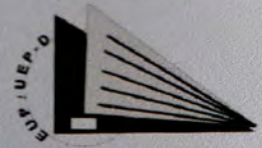


Universidad
del País Vasco

Euskal Herriko
Unibertsitatea

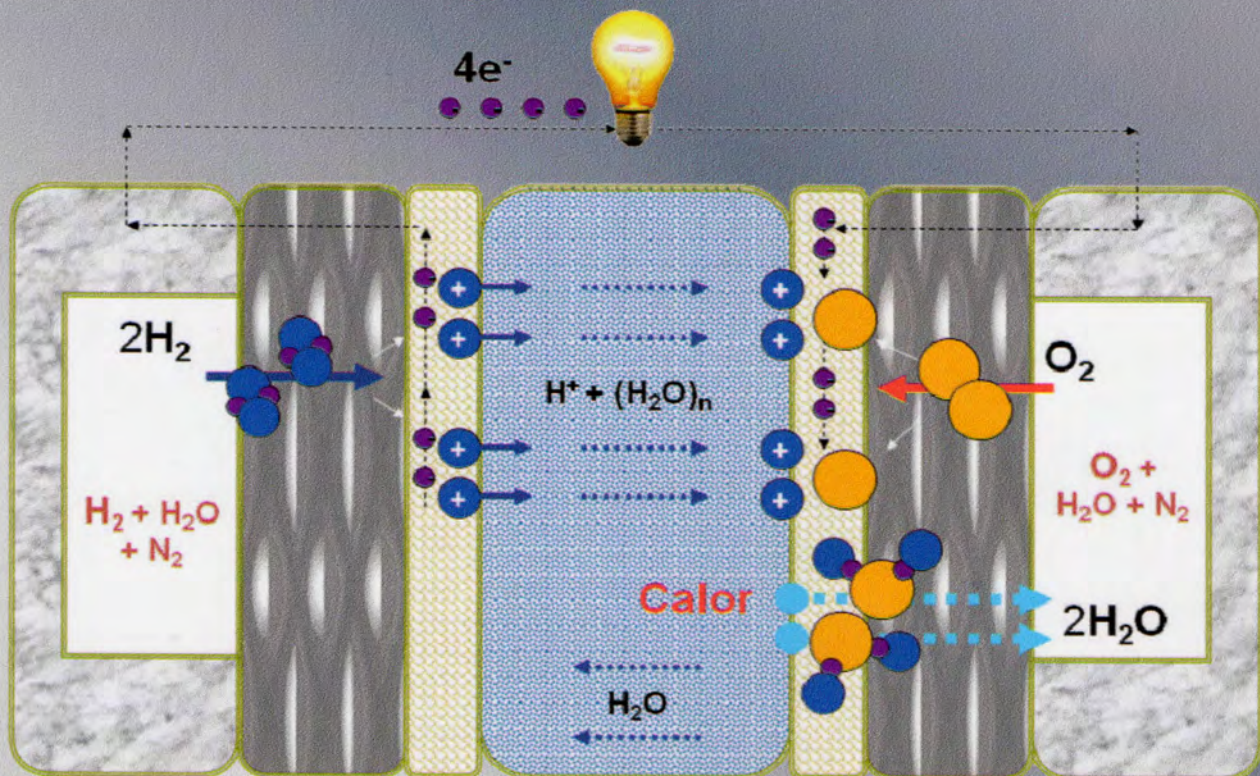
Donostiako Unibertsitate
Eskola Politeknikoa



Escuela Universitaria Politécnica
de Donostia-San Sebastián

TESIS
DOCTORAL

INFLUENCIA DEL DISEÑO DE LOS CANALES DE FLUJO EN EL RENDIMIENTO DE UNA PILA DE COMBUSTIBLE DE MEMBRANA DE INTERCAMBIO PROTÓNICO (PEMFC)



