

MODELADO DE UNA CELDA DE COMBUSTIBLE TIPO PEM

Néstor Ramírez Morales¹ Gabriel Izaguirre Maya¹ Nidia Fernanda Trujillo Sánchez²

¹ Departamento de Ingeniería Industrial y Manufactura
Universidad Autónoma de Cd. Juárez

² Pontificia Universidad Javeriana

Resumen

El presente trabajo muestra los resultados de un modelado de una celda de combustible tipo PEM usando el programa de MATLAB. La idea del trabajo nace de la necesidad de investigar y analizar nuevas fuentes de generación de energía para obtener electricidad. Por ello, el objetivo del trabajo consiste en generar un modelo matemático, es decir, un programa en código M que grafique el comportamiento característico de la celda de combustible, para ello se considerando las variables de temperatura de operación, densidad de corriente, presión de los reactantes y resistencia interna de la celda.

Palabras clave: Celda de combustible PEM, modelación

Introducción

Actualmente se emplean combustibles fósiles para la generación de energía eléctrica, los cuales arrojan a la atmósfera emisiones de gases de efecto invernadero y en consecuencia se genera contaminación del medio ambiente, es por ello que hoy en día las energías renovables y de manera muy particular las celdas de combustible son consideradas una forma alternativa de generación muy versátil, esto se debe a que una de sus principales características es que producen emisiones mínimas de contaminantes y al no ser una máquina térmica, ésta, no está limitada por el ciclo

de Carnot, que se define como un ciclo termodinámico ideal reversible entre dos fuentes de temperatura, en el cual el rendimiento es máximo y consta de cuatro etapas a saber: dos a temperatura constante (dos procesos isotérmicos), y otros dos sin absorción ni cesión de calor (dos procesos adiabáticos), lo cual favorece, porque permite tener una mayor eficacia de conversión, mucho más grande que la que puede conseguir un generador térmico (Domínguez, 2002). De ahí, que la eficiencia de las celdas de combustible varían de acuerdo a su tipo y diseño y son del 40% al 60%.

El tema encuentra justificación en el hecho que las celdas de combustible representan una gran alternativa de generación de energía eléctrica; en años recientes se ha incrementado la investigación y el desarrollo tecnológico, que sin duda vendrá a dar un giro interesante en el tema de generación de energía eléctrica. Dada la preocupación por la disponibilidad de los recursos no renovables (petróleo y sus derivados), se han realizado investigaciones con el fin de desarrollar nuevas formas de generación de energía eléctrica, que por una parte permitan seguir generando energía eléctrica de buena calidad (Ramírez, 2004).

Planteamiento del problema

La celda de combustible tipo PEM es un dispositivo capaz de generar electricidad a partir del hidrógeno (proveniente de diversas fuentes) y oxígeno de la atmósfera, produciendo como resultado calor y agua. El voltaje ideal o valor teórico de la celda de combustible es lineal, pero en la práctica el voltaje es menor de lo esperado teóricamente, dado que al comenzar su funcionamiento se produce una rápida caída de voltaje, una vez estabilizado éste, continua cayendo

lentamente, entre más demanda de corriente exista el voltaje cae rápidamente. En condiciones reales, intervienen factores que no se tomaron en cuenta en el análisis inicial, por lo tanto influyen en la salida de voltaje de la celda de combustible.

Los factores son básicamente pérdidas que se denominan polarizaciones a saber: Polarización de Activación, Polarización Ohmica o Resistiva y Polarización de Concentración. Es por ello que para resolver lo anterior es muy útil el modelado para entender el funcionamiento de la celda de combustible.

Antecedentes

El científico galés Sir William Robert Grove (1811-1896), considerado generalmente el padre de la celda de combustible, usando sus propios recursos monetarios y gran cantidad de platino, desarrolló un sistema basado en celdas de combustible/electrólisis usando electrodos de platino. La manera en que operaba su sistema fue la siguiente: inicialmente se sometió el sistema a un proceso de electrólisis, aplicando electricidad a una solución electrolítica de

ácido sulfúrico y agua, mediante el cual obtuvo hidrógeno y oxígeno.

