

Modelado Fenomenológico de Celdas de Combustible

tipo PEM de Baja Temperatura

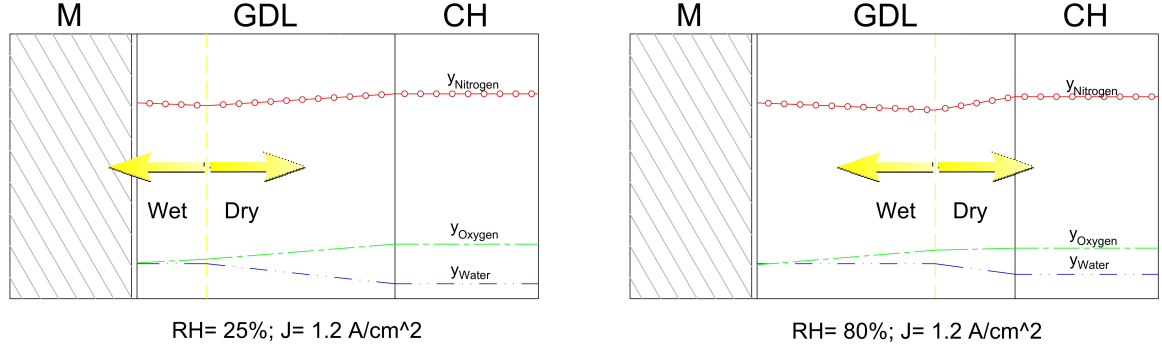
Resumen

El aumento de las emisiones de contaminantes atmosféricos y gases de efecto invernadero resultantes del uso de combustibles fósiles convencionales en los sistemas de generación y transporte de electricidad genera importantes problemas ambientales con la calidad del aire y el cambio climático en todo el mundo. Los sistemas convencionales de conversión de energía, en particular, son una de las principales fuentes de contaminación del planeta. Una tecnología de conversión de energía alternativa, como la tecnología de pila de combustible, proporciona un mecanismo más limpio para minimizar el uso de recursos energéticos tradicionales. Además, las pilas de combustible son un sistema de conversión de energía con mayor eficiencia y emisiones mucho más bajas que cualquier otro dispositivo de conversión de energía.

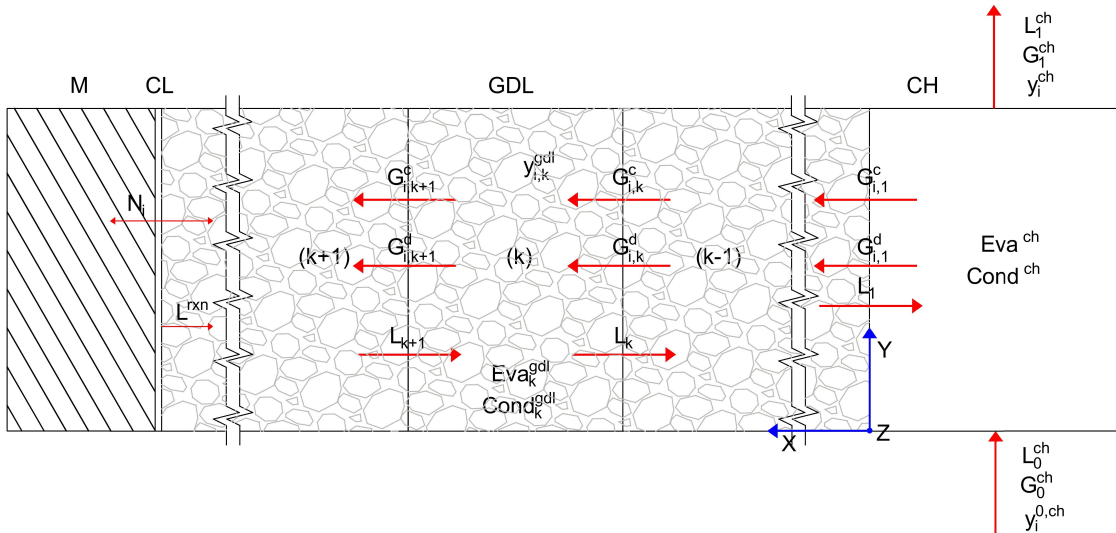
En particular, las pilas de combustible de membrana de electrolito de polímero de baja temperatura (PEMFC) son una tecnología prometedora que se puede utilizar para aplicaciones móviles y estacionarias. En tal sentido, es de gran interés una comprensión profunda de los fenómenos que tienen lugar dentro de un PEMFC a través del modelado fenomenológico con un enfoque de equilibrio integral.

