

Simulación de platos colectores para su aplicación en celdas de combustible Tipo PEM

ZAMORA-ANTUÑANO, Marco*†, OLIVARES-RAMÍREZ, Juan, RAMÍREZ-BALTAZAR, José, SANTOS-CRUZ, José y OROZCO-GAMBOA, Germán.

Universidad Tecnológica de San Juan del Río. División de Química Industrial y Energías Renovables, Cuerpos Académico de Energías Av. La Palma no. 125, Col. Vista Hermosa, San Juan del Río, Qro. C.P. 76800

Centro de Investigación y Desarrollo Tecnológico en Electroquímica (CIDETEQ). Sanfandila; Parque Tecnológico Querétaro s/n Sanfandila, Pedro Escobedo, Qro. C.P. 76703

Facultad de Química de la Universidad Autónoma de Querétaro. Cerro de las Campanas s/n, Las Campanas, 76010 Santiago de Querétaro, QRO, México

Recibido Julio 25, 2016; Aceptado Septiembre 22, 2016

Resumen

Uno de los principales factores para el óptimo desempeño de una celda de combustible es el diseño de las geometrías de los platos bipolares, esta tecnología se ha desarrollado ampliamente en los últimos años, su desarrollo implica tres aspectos el diseño de geometrías, los materiales y el software empleado. Se diseñaron 08 geometrías de platos colectores para ser utilizadas en celdas de combustible tipo PEM, la simulación para la optimización de las diferentes estructuras se realizó en el software ANSYS 14.5®, las variables de frontera analizadas fueron el flujo másico (16, mL/min), presión a la salida de 0.0 Pa debido a que el ducto se encontraba libre a la atmosfera.

Simulación, Placas Bipolares, Celdas de Combustible

Abstract

One of the most principal factors for the optimum performance of a fuel cell, is the design of the geometry of the bipolar plates, this technology has developed widely in the last years, its development implies three aspects of the design of the geometries, the materials and the software applied. 08 geometries were designed of the collector plates to be used on the fuel cell PEM type, the simulation of the different structures were realized on the software ANSYS 14.5®, the border variables were the mass flow (16, mL/min), outlet pressure of 0.0 Pa, due to the pipeline that was free on the atmosphere.

Simulation, Bipolar plates, Fuel Cells

Citación: ZAMORA-ANTUÑANO, Marco, OLIVARES-RAMÍREZ, Juan, RAMÍREZ-BALTAZAR, José, SANTOS-CRUZ, José y OROZCO-GAMBOA, Germán. Simulación de platos colectores para su aplicación en celdas de combustible Tipo PEM. Revista de Tecnología e Innovación 2016, 3-8: 70-77

*Correspondencia al Autor (Correo electrónico: mazamora@utsjr.edu.mx)

†Investigador contribuyendo como primer autor.

Introducción

Las pilas de combustible son dispositivos que permiten generar energía eléctrica, mediante procesos no contaminantes, y proporcionar energía térmica para varias aplicaciones. Estas modalidades energéticas son posibles a partir de la energía química de un combustible, mediante reacciones electroquímicas entre el combustible y un oxidante. La potencia nominal de las pilas de combustible oscila desde algunos Watts hasta MW para unidades portátiles y estacionarias, respectivamente (Obayopo. 2008). Estos dispositivos pueden utilizar varios tipos de combustibles ricos en hidrógeno, tales como el gas natural, gasolina, biogás, alcoholes o el propano. La utilización de hidrocarburos genera derivados tales como el CO y el CO₂, pero dada la elevada eficiencia de estos dispositivos, para cantidades equivalentes de energía eléctrica producida, las emisiones de CO₂ pueden ser reducidas a la mitad o menos, con el correspondiente beneficio medioambiental. Funcionan a diferentes presiones y temperaturas, las cuales varían desde la presión atmosférica, hasta 100 veces ésta y desde 20 hasta 1000 °C, respectivamente (Lee, P. H., et al, 2008). Las celdas de combustible constituyen una de las fuentes alternas de energía más prometedoras ya que presentan ventajas técnicas y ambientales tales como alta eficiencia, confiabilidad, duración y producción limpia de energía. Las celdas basadas en membranas de electrolito polimérico que operan a temperaturas bajas (alrededor de 80°C), tienen una eficiencia teórica mayor que una máquina térmica, una puesta en operación rápida y cero emisiones si se usa hidrógeno como combustible. Por lo anterior son atractivas, entre otras, como fuentes alternas de energía para aplicaciones de transporte (Xiao, Y., Ming, *et al*, 2008)).