Cuando se dejó de suministrar corriente eléctrica, el proceso de electrólisis se detuvo y el sistema se conectó a las terminales de unas celdas dispuestas en arreglo serie y el hidrógeno y oxígeno reaccionaron y el resultado fue la obtención de corriente eléctrica y agua. La figura 1 muestra la celda desarrollada por Grove. (Larminie, 2003; Castillo, 1999).

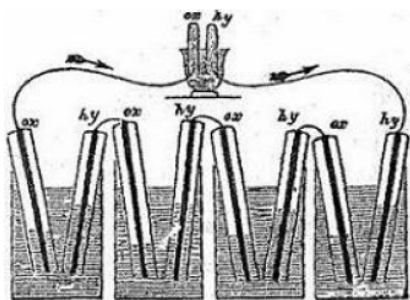


Figura 1. Celda Experimental de Grove

En 1898 W. Nernst sugirió que el sistema de celda de combustible, se basara en una reacción electroquímica tipo REDOX (oxidación - reducción), la cual puede tener más flexibilidad y más opciones de reactivos. Posteriormente en 1930 Francois Bacon de la Universidad de Cambridge en Inglaterra, utilizó sistemas alcalinos que no usaban metales nobles como catalizadores. En sus

experimentos encontró que los electrodos elaborados de níquel eran buenos catalizadores de las reacciones electroquímicas del hidrógeno y oxígeno, además observó que el desempeño de la celda se mejoraba mediante el incremento en la presión de alimentación de los reactivos, todo esto lo obtuvo por medio de pruebas que realizó a 40 atmósferas. En consecuencia, para mantener una baja presión diferencial en celdas de gran diámetro se emplearon electrodos de doble porosidad. La celda se muestra en la Figura 2. (Larminie, 2003; Castillo, 1999)



Figura 2. Sistema Alcalino de Bacon

Funcionamiento de una celda de combustible

La celda de combustible transforma la energía química en energía eléctrica, la obtención de electricidad se da sin la necesidad de ningún proceso de combustión. La estructura física de una

celda de combustible consiste en una capa de electrólito (que es una sustancia que contiene iones libres, que se comporta como un medio conductor eléctrico) en contacto con dos electrodos, uno positivo (el cátodo), y uno negativo (el ánodo), los electrodos disponen de una conexión eléctrica entre ambos electrodos, tal y como se muestra en la Figura 3.

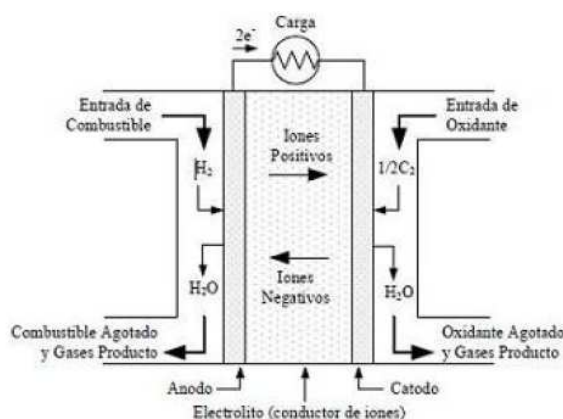
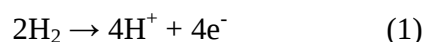


Figura 3. Diagrama Esquemático de una celda de combustible

La celda de combustible funciona de forma similar a una batería, su funcionamiento está basado en las reacciones electroquímicas entre un combustible que es el hidrógeno y un oxidante que es el oxígeno. El hidrógeno fluye a través de los canales de alimentación del ánodo y se difunde a través de la capa de difusión del mismo y alcanza la capa catalizadora donde es oxidado liberando con ello protones y

electrones, la reacción que ocurre se muestra en la ecuación 1. (Domínguez, 2002)



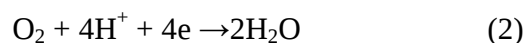
Donde:

H₂: Hidrógeno en estado gaseoso.