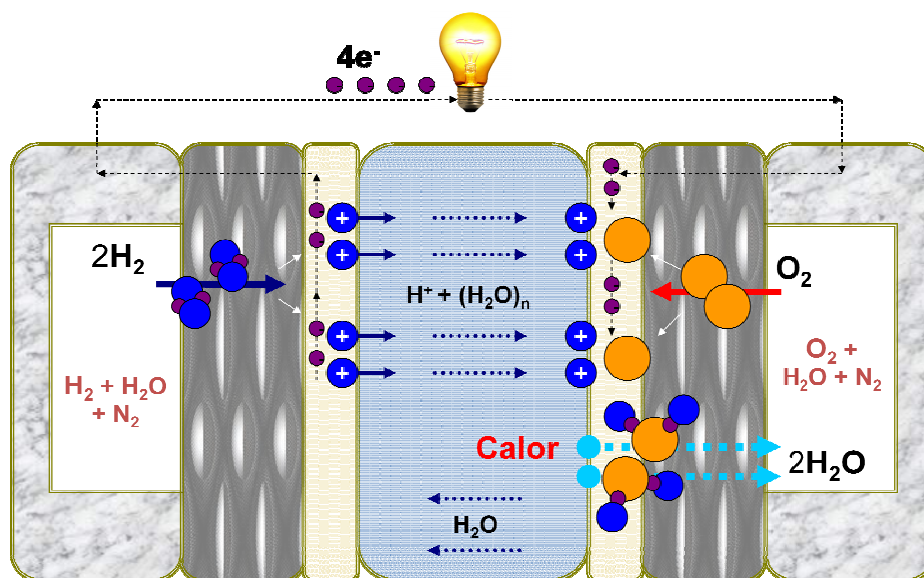
Ángel Pérez Manso

Directores:

Florencio Fernández Marzo
Mikel Garmendia Mujika

TESIS DOCTORAL

INFLUENCIA DEL DISEÑO DE LOS CANALES DE FLUJO EN EL RENDIMIENTO DE UNA PILA DE COMBUSTIBLE DE MEMBRANA DE INTERCAMBIO PROTÓNICO (PEMFC)



Ángel Pérez Manso

Directores:

Dr. Florencio Fernández Marzo

Dr. Mikel Garmendia Mujika

*A Puri, que siempre ha estado a mi lado,
por todo su apoyo y amor*

*A mis tres hijos, Aritz, Leire y Malen,
que me llenan de orgullo y felicidad*

-¿Y qué se quemará en vez de carbón?

-¡Agua! -respondió Ciro Smith.

-¡Agua! -exclamó Pencroff-. ¡Agua para calentar las calderas de los vapores y de las locomotoras, agua para calentar el agua!

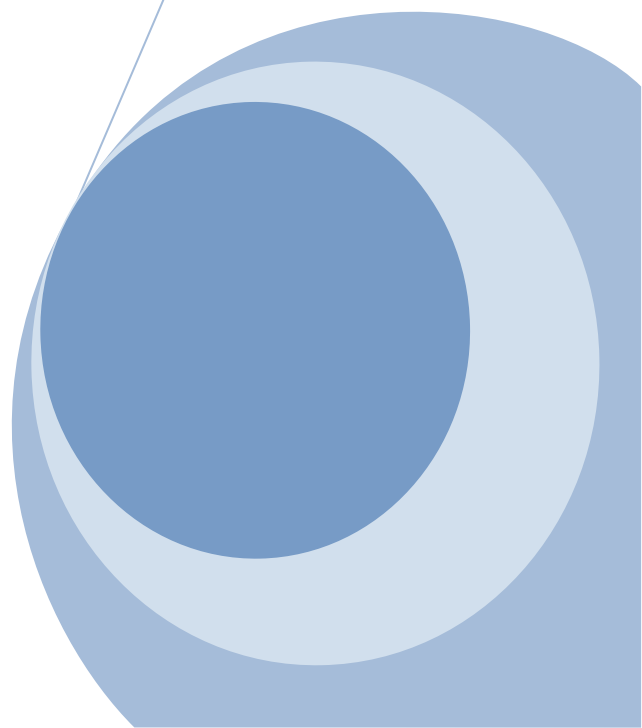
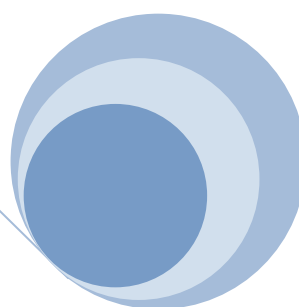
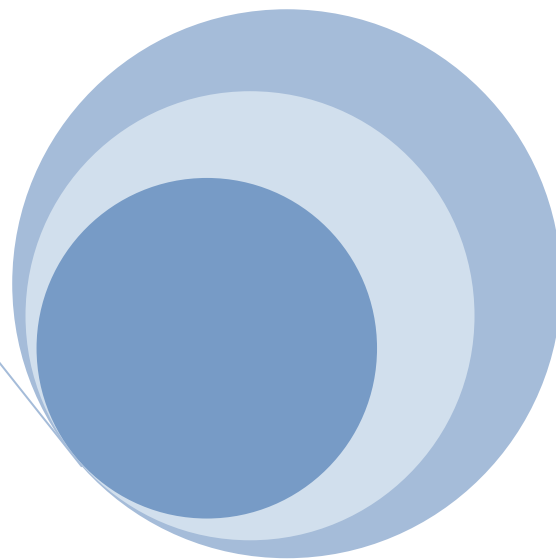
-Sí, amigo mío -repuso Ciro Smith-; agua descompuesta sin duda por la electricidad y que llegará a ser entonces una fuerza poderosa y manejable... creo que el agua se usará un día como combustible, que el hidrógeno y el oxígeno que la constituyen, utilizados aislada y simultáneamente, producirán una fuente de calor y de luz inagotable y de una intensidad mucho mayor que la de la hulla... El agua es el carbón del porvenir.

