disminuye las pérdidas de presión a lo largo de los canales por la reducción gradual de la longitud de cada uno de ellos, siendo así un diseño aceptable en comparación con los diseños de serpentín. En cuanto al diseño con canales conectados se puede decir que favorece la distribución del gas sobre la superficie catalizadora; sin embargo, la presión en esta zona sigue siendo baja; el diseño interdigitado mostró una distribución uniforme y un aumento de presión considerable en las interfases, debido al efecto que causa el uso de los ductos interconectados del medio poroso; por lo tanto, este diseño fue el que mejores resultados obtuvo.

Para el análisis de humedad se concluye que un porcentaje de agua entre el 30 - 50 % en el flujo del ánodo y del 5 - 10 % en el flujo del cátodo debe ser utilizado para tener un buen desempeño de la celda, alcanzando así densidades de corriente aceptables y que permitan mantener a la membrana mejor hidratada.

En el análisis de concentración de oxígeno se observó una mayor variación de densidad de corriente para los cuatro casos considerados, evidenciando así la importancia de utilizar en la celda oxígeno puro o aire altamente enriquecido con oxígeno para obtener densidades de corriente más altas; de lo contrario la eficiencia de la celda se verá afectada por las limitaciones del transporte de masa en este electrodo.

5.1. Trabajo a Futuro

1. Realizar un análisis dimensional en los canales de flujo del plato bipolar para conocer su influencia en la distribución de gas sobre los difusores.
2. Evaluar las configuraciones de canales complejas de los platos bipolares y algunas geometrías alternas, así como el uso de un medio poroso metálico como distribuidor de flujo.
3. Realizar un estudio paramétrico en los platos bipolares (conductividad eléctrica-térmica, permeabilidad), electrodos (relación área catalítica/superficie).
4. Construir una celda experimental en base al estudio realizado de dinámica de fluidos y validar los resultados.

Nomenclatura

<i>C</i>	kgmol/m^3	Concentración de Especies
<i>D</i>	m^2/s	Coeficiente de Difusión
<i>E</i>	Volts	Potencial de Equilibrio
<i>E</i>	J/kg	Energía
<i>E^o</i>	Volts	Potencial Estándar
<i>h</i>	J/kg	Entalpía
<i>H</i>	%	Humedad
<i>i</i>	<i>A</i>	Densidad de Corriente
<i>i₀</i>	<i>A</i>	Corriente de Intercambio
<i>i_L</i>	<i>A</i>	Corriente Límite
<i>J</i>	$\text{kg}/\text{m}^2\text{s}$	Flujo Difusivo de Especies
<i>j</i>	A/m^3	Corriente de Intercambio, ref.
<i>k</i>	m^2	Permeabilidad
<i>k</i>	$\text{W}/\text{m}^2\text{K}$	Conductividad Efectiva
<i>M</i>	kg/kgmol	Peso Molecular
<i>P</i>	<i>atm</i>	Presión
<i>P_i</i>	-	Presión Parcial
<i>p</i>	<i>atm</i>	Presión Estática
<i>p_c</i>	<i>atm</i>	Presión Capilar
<i>R</i>	<i>ohms</i>	Resistencia
<i>R</i>	A/m^3	Corriente de Intercambio Volumétrica
<i>r</i>	$\text{kg}/\text{m}^3\text{s}$	Tasa de Condensación Volumétrica
<i>S</i>	kg/ms^2	Término Fuente
<i>s</i>	$\text{kg}/\text{m}^3\text{s}$	Saturación de Agua
<i>T</i>	Kelvin	Temperatura
<i>V</i>	Volts	Voltaje
<i>v</i>	m/s	Velocidad
<i>W</i>	Watts	Potencia
<i>y</i>	-	Fracción Masa