El auge de las energías renovables ha abierto grandes posibilidades para las celdas de combustible, ya que combustibles hidrocarbonados, provenientes de fuentes diferentes a las fósiles, se perfilan como vectores energéticos de múltiples aplicaciones. En particular, el hidrógeno para uso en equipos de combustión en la generación combinada de calor y electricidad, en celdas de combustible para propulsión eléctrica en el transporte, aplicaciones en electrónica, entre muchos más. Una de las principales ventajas es que se puede producir a partir de distintas materias primas (agua, biomasa, combustibles fósiles), sin embargo, el transporte y almacenamiento son costosos y de implementación compleja. La viabilidad de las celdas de combustible se conoce gracias al trabajo del alemán/suizo Christian Friedrich Schönbein en el artículo sobre el hidrogeno y el oxígeno en enero de 1839 en el “Philosophical Magazine” y del inglés Sir William Grove en la misma revista en febrero de 1839, en donde este último indico la posibilidad de producir electricidad a partir de hidrogeno y oxígeno. Desde entonces las celdas de combustible han sido sometidas a innumerables estudios para lograr viabilidad económica y una producción en masa. Los principales sobrecostos asociados a ellas están relacionados directamente con los metales requeridos para catálisis y las placas bipolares o interconectaras para incrementar la potencia obtenida a través de un *stack* (conjunto de celdas de combustible). Debido a las dimensiones de una PEMFC (Proton Exchange Membrane Fuel Cells), no es posible medir cantidades internas fácilmente y sin utilizar técnicas invasivas. El modelamiento ha hecho posible investigar geometrías complejas y otras condiciones que requieren menos tiempo y esfuerzo con respecto a la parte experimental.

En particular, el uso de la dinámica de fluidos computacional (CFD), es una de las posibilidades para analizar la concentración de las especies, los gradientes de temperatura o las distribuciones de presión a través de cada uno de los componentes de la celda. Sin embargo, aún no existe un modelo completo que incluya todos los fenómenos juntos (Akyalcind y Kaytakoglu, 2008; Shiuh, -Kuo, Kun 2008; Rivas, Belmonte, *et al*, 2008; Lai, Hu, y Ni, 2008). En este sentido, existen varios modelos que buscan estudiar los problemas de la celda como los efectos de temperatura, presión e inundación de los *Stacks*, dentro del cual se encuentra el diseño de placas bipolares. La mayoría de artículos de modelamiento de celdas discute acerca de las ecuaciones de conservación relacionadas con la transferencia de masa y de calor tanto macroscópica como microscópicamente. Los modelos matemáticos que se han obtenido son bastante restrictivos y trabajan bajo condiciones ideales. Los fenómenos que pueden ocurrir dentro de la celda son transporte de masa, momento y energía a través de los canales de flujo, transporte de corriente eléctrica a través del medio poroso (electrodos y membrana) y reacciones electroquímicas en la interface electrodo-membrana-catalizador (Liu, 2007; Lee, 2008).