Julio Verne

LA ISLA MISTERIOSA

(1875)

Agradecimientos



Este es un trabajo que empezó a gestarse en el año 2004 y que culmina ahora, siete años después, con la redacción de esta memoria. Un proceso largo y no exento de múltiples adversidades y reveses. A la dificultad propia de la investigación, en ocasiones se añadieron las nefastas consecuencias de una OPA entre dos grupos de desarrollo de software, la falta de apoyo económico y otros contratiempos de tipo personal. Una carrera de obstáculos que hubiera sido imposible completar sin la colaboración y el apoyo de muchas personas. A todas ellas, mi más sincero reconocimiento.

En primer lugar, no encuentro palabras para expresar mi agradecimiento al Dr. Florencio Fernández Marzo, por ofrecerme la oportunidad de trabajar junto a él, por todo lo que me ha enseñado, porque siempre creyó en mí, por el compromiso demostrado más allá de la obligación y por su amistad, sobre todo cuando las circunstancias eran más desfavorables. Así mismo, al Dr. Mikel Garmendia Mujika, por su gran apoyo en los momentos más difíciles y por todos sus sabios consejos.

Me gustaría hacer extensible mi agradecimiento al Departamento de Ingeniería Química y del Medio Ambiente de la UPV/EHU, y más concretamente al personal del Laboratorio de Química Industrial e Ingeniería Electroquímica de la Escuela Universitaria Politécnica de Donostia-San Sebastián, Agustín y compañía, donde se inició este trabajo.

Igualmente, gracias al Departamento de Expresión Gráfica y Proyectos de Ingeniería de la UPV/EHU, y en especial a mis compañeros del mismo (Iñaki y su número áureo, Xabi, Ionan, Jero...) por su apoyo moral durante la realización de este trabajo.

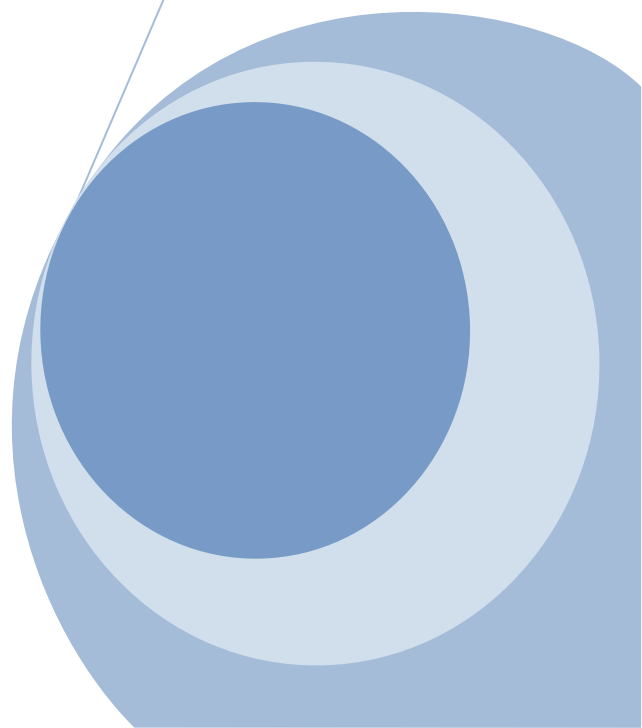
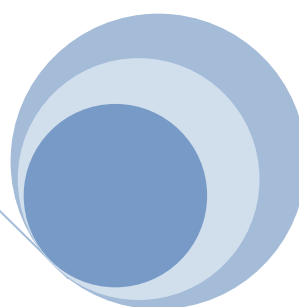
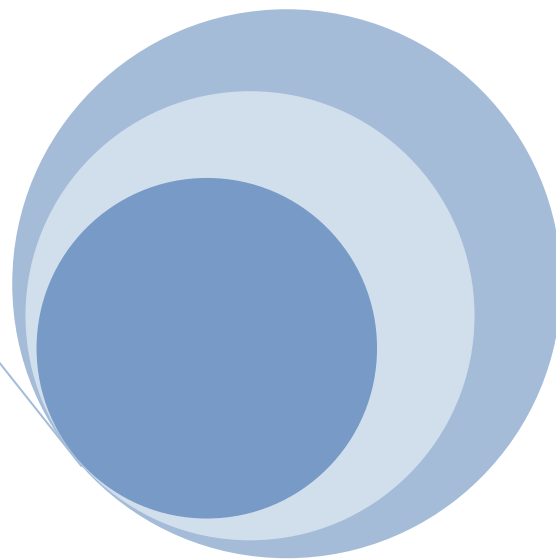
Debo un especial reconocimiento al Laboratorio de Investigación en Tecnologías de la Combustión (LITEC), y especialmente al Dr. Félix Barreras Toledo y al Dr. José Barranco Riveros, por los ensayos realizados en su laboratorio, así como por sus enriquecedores consejos y disponibilidad para ayudarme.