H⁺: Protón de Hidrógeno.

e⁻: Electrón de Hidrógeno.

Los electrones liberados no pueden atravesar la membrana y por tanto son conducidos a través de la capa catalizadora del ánodo y llegan al cátodo por el circuito externo, los protones son transportados a través de la membrana hacia la capa catalizadora del cátodo, a su vez el oxígeno entra en los canales de alimentación del cátodo y se difunde a través de la capa de difusión del mismo hacia la capa catalizadora donde reacciona con los protones y electrones del hidrógeno para formar agua. La reacción se resume en las siguientes ecuaciones:



Donde:

O₂: Oxígeno en estado gaseoso.

H⁺: Protón de Hidrógeno.

e^- : Electrón de Hidrógeno.

H_2O : Agua.

La reacción global que ocurre en la celda es:



Donde:

H_2 : Hidrógeno en estado gaseoso.

O_2 : Oxígeno en estado gaseoso.

H_2O : Agua.

Las reacciones antes descritas son las reacciones básicas para poder comprender el funcionamiento de la celda de combustible.

Tipos de celdas de combustible

Existe una gran variedad de celdas de combustible y se clasifican de acuerdo a las siguientes características: tipo de uso, tipo de combinación de combustible, Electrolito utilizado, temperatura de operación, potencia generada (EG&G, 2000). La temperatura de operación en la celda de combustible se considera uno de los parámetros de mayor importancia, ya que repercute directamente en el tipo de combustible que puede emplearse. En las celdas de baja temperatura con electrolitos acuosos, el combustible que predomina es el hidrógeno, en cambio en

las celdas de alta temperatura existe más diversidad en el uso de combustibles, lo cual se debe a su rapidez en la cinética de reacción y a una menor necesidad de actividad catalizadora en reacciones a altas temperaturas. De acuerdo al Manual de celdas de combustible (EG&G, 2000) la clasificación más generalizada es la relacionada con el tipo de electrolito usado.

Trabajos previos

Dentro de este contexto, cabe mencionar que existen trabajos previos sobre el modelado de una celda de combustible, por ejemplo (C.R Bordallo, C. Garcia, J. Brey de Hynergreen Technologies y J.M. Maza, 2007) del departamento de Ingeniería Eléctrica de la Universidad de Sevilla en su artículo Modelado dinámico de una celda de combustible tipo PEM para aplicaciones residenciales, presentaron un trabajo el cual consiste en un modelo simple para una celda de combustible PEM de 250 W, tomando en cuenta un polinomio de aproximación a su estado de equilibrio, las ecuaciones que se utilizan para el modelo consisten en: La difusión del gas en los electrodos, ecuaciones de conservación de material, ecuación de

Nernst, voltaje de salida y las pérdidas óhmicas. Se tomaron medidas para ajustar

el comportamiento estacionario de la celda para su curva característica.

Tabla 1. Tipos de celdas de combustible de acuerdo a su temperatura de operación

Tipo de celda y tipo de electrolito usado	Abreviatura	Electrolito empleado	Valor aproximado de temperatura de operación
Celda de combustible de electrolito polimérico	PEMFC	Membrana de intercambio protónico	50°C - 80°C
Celda de combustible tipo alcalina	AFC	Hidróxido de potasio	250°C
Celda de combustible de ácido fosfórico	PAFC	Ácido fosfórico	220°C.
Celda de combustible de carbonato fundido	MCFC	Carbonato fundido (líquido)	650°C
Celda de combustible de óxido sólido	SOFC	Cerámico	800°C – 1000°C

Metodología

Esta investigación implica desarrollar un modelo computacional basado en MATLAB, lo cual es muy importante, ya que con ello se obtienen resultados, los cuales proyectan una perspectiva de la forma en que se comporta una celda de combustible, para que con esto se puedan analizar los factores más importantes en la dinámica de funcionamiento de la celda de combustible para que finalmente se realice un análisis de los resultados obtenidos y obtener conclusiones.