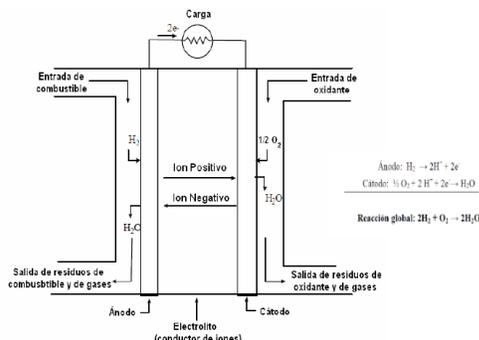


Figura 1 Esquema de una celda de combustible

En la figura 1, se puede observar un diagrama sobre el comportamiento de una Celda tipo PEM. (Comúnmente presentado en la literatura reportada).

1. Se suministra hidrógeno al ánodo y oxígeno al cátodo.
2. Cuando el hidrógeno en forma de gas llega al ánodo, éste se disocia en protones y electrones. Para que esto pueda llevarse a cabo es necesaria la presencia de un catalizador, cuya misión es la de aumentar la velocidad de las reacciones electroquímicas.
3. Debido a las características del electrolito, solo los protones son capaces de llegar al cátodo sin la necesidad de recurrir a un circuito eléctrico externo. Son precisamente las propiedades del electrolito las que caracterizan a las pilas de combustible tipo PEM.
4. Los electrones y los protones llegan al cátodo, y reaccionan con el oxígeno proveniente del aire atmosférico, con lo que se genera vapor de agua, electricidad y calor.

Modelo Matemático

Las ecuaciones que se resuelven en el modelo representativo de la PEMFC incluyen la conservación de masa, las ecuaciones de Navier-Stokes, las ecuaciones de transporte de especies, la ecuación de la energía, y el modelo para el cambio de fase del agua. Estas ecuaciones están desarrolladas en los trabajos de Shimpale y Van Zee, (2007). El modelo de cambio de fase del agua tiene en cuenta la presencia de una película de agua en la superficie de la MEA del ánodo y cátodo. Cuando la actividad local del agua supera la unidad, existe agua líquida en el volumen de control y se forma un film de agua líquida.

El espesor de esta película de líquido depende de la velocidad de condensación/evaporación y de la producción de agua por reacción electroquímica. La solubilidad de H₂ y O₂ se incluye en el modelo utilizando la ley de Henry para contabilizar la difusión de gases reactivos hacia la superficie de la MEA a través de la película de agua superficial. Por lo tanto, la corriente local desciende a medida que el agua se condensa. El objetivo de este trabajo se centra en el diseño, mediante técnicas de CAD, y la simulación de una PEMFC de hidrógeno diferentes geometrías propuesto de flujo de gases mediante técnicas de CFD, para establecer una metodología de trabajo que permita el estudio sistemático de la influencia de las distintas variables de operación en el rendimiento de la pila. Para ello se analizará un modelo 3-D de pila PEMFC, acoplado a la fluidodinámica (CFD; ANSYS versión 14.5 y procesos específicos de transporte y reacciones electroquímicas en una PEMFC).

Las ecuaciones de Navier-Stokes se obtienen aplicando los principios de conservación de la mecánica y la termodinámica a un volumen fluido. Haciendo esto se obtiene la llamada formulación integral de las ecuaciones. Para llegar a su formulación diferencial se manipulan aplicando ciertas consideraciones, principalmente aquella en la que los esfuerzos tangenciales guardan una relación lineal con el gradiente de velocidad (ley de viscosidad de Newton), obteniendo de esta manera la formulación diferencial que generalmente es más útil para la resolución de los problemas que se plantean en la mecánica de fluidos.

Como ya se ha dicho, las ecuaciones de Navier-Stokes son un conjunto de ecuaciones en derivadas parciales no lineales. No se dispone de una solución general para este conjunto de ecuaciones, y salvo ciertos tipos de flujo y situaciones muy concretas no es posible hallar una solución analítica; por lo que en muchas ocasiones es preciso recurrir al análisis numérico para determinar una solución aproximada. A la rama de la mecánica de fluidos que se ocupa de la obtención de estas soluciones mediante métodos numéricos se la denomina dinámica de fluidos computacional (CFD, de su acrónimo anglosajón Computational Fluid Dynamics).