Igualmente, agradecer a Eurotécnica S.A el mecanizado de las placas de grafito y a Talleres Mecánicos Manuel Echeverría S. A. la fabricación de las placas terminales.

También quisiera agradecer a la Escuela Universitaria Politécnica de Donostia-San Sebastián de la Universidad del País Vasco y a la Exma. Diputación Foral de Gipuzkoa (OF 94/2008) la ayuda económica prestada. Así mismo, agradecer al Servicio General de Informática Aplicada a la Investigación (SGI/IZO-SGIker) de la UPV/EHU los recursos de cómputo disponibles para el desarrollo de este trabajo (Licencias para el software STAR-CD 3.26 y cluster Arina), y la inestimable ayuda de Txema y Edu para resolver cuantas dificultades técnicas aparecieron.

Por último, el agradecimiento más profundo y sentido es para mi familia. Todo esto nunca hubiera sido posible sin su apoyo incondicional. A mi mujer e hijos, muchas gracias por vuestra comprensión y paciencia.

Índice General



Índice General

1. Índice General	v
2. Índice de Figuras.....	ix
3. Índice de Tablas	xvi
4. Glosario	xvii

1. Índice General

CAPÍTULO 1: Objetivos y contenido de la tesis.....	5
1.1. Objetivos.....	5
1.2. Contenido de la tesis	6
CAPÍTULO 2: Introducción	13
2.1. Antecedentes.....	13
2.2. Pilas de combustible.....	15
2.2.1. Historia.....	16
2.2.2. Tipos de pilas de combustible	18
2.2.3. Comparativa de las diferentes pilas de combustible.....	29
2.3. Funcionamiento de una PEMFC	29
2.3.1. Componentes de una pila de tipo PEM	29
2.3.2. Capacidad energética útil. Energía libre de Gibbs	32
2.3.3. Potencial teórico de la pila	33
2.3.4. Influencia de la temperatura	34
2.3.5. Influencia de la presión.....	35
2.3.6. Eficiencia teórica de la pila	37
2.3.7. Rendimiento de la pila. Curva V-I	38
2.3.8. Influencia de la geometría en el rendimiento	40
2.4. Referencias	41
CAPÍTULO 3: MODELO DE UNA PEMFC	49
3.1. Introducción	49
3.2. Modelo matemático	51
3.2.1. Antecedentes.....	52
3.2.2. Modelo geométrico y dominio computacional	53
3.2.3. Desarrollo del modelo	55
3.2.4. Notación	57

3.2.5. Ecuaciones	60
3.3. Referencias	66
CAPÍTULO 4: Optimización del proceso de simulación numérica de prototipos de PEMFC	75
4.1. Introducción	75
4.1.1. Antecedentes.....	76
4.2. Simulación numérica	77
4.2.1. Preprocesado.....	78
4.2.2. Cálculo.	85
4.2.3. Postprocesado.	85
4.3. Protocolo de simulación numérica de modelos de PEMFC.....	85
4.3.1. Planteamiento inicial	85
4.3.2. Optimización del procedimiento	88
4.4. Conclusiones.....	92
4.5. Ejemplos de aplicación del protocolo.....	93
4.5.1. Monocelda con canal doble de tipo serpentín.....	93
4.5.2. Monocelda comercial Heliocentris	98
4.6. Referencias	102
CAPÍTULO 5: Influencia de los parámetros geométricos en el rendimiento de una PEMFC. Revisión	109
5.1. Introducción	109
5.2. Campo de flujo	109
5.3. Sentido de circulación del flujo	116
5.4. Longitud del canal y número de canales	117
5.5. Uso de deflectores en la dirección del flujo	119
5.6. Parámetros geométricos de la sección transversal del canal de flujo	121
5.6.1. Forma de la sección transversal	121
5.6.2. Anchura del canal y del <i>rib</i>	123