El programa que se realizó en MATLAB para implementar el modelo necesita de ciertos parámetros para dar

como resultado dos gráficas, la primera de ellas, consiste en la curva de polarización de la celda de combustible; la segunda, corresponde a la potencia generada en la celda de combustible. Los parámetros que se requieren para que el modelo funcione son: temperatura de operación, densidad de corriente de intercambio, densidad de corriente límite, presión, área de la celda, número de celdas y resistencia interna. Se realizaron varias pruebas utilizando valores típicos de una celda de combustible tipo PEM.

La metodología para el desarrollo de este trabajo consta de los pasos siguientes:

1. Familiarización con el funcionamiento de la celda de combustible.
2. Desarrollo del modelo de la celda de combustible.
3. Diseño de un programa en MATLAB utilizando el modelo que represente el comportamiento de la celda de combustible.
4. Obtención de resultados y corrección de errores.

El desempeño ideal de la celda de combustible

El rendimiento ideal de una celda de combustible está definido por la ecuación de Nernst, la cual provee la relación entre el potencial estándar ideal (E^0) para la reacción de la celda y el potencial de equilibrio ideal (E). A continuación se muestra la ecuación de Nernst: (Larminie, 2003)

$$E_{Nernst} = E^0 + \frac{\Delta S}{2F}(T - T_{Ref}) + \frac{RT}{2F}[\ln(P_{H_2}) + \ln(P_{O_2}^{\frac{1}{2}})] \quad (4)$$

Donde:

E^0 : Potencial de equilibrio.

F : Constante de Faraday = 96485.5 C/mol

.

ΔS : Cambio en la entropía (J/mol K)

$(P_{H_2}); (P_{O_2})$: Presión de gas del hidrógeno y oxígeno respectivamente (atm).

R : Constante de gas universal = 8.31452 J/mol*K.

T : Temperatura de Operación de la Celda de Combustible (K).

T_{Ref} : Temperatura de referencia (K).

El potencial entre los electrodos definido como E^0 se define como la medida cuantitativa del máximo potencial de la celda, voltaje a circuito abierto, y está definido por la siguiente fórmula (Grimes, 2000):

$$E^0 = \frac{-\Delta g_f}{2F} \quad (5)$$

Donde:

Δg_f : Cambio en la energía libre de Gibbs de formación (El signo negativo en la ecuación indica pérdida de energía)

F : Constante de Faraday. (La carga presente en un mol de electrones).

Utilizando valores asociados para el modelo electroquímico de la celda de combustible tipo PEM, la ecuación de Nernst queda de la siguiente manera:

$$E_{Nernst} = 1.229 - 8.4587 \times 10^{-4}(T - 298.15) + 4.3086 \times 10^{-5} T [\ln(P_{H_2}) + \ln(P_{O_2}^{\frac{1}{2}})] \quad (6)$$

El potencial estándar ideal E^0 de una celda de combustible en la cual reaccionan H_2 y O_2 es de 1.229 volts con agua en estado líquido y 1.18 volts con agua en estado gaseoso (Larminie, 2003). El potencial de la celda representa el cambio en la energía libre de Gibbs, resultado de la reacción del hidrógeno y del oxígeno. En la figura 4 se muestra la relación que guarda el potencial ideal E^0 con la temperatura de operación de la celda, el potencial de la celda a alta temperatura que corresponde a la reacción donde el agua está en estado gaseoso, el valor de potencial a condiciones estándar es 1.18 volts.