Se encontraron soluciones analíticas simplificadas para el flujo de gas y líquido y la composición del gas en la capa de difusión de gas (GDL) en el lado del cátodo de PEMFC de baja temperatura. A lo largo de la longitud del GDL, el flujo molar colineal en fase gaseosa cambia la dirección que apunta al canal o la membrana y, por lo tanto, divide el GDL en dos regiones según este cambio. Justo en el límite de estas regiones, se encuentra agua líquida en la parte más cercana a la membrana que da lugar a la determinación de una región húmeda dentro de GDL. Se derivaron expresiones analíticas para el flujo molar colineal de gas y para la fracción molar de especies para cada región. Los flujos normalizados de fase gaseosa convectiva y difusiva, así como la condensación y la

evaporación, se calculan analíticamente. Nuestros resultados muestran que tanto los flujos molares colineales como los difusivos juegan un papel importante en la eficiencia de la pila de combustible, siendo ambos del mismo orden de magnitud y, en consecuencia, las soluciones que ignoran los flujos molares colineales no son apropiadas para comprender el transporte de masa en el GDL.



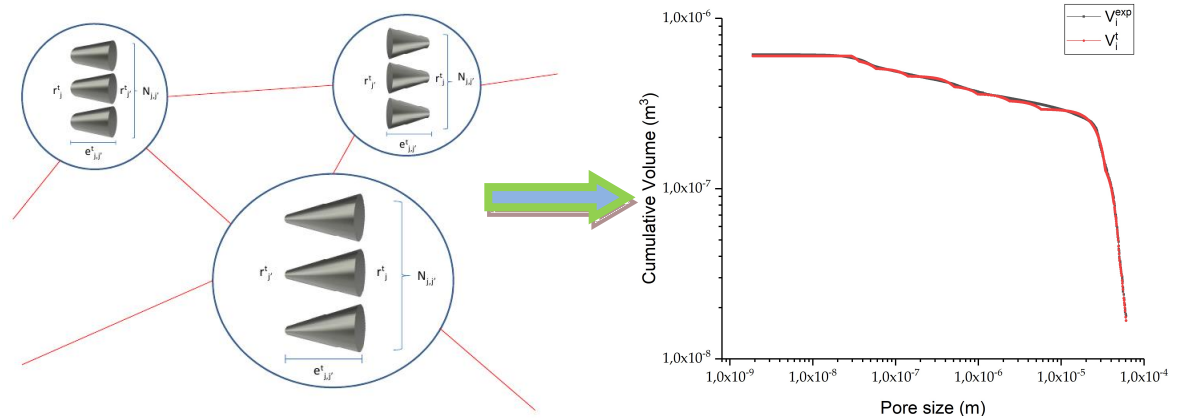
Se desarrolló e implementó un modelo fenomenológico discretizado 1-D para el transporte de masa dentro del lado del cátodo del GDL mediante el uso de ecuaciones integrales sobre volúmenes finitos. El sistema obtenido corresponde a un conjunto de Sistema de Ecuaciones Algebraicas en el dominio espacial a lo largo de la dirección del plano pasante del GDL que se implementa en el Sistema de Modelado Algebraico General (GAMS).



En este modelo más riguroso, las regiones húmedas y secas aparecen como consecuencia de la solución del sistema. En caso de existencia de fase líquida, la fase gaseosa se supone saturada; mientras que, sin una fase líquida, la fase gaseosa podría estar saturada o insuficientemente saturada. Por lo tanto, para evaluar la capacidad de

predicción del modelo analítico, se valida con los resultados de un modelo fenomenológico integral 1-D en un dominio discretizado desarrollado, diferenciándose ambos modelos en no más del 5% para la relación de longitudes de regiones húmedas a secas. Las relaciones electroquímica y cinética se tienen en cuenta en un módulo en serie sobre el mismo modelo. Los parámetros cinéticos junto con la resistencia eléctrica del PEMFC se determinan utilizando datos experimentales mediante un mecanismo de optimización. Como resultado, se obtiene la curva de polarización de un PEMFC. Además, el perfil de las fracciones molares de la especie y los perfiles de flujo de difusión de la especie dentro del GDL se obtienen en el lado del cátodo del PEMFC.