5.6.3. Profundidad del canal.....	124
5.6.4. Relación de aspecto de la sección transversal del canal: alto/ancho.....	127
5.7. Nuevas geometrías.....	128
5.8. Conclusiones.....	133
5.9. Referencias.....	136
CAPÍTULO 6: Análisis numérico de la influencia de los parámetros geométricos de la sección transversal del canal de flujo en una PEMFC.....	151
6.1. Introducción.....	151
6.2. Modelo matemático.....	152
6.2.1. Geometría y operación.....	153
6.3. Resultados y discusión.....	157
6.4. Conclusiones.....	179
6.5. Referencias.....	180
CAPÍTULO 7: Diseños alternativos a los canales de flujo de tipo serpentin en el diseño de placas para pilas tipo PEM.....	189
7.1. Introducción.....	189
7.1. Análisis numérico.....	191
7.1.1. Modelo matemático.....	191
7.1.2. Geometría y operación.....	191
7.1.3. Resultados del análisis numérico.....	196
7.1.4. Conclusiones.....	203
7.1. Experimental.....	204
7.1.1. Diseño.....	205
7.1.2. Fabricación y montaje.....	211
7.1.3. Test de laboratorio.....	213
7.1.4. Resultados experimentales.....	216
7.1.5. Conclusiones.....	220

7.2. Trabajos futuros	222
7.3. Referencias	222
CAPÍTULO 8: Contribución científica	231
8.1. Introducción	231
8.2. Patente	231
8.3. Artículos publicados en revistas científicas	231
8.4. Capítulo de libro	231
8.5. Contribuciones a congresos	232
CAPÍTULO 9: ANEXOS	235

2. Índice de Figuras

Figura 2-1. Esquema de funcionamiento de una pila de combustible de hidrógeno	15
Figura 2-2. Celda electrolítica de Grove. 1842	17
Figura 2-3. Esquema de funcionamiento de una pila de combustible de tipo PEMFC	20
Figura 2-4. Esquema de funcionamiento de una pila de combustible de tipo DMFC.....	21
Figura 2-5. Esquema de funcionamiento de una pila de combustible de tipo AFC	23
Figura 2-6. Esquema de funcionamiento de una pila de combustible de tipo PAFC	24
Figura 2-7. Esquema de funcionamiento de una pila de combustible de tipo MCFC	26
Figura 2-8. Esquema de funcionamiento de una pila de combustible de tipo SOFC	27
Figura 2-9. Sección transversal de una monocelda de pila de combustible de tipo PEM.....	29
Figura 2-10. Esquema de montaje de un stack	31
Figura 2-11. Curva típica de polarización de una pila de tipo PEM	39
Figura 3-1. Esquema de funcionamiento de una pila de combustible de hidrógeno y fenómenos de transporte	50
Figura 3-2. Modelo geométrico de una monocelda con canal de flujo simple de tipo serpentin ..	54
Figura 3-3. Modelo geométrico de la sección transversal de un canal de flujo y dominio computacional.....	54
Figura 4-1. Fases y etapas para el desarrollo de una simulación numérica	78
Figura 4-2. Tipología de elementos utilizados en STAR-CD.....	79
Figura 4-3. Los valores para cada magnitud calculada asignados al centro de gravedad de cada elemento N1, se obtienen por interpolación de los resultados de los nodos de dicho elemento (n1-n8).....	80
Figura 4-4. Calidad de la malla y facilidad para su generación automática según la forma del elemento utilizado	81
Figura 4-5. Procedimiento para la generación semiautomática del mallado mediante pro-STAR AutoMesh module, pro-am.....	82
Figura 4-6. Resultado de los diferentes tipos de mallado posibles con pro-STAR AutoMesh module, pro-am.....	83
Figura 4-7. Esquema del proceso de simulación numérica	86
Figura 4-8. Ejemplo de mallado mediante el asistente de la aplicación pro-STAR AutoMesh	87

Figura 4-9. Mallado de superficie circular mediante bloques estructurados	88
Figura 4-10. Optimización del proceso de mallado.....	89
Figura 4-11. Panel de comandos para la presentación de resultados	90
Figura 4-12. Cálculo de flujos másicos a partir de los índices estequiométricos	91
Figura 4-13. Cálculo de índices estequiométricos a partir de los flujos másicos	91
Figura 4-14. Esquema del proceso optimizado de simulación numérica.....	92
Figura 4-15. Monocelda con canal doble tipo serpentin	93
Figura 4-16. a), b): Modelado en CAD de la placa de la PEMFC; c): Detalle de los canales de flujo de la placa utilizada para la distribución de gas (hidrógeno y oxígeno) en la PEMFC; d) Mallado del volumen de control utilizado para los cálculos de CFD; e): Detalle de los componentes del mallado: (1) dominio sólido, (2) canal de flujo anódico y catódico (dominio fluido), (3,4,5) capas de difusión anódica y catódica y (6) membrana.	94
Figura 4-17. Proceso de Mallado de una PEMFC: a) Archivo de vértices; b) Generación de polilíneas y mallas bidimensionales; c) Creación del mallado tridimensional por extrusión; d) y e) Homogeneización del mallado, acoplamientos; f) Refinamiento de malla; g) Asignación de propiedades a las celdas y h) Malla definitiva	95
Figura 4-18. Distribución de temperatura en la PEMFC (corte por el plano de simetría de la pila) y perfiles de temperatura en diferentes secciones transversales del canal.....	96
Figura 4-19. a) Distribución de temperatura en la membrana, b) Detalle mallado, c) Distribución de la densidad de corriente en la membrana y d) Distribución de velocidades en el canal catódico.	97
Figura 4-20. PEMFC comercial de la marca Heliocentris de 10.24 cm ² de área reactiva	98
Figura 4-21. Modelado monocelda Heliocentris: a) Plano, b) Modelado de placa y zona fluida ...	99
Figura 4-22. Detalles del mallado del volumen de control: a) Malla completa, b) Placa, c) Zona fluida y d) Detalle mallado zonas curvas.....	100
Figura 4-23. a) Distribución de la densidad de corriente en la membrana, b) Distribución de la temperatura en la membrana, c) Distribución de temperatura en la sección transversal y d) Detalle ampliado de la sección anterior.....	101
Figura 5-1. Diferentes configuraciones geométricas de los campos de flujo: a) Canal tipo serpentin (simple); b) Canales rectos paralelos o tipo z; c) Canales interdigitados.....	110