Voltaje En la Celda de Combustible

El valor teórico de la celda de combustible a circuito abierto se determina por la siguiente ecuación:

$$E = \frac{E_{\Delta G}}{2F} \quad (7)$$

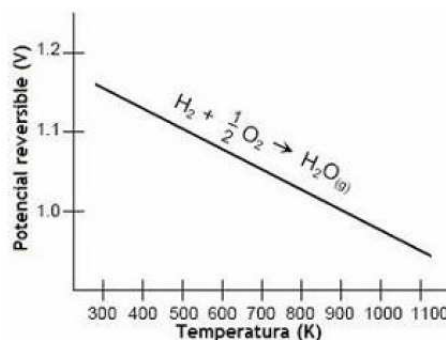


Figura 4. Potencial ideal de la celda de combustible

El voltaje que ofrece la celda de combustible tipo PEM por debajo de los 100°C es de aproximadamente 1.22 V, sin embargo, al momento de construir y poner en funcionamiento la celda, se observa que el valor del voltaje es menor. La figura 5 muestra el comportamiento general de la celda de combustible, conocida también como curva de polarización.

Los puntos clave que describen la gráfica anterior son:

- **Región 1 (Polarización de Activación):** Al inicio el voltaje a circuito abierto es menor que el valor teórico, se produce una caída de voltaje no lineal.
- **Región 2 (Polarización Óhmica o Resistiva):** El voltaje cae lentamente, se puede considerar lineal.

- Región 3 (Polarización por Concentración o Transporte de Masa): Se produce nuevamente una caída de voltaje.

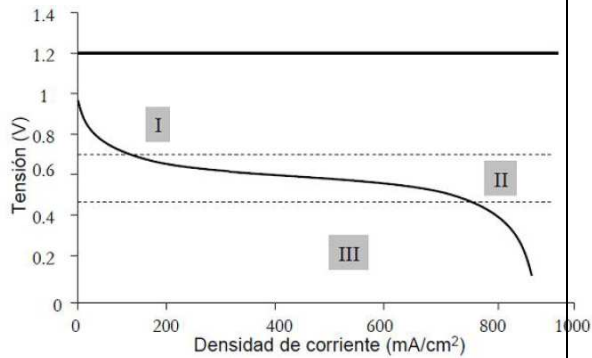


Figura 5. Curva de Polarización de Celda de Combustible Tipo PEM

Con base a lo anterior, la ecuación que determina el voltaje para la celda de combustible es:

$$E_{C.C} = E_{Nernst} - V_{Act} - V_{Ohm} - V_{Con} \quad (8)$$

Donde:

E_{CC} : Voltaje de la Celda de Combustible.

E_{Nernst} : Potencial termodinámico de la celda.

V_{Act} : Polarización de Activación.

V_{Ohm} : Polarización Óhmica.

V_{Con} : Representa la caída de voltaje que resulta de la concentración o transporte de masas de hidrógeno y oxígeno.

Resultados

En este apartado se dan a conocer las diversas pruebas realizadas, las cuales incluyen los parámetros a considerar de acuerdo a las características del programa implementando y los resultados obtenidos del modelo propuesto, con el objetivo de comparar los resultados y dar conclusiones.

Prueba 1

La primer prueba que se desarrolló fue utilizando diversos valores para determinar si el modelo propuesto genera la curva característica de la celda de combustible tipo PEM, el primer valor es: $T = 25^{\circ}\text{C}$; $A = 25\text{cm}^2$; $j_1 = 1.4\text{A}/\text{cm}^2$; $j_0 = 10^{-2}$. La figura 6 muestra las gráficas de la curva de polarización de la celda de combustible en función de la densidad de corriente (j) y la potencia generada en función de la misma densidad de corriente.