Representan el principio de conservación del momento lineal aplicada a un fluido general:

$$\rho \frac{Du_i}{Dt} = \rho F_i - \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} [2\mu (e_{ij} - \frac{\Delta \delta_{ij}}{3})] \quad (1)$$

La ley de conservación de la masa se escribe:

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2)$$

En estas ecuaciones ρ representa la densidad, u_i ($i = 1,2,3$) las componentes cartesianas de la velocidad, F_i las fuerzas aplicadas sobre el cuerpo, como la gravedad, P la presión del fluido, y μ la viscosidad dinámica.

$$e_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (3)$$

Donde $\Delta = e_{ii}$ es la divergencia del fluido y δ_{ij} la delta de Kronecker. D / Dt es la derivada total o derivada material temporal siguiendo el fluido:

$$\frac{D}{Dt} (\cdot) \equiv \frac{\partial (\cdot)}{\partial t} + (v \cdot \nabla)(\cdot) \quad (4)$$

La no linealidad de las ecuaciones se debe precisamente al término relacionado con la derivada total. Cuando μ es uniforme sobre todo el fluido las ecuaciones de fluido se simplifican de la manera siguiente:

$$\rho \frac{Du_i}{Dt} = \rho F - \frac{\partial P}{\partial x_i} + \mu \left(\frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} + \frac{1}{3} \frac{\partial^2 u_j}{\partial x_i \partial x_j} \right) \quad (5)$$

O en forma vectorial:

$$\rho \frac{Du}{Dt} = \rho F - \nabla P + \mu \left(\frac{1}{3} \nabla (\nabla \cdot u) + \nabla^2 u \right) \quad (6)$$

Etapas de Simulación

La simulación para la optimización de las diferentes estructuras se realizó en el software comercial ANSYS 14.5® (ver fig. 2 y 3). Los gráficos que se obtuvieron se realizaron considerando parámetros de operación iguales para la geometría propuesta (fig. 4):

- Velocidad 0.02 m/s. Para el proceso de simulación no importa la velocidad definida, lo importante es la distribución de los gases en toda el área activa de la celda y considerar valores aleatorios de la velocidad. Se definió un valor bajo en la velocidad para analizar el comportamiento del gas a lo largo de toda la geometría.
- Temperatura ambiente 20° C. (Parámetro estándar de temperatura).
- La presión a la salida de 0.00 Pa (No hay presión por ser simulación)

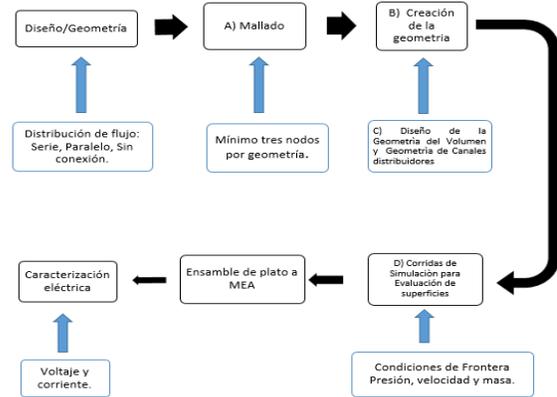


Figura 2 Metodología de Simulación

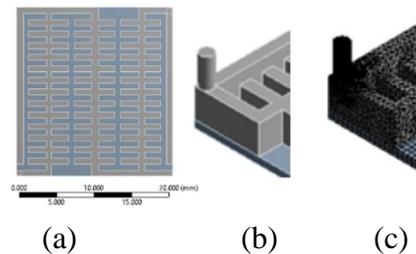


Figura 3 Etapas de Simulación de las geometrías

Se diseñaron las placas bipolares para una celda de combustible Tipo PEM, de acuerdo a la metodología de la fig. 2 y da como productos. La figura 3 muestra las etapas partiendo del diseño en 2D (fig. 3a), diseño en 3D (fig. 3b) utilizando Solid Works, y el mallado (fig. 3c) utilizando ANSYS.