Figura 5-2. Diferentes configuraciones geométricas de los campos de flujo: a) Tipo pin o malla; b) en cascada	111
Figura 5-3. Imagen del diseño de los canales de flujo mecanizados en la placa bipolar	112
Figura 5-4. Campos de flujo estudiados: a) Interdigitado; b) Tipo pin o malla; c) Serpentín.....	112
Figura 5-5. Diagrama esquemático del flujo en los diferentes campos de flujo: a) Paralelo; b) Interdigitado.....	113
Figura 5-6. Comportamiento en estado estacionario y transitorio de una pila tipo PEM utilizando diferentes geometrías de campo de flujo en las placas bipolares.....	114
Figura 5-7. Campos de flujo analizados [18]: a) Serpentín; b) Serpentín múltiple; c) Paralelo; d) Paralelo en U; e) Simétrico en U; f) Paralelo en serie; g) Interdigitado	114
Figura 5-8. Diferentes configuraciones en la dirección de los flujos: a) Flujo en contracorriente; b) Flujo cruzado; c) Flujo en concordancia.....	116
Figura 5-9. Campos de flujo con canales en cascada de 100 cm ²	117
Figura 5-10. Campos de flujo del ánodo y cátodo en una PEMFC de 200 cm ² : a) Serpentín múltiple de 3 canales; b) Serpentín múltiple de 6 canales; c) Serpentín múltiple de 13 canales; d) Serpentín múltiple de 26 canales; e) Serpentín simétrico múltiple de 26 canales.....	118
Figura 5-11. Circulación bajo <i>rib</i> a través de las capas difusoras	119
Figura 5-12. Esquema de los modelos de campo de flujo analizados: a) Campo de flujo de canales paralelos; b) Campo de flujo de canales interdigitados I, con un deflector en cada canal al final de éste; c) Campo de flujo de canales interdigitados II, con dos deflectores en cada canal, uno al final y otro en la mitad del canal.....	120
Figura 5-13. Esquema de los modelos de campo de flujo analizados: a) Campo de flujo de canales interdigitados convencional; b) Campo de flujo de canales interdigitados con deflectores centrales.....	121
Figura 5-14. Diferentes configuraciones geométricas analizadas de la sección transversal: Caso 1) Rectangular; Caso 2) Trapezoidal; Caso 3) Paralelogramo	122
Figura 5-15. Sección transversal de los canales analizados	122
Figura 5-16. Errores más comunes en la geometría debidos al proceso de fabricación	123
Figura 5-17. Campos de flujo de 25 cm ² con diferentes anchuras canal/ <i>rib</i>	124
Figura 5-18. Diagrama esquemático del modelo 2D utilizado	125
Figura 5-19. Esquema de la reducción en altura a la salida del canal.....	126