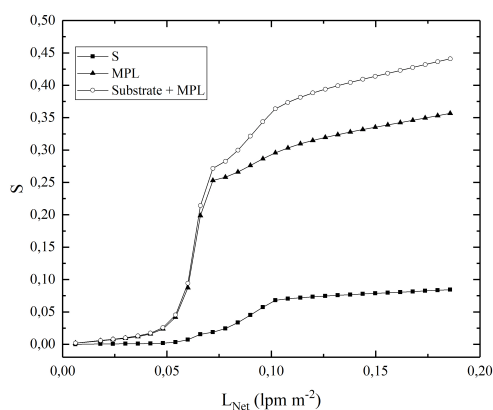
Se desarrolló e implementó un modelo de caracterización de medios porosos con el objetivo de representar la estructura GDL de una manera más sencilla. La estructura porosa del GDL se modela como una red de un conjunto de tubos cónicos circulares truncados interconectados. Cada componente de esta red de tubos cónicos (CTN) se caracteriza por el radio de tubo pequeño, el radio de tubo grande y la longitud y número de tubos. Todos los componentes del modelo de caracterización del GDL se estiman ajustando la distribución del volumen acumulativo de un experimento de Porosimetría de Intrusión de Mercurio (MIP).



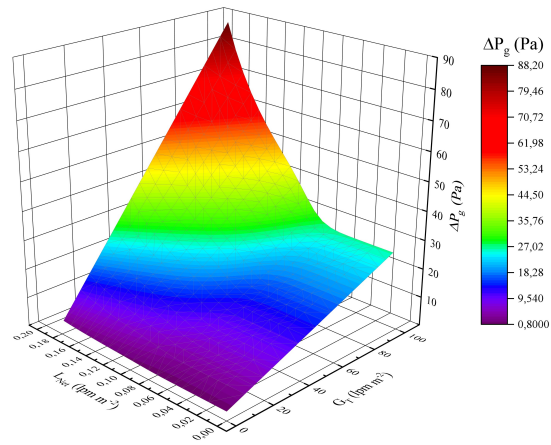
Luego, el GDL se divide en dos regiones diferentes, dando lugar a la subregión MPL y la subregión Substrato dentro del GDL con una caracterización específica de ambas subregiones. El material GDL evaluado es el GDL 25BC de Sigracet. Se obtiene un conjunto simplificado de 14 radios característicos de tubos recurriendo a la optimización

para describir con precisión la distribución de volumen acumulado para el GDL completo, con un error relativo máximo inferior al 6,5% para el rango completo de radios de tubo.

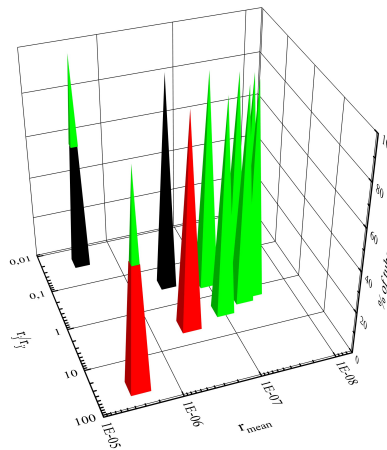
Considerando el modelo de caracterización de los medios porosos desarrollado, se desarrolló e implementó un modelo simplificado de flujo de gas y líquido para la dinámica de fluidos dentro del CTN. Este modelo es útil para predecir caídas de presión y saturación de agua líquida (retención de líquido) cuando se dan flujos convectivos de gas y líquido. La caída de presión en las fases gaseosa y líquida se modela mediante ecuaciones de Poiseuille bajo el régimen laminar. La ecuación de young-Laplace para los meniscos en la geometría CTN se aplica para calcular las diferencias de presión capilar que dan lugar al efecto de bombeo capilar. El movimiento del agua líquida dentro del GDL es generado por el CPE como se pudo demostrar. Como resultado, el agua líquida puede fluir en tubos convergentes cuando el ángulo de contacto es menor de 90 y, por el contrario, en tubos divergentes cuando el ángulo de contacto es mayor de 90, mientras que el gas puede fluir en cualquier tipo de tubo. La retención de líquido para el lado del cátodo de un PEM-FC se evalúa mostrando una influencia insignificante del flujo convectivo de la fase gaseosa sobre la retención de líquido. Por tanto, se determina una ley de correspondencia entre el flujo de agua líquida y la retención de líquido.