Símbolos Griegos		
α	-	Coef. Transferencia de Carga
γ	-	Coef. Concentración
δ	<i>m</i>	Espesor de Material
ϵ	%	Porosidad
η	Volts	Sobrepotencial
ξ	%	Eficiencia
θ	-	Ángulo de Contacto
λ	-	Contenido de Agua
μ	kg/ms	Viscosidad
ρ	kg/m^3	Densidad
σ	$1/\text{ohm} \cdot \text{m}$	Conductividad Eléctrica
σ	N/m^2	Tensión Superficial
τ	kg/ms^2	Tensor de Esfuerzos
ϕ	Volts	Potencial Eléctrico
Subíndices		
<i>an</i>	-	ánodo
<i>cat</i>	-	cátodo
<i>act</i>	-	activación
<i>ohm</i>	-	óhmico
<i>conc</i>	-	concentración
<i>sol</i>	-	fase sólida
<i>mem</i>	-	fase membrana
<i>eff</i>	-	efectiva
<i>oc</i>	-	circuito abierto
<i>l</i>	-	fase líquida
Constantes		
R	J/molK	Cte. de los Gases (8,314)
F	C/mol	Cte. de Faraday (96,480)

Bibliografía

- [1] **Rifkin**, La Economía del Hidrógeno, Rifkin, Ed. Paidós (2002).
- [2] **J. Larminie, A. Dicks**, Fuel Cell System Explained, Ed. John Wiley & Sons, New York (2003).
- [3] **J. W. Van Zee, S. Shimpalee, W. K. Lee**, Advances in CFD Modeling for PEMFC's, Proceedings of IECEC-ET-10 (2001).
- [4] **Y.M. Ferng, Y. C. Tzang**, Analytical and Experimental Investigations of a PEMFC, Int. J. Hydrogen Energy (2003).
- [5] **D. Singh, D. M. Lu, N. Djilali**, A two-dimensional Analysis of Mass Transport in PEMFC, Int. J. Eng. Science, 37 (1999) 431-452.
- [6] **T.E. Springer, T.A. Zawodzinski, S. Gottesfeld**, Polymer Electrolyte Fuel Cell Model, J. Electrochem Soc. 138(1999) 2334-2342.
- [7] **J. H. Nam, M. Kaviany**, Effective diffusivity and water-saturation distribution in single- and two-layer PEMFC diffusion medium, Int. J. Heat and Mass Transfer, 46 (2003) 4595-4611.
- [8] **M. Grujicic, K. M. Chittajallu**, Design and Optimization of PEMFC's, Applied Surface Science, 227 (2004) 56-72.
- [9] **M. Hu, A. Gu, M. Wang, X. Zhu**, 3D two phase flow mathematical model for PEM fuel cell: Part 1. Model Development, Energy Conversion Management, 45 (2004) 1861 - 1882.
- [10] **B.R. Siversten, N. Djilali**, CFD-Based Modeling of Proton Exchange Membrane Fuel cells, J. Power Sources, 141 (2005) 65-78.
- [11] **S. Dutta, S. Shimpalee, J.W. Van Zee**, Numerical Prediction of Mass-Exchange Between Cathode and Anode Channels in a PEMFC, Int. J. Heat and Mass Transfer, 44 (2001) 2029 - 2042.
- [12] **V. Gurau, H. Liu, and S. Kakac**, Two-dimensional model for PEMFC's, J. AIChE, 44 (1998) 2410-2422.