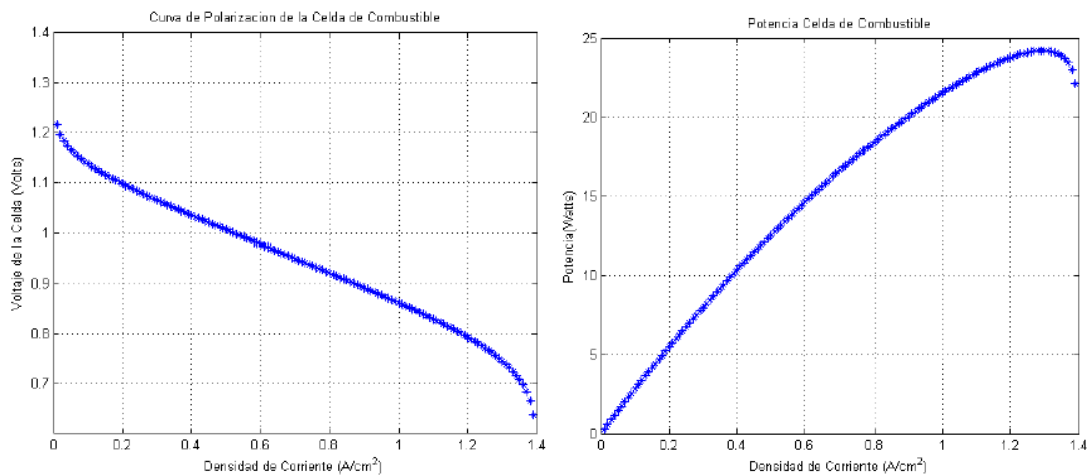


Figura 5. Gráficas de voltaje y potencia genera en la celda de combustible de la prueba 1

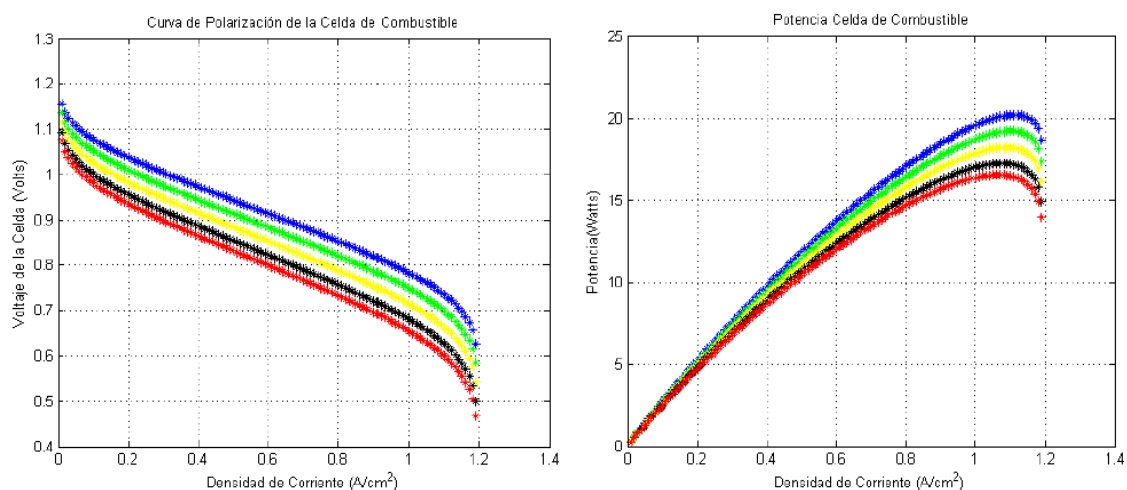


Figura 6. Gráficas de voltaje y potencia genera en la celda de combustible de la prueba 2

Las graficas anteriores muestran en una primera instancia, el perfil del voltaje de salida que se obtiene de la celda de acuerdo a los parámetros establecidos y la segunda grafica muestra el perfil de potencia que se consume la celda (en watts)

Prueba 2

La segunda prueba consistió en variar la temperatura, la tabla 2 muestra los valores del voltaje y potencia obtenidos en la segunda prueba realizada.