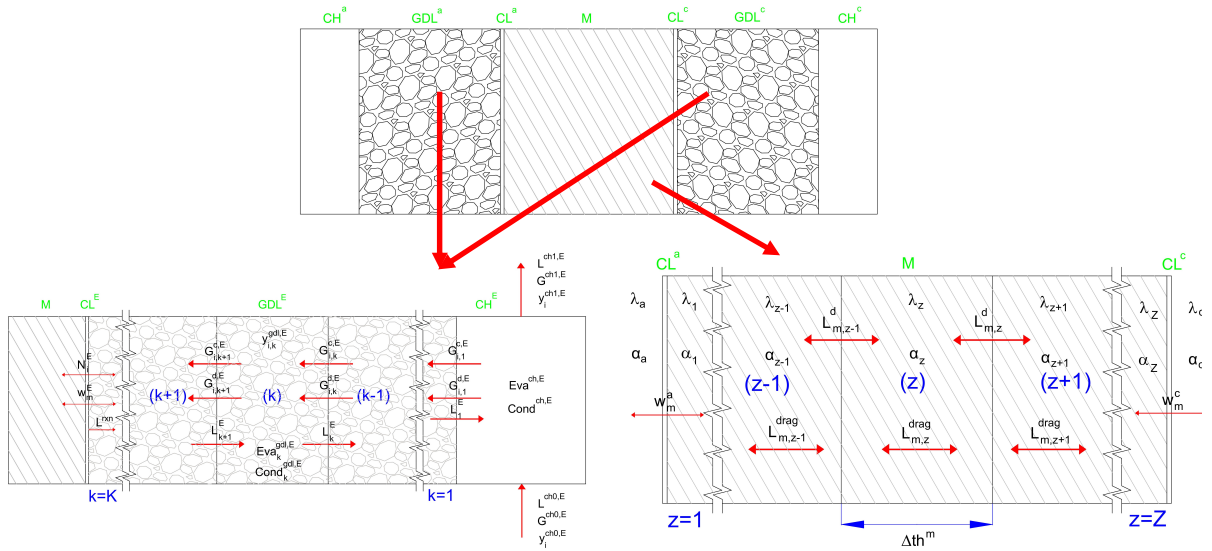
Además, el modelo mostró una contribución insignificante del sustrato en la caída de presión total del GDL.



Además, el proceso de llenado de agua en los tubos del CTN cuando la densidad de corriente aumenta comienza con los tubos donde la caída de presión por fricción del líquido ($\Delta P_{j,j'}^f$) es mínimo, y la relación $\frac{1}{r_j} - \frac{1}{r_{j'}}$ impone la ley del proceso de llenado de agua líquida.



Se desarrolló un modelo matemático de la pila de combustible PEM completa basado en un sistema de ecuaciones algebraicas, con un enfoque de técnica de discretización de balance integral para los fenómenos que ocurren, considerando todos los modelos del trabajo desarrollados previamente.



Los flujos multicomponente molares colineales y difusivos se consideran para el transporte masivo en el GDL. La hidratación variable de la membrana y la posibilidad de condensación / evaporación del agua en los canales de alimentación y GDL también se consideran dependiendo de las condiciones termodinámicas locales. Por lo tanto, se desarrolló un modelo 1-D discretizado para el agua líquida en la membrana, basado en el enfoque mencionado anteriormente. El modelo de membrana desarrollado considera dos fenómenos simultáneamente para el flujo de líquido: arrastre electro-osmótico y difusión. El modelo completo de pila de combustible PEM fue validado satisfactoriamente con datos experimentales y resultados de simulación de la bibliografía, mostrando un bajo costo computacional y un modelo confiable, simple y robusto que se puede obtener a través de este enfoque de modelado.