Figura 5-20. Campo de flujo tipo serpentin con diferentes alturas de canal.....	126
Figura 5-21. Modelo de canal simple recto utilizado: a) en 3D; b) sección transversal.....	127
Figura 5-22. Siete campos de flujo de tipo serpentin múltiple (cinco canales) de 25 cm ² con diferente anchura y altura de canal	128
Figura 5-23. Configuración geométrica del modelo con canales interdigitados ranurados	129
Figura 5-24. Nueva geometría con canales tipo wave	129
Figura 5-25. Diseño modificado del campo de flujo: (a) Vista frontal de la placa; (b) Detalle de los canales; (c) Sección transversal del montaje de la nueva geometría frente a una geometría estándar; (d) Sección transversal del canal modificado.....	130
Figura 5-26. Ejemplos de patrones de distribución de flujo en la naturaleza: a) Hoja de banana; b) Distribución de la sangre en la superficie del ojo humano; c) Estructura vascular de los pulmones	131
Figura 5-27. Comparación de diferentes campos de flujo: a) Canales paralelos; b) Serpentin; c) Canales de flujo inspirados en la naturaleza.....	131
Figura 5-28. Esquema de una pila tipo PEM anular	132
Figura 5-29. Esquema de una pila tipo PEM radial: a) 4 canales; b) 8 canales; c) 12 canales.....	132
Figura 5-30. Esquema de una pila tipo PEM con 8 canales en espiral	133
Figura 6-1. Configuración geométrica de los modelos analizados: a) Modelos con sección transversal en posición horizontal, MPH; b) Modelos con sección transversal en posición vertical, MPV; c) Esquema de la sección transversal y parámetros: CH: Altura del canal, CW: Anchura del canal, RW: Anchura del <i>rib</i> , Ly: Anchura del área reactiva.....	153
Figura 6-2. Curvas de polarización para los modelos de tipo MPH (06/10, 05/12, 04/15, 03/20 y 02/30).....	157
Figura 6-3. Curvas de polarización para los modelos de tipo MPV (10/06, 12/05, 15/04, 20/03 y 30/02).....	158
Figura 6-4. Caída de presión en ánodo y cátodo para los diferentes modelos analizados en el estudio: ΔP (Pa). $I_{avg} = 0.6 \text{ A cm}^{-2}$	159
Figura 6-5. Distribución del contenido neto de agua en la membrana y valores máximos y mínimos, λ (lambda): a) Modelo 04/15, ($V_{avg}=0.53 \text{ V}$); b) Modelo 05/12, ($V_{avg}=0.55 \text{ V}$); c) Modelo 06/10, ($V_{avg}=0.57 \text{ V}$). $I_{avg} = 0.6 \text{ A cm}^{-2}$	160

Figura 6-6. Distribución del contenido neto de agua en la membrana y valores máximos y mínimos, λ (lambda): a) Modelo 10/06, ($V_{avg}=0.59$ V); b) Modelo 12/05, ($V_{avg}=0.59$ V); c) Modelo 15/04, ($V_{avg}=0.59$ V). $I_{avg} = 0.6$ A cm^{-2}	161
Figura 6-7. Curvas de polarización por pares para los modelos 02/30 y 30/02.....	163
Figura 6-8. Curvas de polarización por pares para los modelos 03/20 y 20/03.....	163
Figura 6-9. Curvas de polarización por pares para los modelos 04/15 y 15/04.....	164
Figura 6-10. Curvas de polarización por pares para los modelos 05/12 y 12/05.....	164
Figura 6-11. Curvas de polarización por pares para los modelos 06/10 y 10/06.....	165
Figura 6-12. Distribución de temperatura en la membrana y valores máximos y mínimos, (K): a) Modelo 04/15, ($V_{avg}=0.53$ V); b) Modelo 05/12, ($V_{avg}=0.55$ V); c) Modelo 06/10, ($V_{avg}=0.57$ V). $I_{avg} = 0.6$ A cm^{-2}	166
Figura 6-13. Distribución de temperatura en la membrana y valores máximos y mínimos, (K): a) Modelo 10/06, ($V_{avg}=0.59$ V); b) Modelo 12/05, ($V_{avg}=0.59$ V); c) Modelo 15/04, ($V_{avg}=0.59$ V). $I_{avg} = 0.6$ A cm^{-2}	167
Figura 6-14. Influencia de la geometría de la sección transversal del canal de flujo en el voltaje de la PEMFC para densidades de corriente de 0.3 A cm^{-2} , 0.5 A cm^{-2} y 0.7 A cm^{-2}	168
Figura 6-15. Distribución de densidad de corriente en la membrana y valores máximos y mínimos, (A cm^{-2}): a) Modelo 04/15, ($V_{avg}=0.53$ V); b) Modelo 05/12, ($V_{avg}=0.55$ V); c) Modelo 06/10, ($V_{avg}=0.57$ V). $I_{avg} = 0.6$ A cm^{-2}	169
Figura 6-16. Distribución de densidad de corriente en la membrana y valores máximos y mínimos, (A cm^{-2}): a) Modelo 10/06, ($V_{avg}=0.59$ V); b) Modelo 12/05, ($V_{avg}=0.59$ V); c) Modelo 15/04, ($V_{avg}=0.59$ V). $I_{avg} = 0.6$ A cm^{-2}	170
Figura 6-17. Distribución de la fracción másica de hidrógeno en la GDL anódica y valores máximos y mínimos: a) Modelo 04/15, ($V_{avg}=0.53$ V); b) Modelo 05/12, ($V_{avg}=0.55$ V); c) Modelo 06/10, ($V_{avg}=0.57$ V). $I_{avg} = 0.6$ A cm^{-2}	173
Figura 6-18. Distribución de la fracción másica de hidrógeno en la GDL anódica y valores máximos y mínimos: a) Modelo 10/06, ($V_{avg}=0.59$ V); b) Modelo 12/05, ($V_{avg}=0.59$ V); c) Modelo 15/04, ($V_{avg}=0.59$ V). $I_{avg} = 0.6$ A cm^{-2}	174
Figura 6-19. Distribución de la fracción másica de oxígeno en la GDL catódica y valores máximos y mínimos: a) Modelo 04/15, ($V_{avg}=0.53$ V); b) Modelo 05/12, ($V_{avg}=0.55$ V); c) Modelo 06/10, ($V_{avg}=0.57$ V). $I_{avg} = 0.6$ A cm^{-2}	175