La figura 4, representa la placa bipolar en 3D, en la geometría propuesta y describe el mallado de la geometría, la cual es más fina en la entrada y salida debido a que en esta superficie ocurre un cambio de dirección y distribuye el combustible.

El volumen superior tiene la función de distribución del flujo y el volumen inferior (rectángulo) fue la representación del difusor que en algunas celdas de combustible tipo PEM, puede ser de tela de carbón o papel toray, lo anterior para cumplir con la mecánica de fluidos que realiza el combustible para media celda.

Los resultados de la simulación se muestran para las variables presión y velocidad en la figura 5, las áreas superficiales presentan diferentes valores de comportamiento y cuando mayor sea la uniformidad que exista en la distribución de las variables se supone un mejor rendimiento en una celda de combustible.



Figura 4 Diseño de la Placa en 3D a partir de la simulación

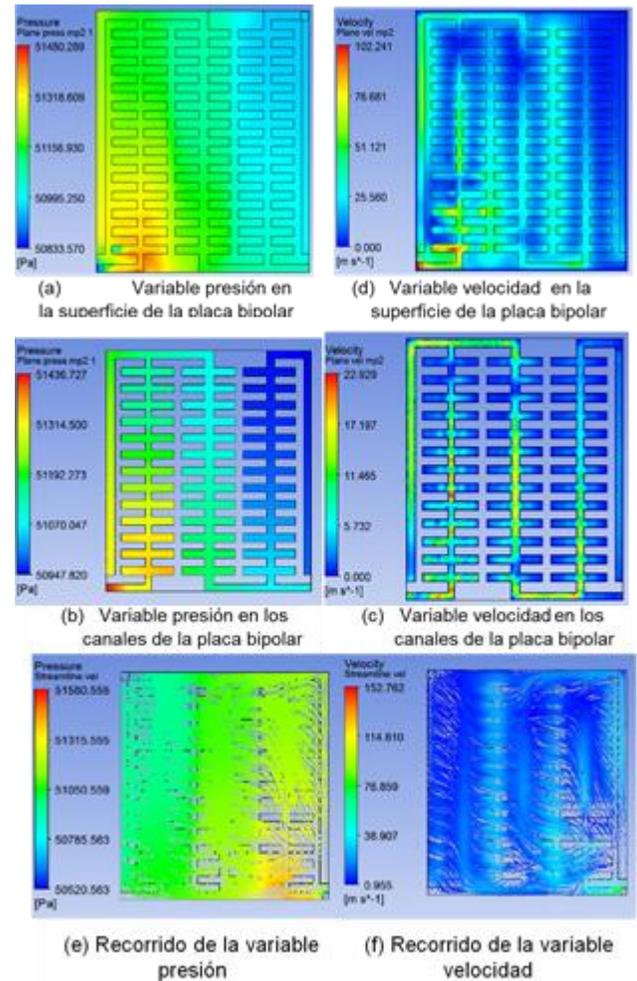


Figura 5 Resultados de la Simulación

Resultados de prueba de la simulación

La figura 5, muestra el comportamiento de las variables presión (5a) y velocidad (5b) en la superficie de la geometría. Se ve claramente cómo se comporta la presión que inicia con un valor alto color amarillo y disminuye a un valor intermedio en color verde con cambios hasta un color azul durante el recorrido de los gases hasta la salida (fig. 5a).