Tabla 2. Valores de temperatura para la prueba 2

<i>Temperatura °C</i>	<i>V_{Inicial} V</i>	<i>V_{medio} V</i>	<i>V_{final} V</i>	<i>P_{Inicial} W</i>	<i>P_{Maxima} W</i>	<i>P_{Final} W</i>
25 azul	1.1575	0.9168	0.6263	0.2893	20.2028	18.6343
45 verde	1.1359	0.8864	0.5841	0.2839	19.1990	17.3798
65 amarillo	1.1143	0.8561	0.5420	0.2785	18.2138	16.1254
85 negro	1.0928	0.8258	16.1254	0.2732	17.2474	14.8709
100 rojo	1.0766	0.8030	0.4682	0.2691	16.5361	13.9300

Prueba 3

La tercera prueba consiste en variar la resistencia interna de la celda, la tabla 3

muestra los valores del voltaje y potencia obtenidos para dicha prueba realizada:

Tabla 3. Valores de resistencia para la prueba 3

<i>R_{interna} Ωcm²</i>	<i>V_{Inicial} V</i>	<i>V_{medio} V</i>	<i>V_{final} V</i>	<i>P_{Inicial} W</i>	<i>P_{Maxima} W</i>	<i>P_{Final} W</i>
.01 azul	1.1593	1.0230	0.8405	0.2898	25.9862	25.0068
.1 verde	1.1584	0.9699	0.7334	0.2896	23.0460	21.8205
.3 amarillo	1.1564	0.8519	0.4954	0.2891	16.9373	14.7400
.5 negro	1.1544	0.7339	0.2574	0.2886	12.1857	7.6595

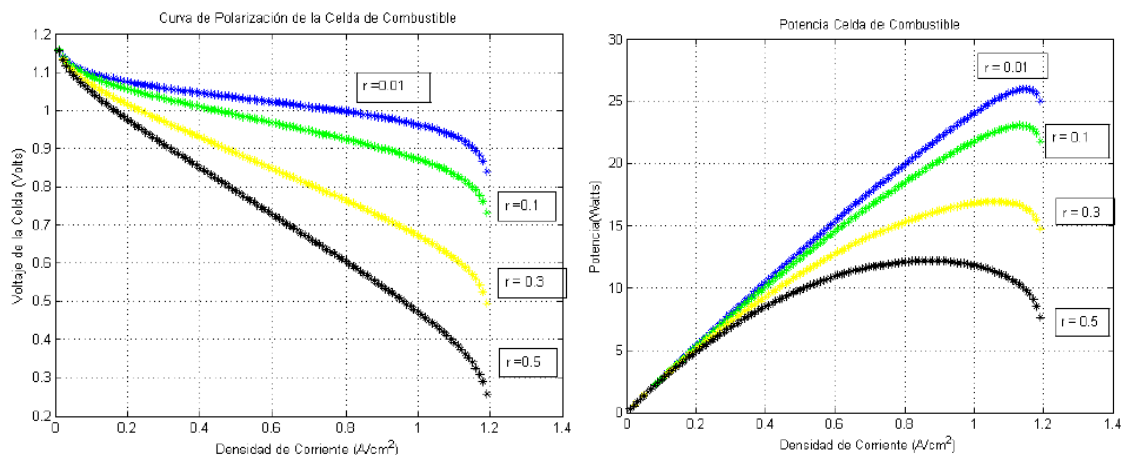


Figura 6. Gráficas de voltaje y potencia genera en la celda de combustible de la prueba 3

Las graficas anteriores muestran el perfil de voltaje de salida de la celda de acuerdo a los valores de la resistencia interna de la celda, de la cual se propusieron diferentes

valores (ver tabla 3) y la segunda grafica son los correspondientes valores en watts de la grafica de potencia de la celda de combustible