- [13] **A. Kazim, H. Liu, and P. Forges**, Modeling of performance of PEM fuel cells with conventional and interdigitated flow fields, *J. Applied Electrochemistry*, 29, (1999) 1409-1416.
- [14] **A. Kulikovskiy, J. Divisek, and A. Kornyshev**, Modeling the cathode compartment of polymer electrolyte fuel cells: Dead and active reaction zones, *J. Electrochem. Soc.* 146 (1999) 3981-3991.
- [15] **S. Dutta, S. Shimpalee S, and J. W. Van Zee**, Three-Dimensional Numerical Simulation of Straight Channel PEMFC's, *J. App. Electrochemistry*, 30 (2000) 135-146.
- [16] **H. Meng, C.Y. Wang**, Large Scale Simulation of Polymer Electrolyte Fuel Cells by Parallel Computing, *Chem. Eng. Science*, 59 (2004) 3331-3343.
- [17] **D. M. Bernardi, M. W. Verbrugge**, Mathematical Model of a Gas Diffusion Electrode Bonded to a Polymer Electrolyte, *J. AIChE*, 33 (1992) 1151-1163.
- [18] **D. M. Bernardi, M. W. Verbrugge**, A Mathematical Model for the Solid Polymer Electrolyte Fuel Cell, *J. Electrochem. Soc.* 139 (1992) 2477-2491.
- [19] **T. Fuller, J. Newman**, Water and Thermal Management in PEMFC's, *J. Electrochem. Soc.* 140 (1993) 1218-1225.
- [20] **T. Nguyen, R. White**, A Water and Heat Management for PEMFC's, *J. Electrochem. Soc.* 140 (1993) 2178-2186.
- [21] **T. Berning, N. Djilali**, Three-dimensional Computational Analysis of Transport Phenomena in a PEMFC - a Parametric Study, *J. Power Sources*, 124 (2003) 440-452.
- [22] **K. W. Lum, J.J. McGuirk**, Three-Dimensional Model of a Complete Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cell - Model Formulation, validation and Parametric Studies. *J. Power Sources*, 143 (2005) 103-124.
- [23] **J. M. Sierra**, Diseño y Simulación de los Difusores de Gas para una Celda de Combustible tipo PEM, Tesis Licenciatura, UAEM (2005).
- [24] **E. Valenzuela**, Estudio de la Interfase Electrodo/Electrolito de una Celda de Combustible Tipo PEM Mediante Espectroscopía de Impedancia Electroquímica, Tesis de Doctorado, Facultad de Ingeniería-UNAM (2006).
- [25] **Fuel Cell Handbook**, e-book, Sixth Edition, (November 2002).
- [26] **H. A. Liebhafsky, E. J. Cairns**, Fuel Cells and Fuel Batteries, A guide to their Research and Development (1968).
- [27] **J. Moreira**, Optimización y Desarrollo de un Celda de Combustible tipo PEM, Tesis de Doctorado. CIE-UNAM (2003).

- [28] **N. Djilali, D. M. Lu**, Influence of Heat and Mass Transfer on Gas and Water Transport in FC's, *Int. J. Thermal Science*, 41 (2002) 29-40.
- [29] **P. Costamagna**, Transport Phenomena in Polymeric Membrane Fuel Cells, *Chemical Engineering Sci.* 56 (2001) 323-332.
- [30] **L. Xianguo, I. Sabir**, Review of Bipolar Plates in PEMFC: Flow-Field Designs, *Int. J. Hydrogen Energy*, 30 (2005) 359-371.
- [31] **R.G. Reddy, A. Kumar**, Effect of Channel Dimensions and Shape in the Flow-Field distributor on the Performance on the PEMFC's, *J. Power Sources*. 113 (2003) 11-18.
- [32] **M. H. Oh, Y. S. Yoon, S. G. Park**, The Electrical and Physical Properties of Alternative Material Bipolar Plate for PEMFC system, *J. Electrochem. Acta*, 50 (2004) 777-780.
- [33] **B. Thoben, A. Siebke**, Influence of Different GDL's on the Water Management on the PEFC Cathode, *J. New Materials for Electrochemical Systems*, 7 (2004) 13-20.
- [34] **J. Benziger, J. Nehlsen, D. Blackwell**, Water Flow in the GDL's of PEMFC's, *J. Membrane Science*, 261 (2005) 98-106.
- [35] **I. G. Currie**, *Fundamental Mechanics of Fluids*, McGraw-Hill, Second Edition (1993).
- [36] **Fluent & Gambit**, Tutorial (2006).
- [37] **J. Hyunchul, C. Y. Wang**, Experimental Validation of a PEMFC Model by Current Distribution Data, *J. Electrochem. Soc.* 151 (2004) A1954-A1960.
- [38] **U. Sukkee, C. Y. Wang, K. S. Chen**, Computational Fluid Dynamics Modeling of PEMFC's, *J. Electrochem. Soc.* 147 (2000) 4485-4493.
- [39] **J.H. Ferziger, M. Peric'**, *Computational Methods for Fluid Dynamics*, 3rd Edition, Ed. Springer (2002).