La figura 5a muestra la distribución de presión en cual como es esperado a la entrada del distribuidor presenta valores altos 51 436 Pa, durante su recorrido a lo largo de la superficie de la geometría y esta presión disminuye hasta 50 947 Pa, debido a que el fluido de trabajo se difunde hacia el difusor, para entrar posteriormente en contacto con el electrolito que estaba recubierto, disponible para la catálisis del fluido. La variable velocidad presentan un comportamiento más uniforme se puede ver en color claro con cambios y disminución a la salida color azul turquesa (fig. 5b). Los gases se desplazan a una velocidad 51.121 m/s, (color verde limón), disminuye la velocidad a 25.560 m/s (color azul claro) durante el recorrido, siendo 0 m/s a la salida (color azul turquesa). Se puede observar en mismo comportamiento en las paredes de los canales a de la geometría figuras 5c y 5d.

Conclusiones

En este trabajo se presentó una metodología para el diseño de placas bipolares para celdas de combustible partiendo de una de simulación mediante ANSYS. Esto representa grandes ventajas para el diseño y simulación y el análisis del elemento finito, facilita el proceso de diseño y mallado, lo que redundará en la obtención de resultados que facilitan los procesos posteriores a la etapa de simulación en trabajos de investigación de ésta índole.

Agradecimiento

Los autores desean externar su agradecimiento CIDETEQ, a la Universidad Tecnológica de San Juan Del Rio y la Universidad Autónoma de Querétaro, por los apoyos brindados durante el desarrollo del presente trabajo.

Referencias

- Akyalçın, L., & Kaytakoğlu, S. (2008). Optimization of structural combinations on the performance of a PEMFC's MEA. *Journal of power Sources*, 180(2), 767-772.
- Chang, S. M., & Kuo, J. K. (2008). Injection Molded PEM Fuel Cell Bipolar Plates Structure. *機械技師學刊*, 1(4), 14-20.
- Lee, P. H., Han, S. S., & Hwang, S. S. (2008). Three-Dimensional Transport Modeling for Proton Exchange Membrane (PEM) Fuel Cell with Micro Parallel Flow Field. *Sensors*, 8(3), 1475-1487.
- Liu, X., Guo, H., Ye, F., & Ma, C. F. (2007). Water flooding and pressure drop characteristics in flow channels of proton exchange membrane fuel cells. *Electrochimica Acta*, 52(11), 3607-3614.
- Middelmann, E., Kout, W., Vogelaar, B., Lenssen, J., & De Waal, E. (2003). Bipolar plates for PEM fuel cells. *Journal of Power Sources*, 118(1), 44-46.
- Obayopo, S. O., Bello-Ochende, T., & Meyer, J. P. (2012). Modelling and optimization of reactant gas transport in a PEM fuel cell with a transverse pin fin insert in channel flow. *International journal of hydrogen energy*, 37(13), 10286-10298.
- Paganin, V. A., Ticianelli, E. A., & Gonzalez, E. R. (1996). Development and electrochemical studies of gas diffusion electrodes for polymer electrolyte fuel cells. *Journal of Applied Electrochemistry*, 26(3), 297-304.
- Peng, L., Lai, X., Hu, P., & Ni, J. (2008). Flow channel shape optimum design for hydroformed metal bipolar plate in PEM fuel cell. *Journal of Power Sources*, 178(1), 223-230.

Rivas, S. V., Belmonte, M. R., Pérez-Quiroz, J. T., Cortes, M. A., Morón, L. E., Torres, J., & Orozco, G. (2008). Evaluation of materials for bipolar plates in simulated PEM fuel-cell cathodic environments. *Journal of New Materials for Electrochemical Systems*, 11(2), 81.

Shimpalee, S., & Van Zee, J. W. (2007). Numerical studies on rib & channel dimension of flow-field on PEMFC performance. *International Journal of Hydrogen Energy*, 32(7), 842-856.

Xiao, Y., Ming, P., Hou, M., Fu, Y., Yi, B., & Shao, Z. G. (2008). Flow distribution in parallel-channel plate for proton exchange membrane fuel cells. *Journal of Power Sources*, 185(2), 1009-1014.