Conclusiones

Los resultados obtenidos en el modelo son fundamentales para el diseño de una celda de combustible ya que muestra los efectos que causan los factores que influyen en el desempeño de la celda, a continuación se menciona lo anteriormente dicho:

- Temperatura: Afecta el desempeño de la celda de combustible ya que conforme aumenta la temperatura de operación el voltaje y potencia se va reduciendo, por lo que se recomienda contar con un dispositivo que mantenga la temperatura de operación estable.
- Resistencia Interna: Entre mayor resistencia tenga la celda de combustible más rápido cae el voltaje, por lo que se recomienda trabajar con resistencias internas bajas.
- Densidad de Corriente de Intercambio: A mayor densidad de corriente de intercambio menor es la pérdida de voltaje, y como la densidad de corriente de intercambio depende de la composición del electrodo, el estado de la superficie del

electrodo y la concentración de los reactantes, la composición del electrólito, y la temperatura. Se recomienda tener en cuenta lo anterior para obtener densidad de corriente de intercambio alta.

- Densidad de Corriente Límite: A mayor densidad de corriente límite el voltaje decae hasta que alcanza ese valor.

Estas conclusiones que se obtienen de las diferentes pruebas se compararon con otros trabajos similares realizados por otros autores, los cuales emplearon consideraciones similares, por tanto los resultados obtenidos en estas pruebas concuerdan con otros resultados obtenidos de otras investigaciones similares, la contribución de este trabajo se centra en el hecho de que este tipo de modelado es de gran utilidad para considerar escenarios distintos y sobretodo considerar los circuitos electrónicos necesarios para acondicionar el voltaje de salida que se obtiene de la celda de combustible.

Referencias

Bordallo, C.R; García C., J. Brey; Maza J.M. 2007. Dynamic model and simulations of a PEM fuel cell for residential applications. España. *International Conference on renewable energies and power quality (ICREPQ'07)*, disponible en línea <http://www.icrepq.com/icrepq07/345-bordallo.pdf>

Castillo Cano, Ulises. 1999. Las Celdas de Combustible: verdades sobre generación de electricidad limpia y eficiente vía electroquímica. *México Boletín IIE*. Vol. 23. Número: 5.. [En línea]. [Accesado el 18 de enero del 2010]. Disponible en el World Wide Web: <http://www.iie.org.mx/reno99/apli.pdf>

Domínguez Sánchez, Juan José. 2002. Celdas de Combustible I. *Anales de Mecánica y Electricidad*. Vol. 79. Número: 2. Pags. 14 - 18.. [En línea]. [Accesado el 18 de enero del 2010]. Disponible en el World Wide Web: www.icaei.es/publicaciones/anales_get.php?id=619

EG&G Services Parsons, Inc. 2000. Science Applications International Corporation.

Fuel Cell Handbook, Estados Unidos. U.S. Department of Energy Office of Fossil Energy National Energy Technology Laboratory. (5ª Edición). Pág. 1.1, 1.3, 1.4, 1.9, 1.10, 1.11, 1.12, 1.13

Grimes G. Patrick. 2000. Historical Pathways for Fuel Cells. Estados Unidos. *Battery Conference on Applications and Advances. The Fifteenth Annual*. pags. 41 - 45. [En línea]. [Accesado el 20 de enero del 2010]. Disponible en el World Wide Web: <http://ieeexplore.ieee.org/stamp/stamp.jsp?tp=&arnumber=891972&userType=inst>

Larminie, James. Dicks, Andrew. 2003. *Fuel Cell Systems Explained*. Segunda Edición, Editorial Wiley. Estados Unidos.

Ramírez Morales, Néstor. 2004. *La Tecnología de Celdas de Combustible y su Interfase Electrónica de Potencia para Aplicaciones Domésticas e Industriales*. Tesis de Maestría, Centro Nacional de Investigación y Desarrollo Tecnológico.

CULCyT