Figura 6-20. Distribución de la fracción másica de oxígeno en la GDL catódica y valores máximos y mínimos: a) Modelo 10/06, ($V_{avg}=0.59$ V); b) Modelo 12/05, ($V_{avg}=0.59$ V); c) Modelo 15/04, ($V_{avg}=0.59$ V). $I_{avg} = 0.6$ A cm^{-2}	176
Figura 6-21. Distribución del flujo neto de agua por protón en la membrana y valores máximos y mínimos, α (alfa): a) Modelo 04/15, ($V_{avg}=0.53$ V); b) Modelo 05/12, ($V_{avg}=0.55$ V); c) Modelo 06/10, ($V_{avg}=0.57$ V). $I_{avg} = 0.6$ A cm^{-2}	177
Figura 6-22. Distribución del flujo neto de agua por protón en la membrana y valores máximos y mínimos, α (alfa): a) Modelo 10/06, ($V_{avg}=0.59$ V); b) Modelo 12/05, ($V_{avg}=0.59$ V); c) Modelo 15/04, ($V_{avg}=0.59$ V). $I_{avg} = 0.6$ A cm^{-2}	178
Figura 7-1. Modelo tridimensional de una unidad básica (Mod #1)	191
Figura 7-2. Detalle anverso y reverso de una unidad básica (Mod #1)	192
Figura 7-3. Esquema de funcionamiento de cada unidad básica (Mod #1)	193
Figura 7-4. Modelo con canales de flujo de tipo serpentín (SFF), Mod #2	194
Figura 7-5. Modelos analizados: a) Modelos con canales de flujo de tipo HDFS, Mod #1; b) Modelos con canales de flujo de tipo SFF, Mod #2.....	195
Figura 7-6. Curvas de polarización y potencia para los modelos Mod #1 y Mod #2 de 6.25 cm^2 de área reactiva.....	196
Figura 7-7. Densidad de corriente en la membrana (A cm^{-2}). Modelos de 6.25 cm^2 de área reactiva. $I_{avg} = 0.6$ A cm^{-2} (Mod #1: $I=0.42\div 0.74$ A cm^{-2} , Mod #2: $I=0.44\div 0.74$ A cm^{-2}).....	198
Figura 7-8. Contenido neto de agua en la membrana (λ). Modelos de 6.25 cm^2 de área reactiva. $I_{avg} = 0.6$ A cm^{-2} . (Mod #1: $\lambda=4.9\div 12.2$, Mod #2: $\lambda=5\div 10.9$).....	198
Figura 7-9. Flujo neto de agua por protón a través de la MEA (α). Modelos de 6.25 cm^2 de área reactiva. $I_{avg} = 0.6$ A cm^{-2} . (Mod #1: $\alpha=0.87e-1\div 0.88$, Mod #2: $\alpha=0.12\div 0.87$)	199
Figura 7-10. Temperatura en la superficie de la membrana (K). Modelos de 6.25 cm^2 de área reactiva. $I_{avg} = 0.6$ A cm^{-2} . (Mod #1: $T=351.6\div 361.4$ K, Mod #2: $T=351.7\div 360.4$ K)	199
Figura 7-11. Densidad de corriente en la membrana (A cm^{-2}). Modelos de 25 cm^2 de área reactiva. $I_{avg} = 0.6$ A cm^{-2} . (Mod #1: $I=0.1\div 0.86$ A cm^{-2} , Mod #2: $I=0.33\div 1$ A cm^{-2}).....	201
Figura 7-12. Contenido neto de agua en la membrana (λ). Modelos de 25 cm^2 de área reactiva. $I_{avg} = 0.6$ A cm^{-2} . (Mod #1: $\lambda=4.6\div 14$, Mod #2: $\lambda=4.2\div 14.3$).....	201
Figura 7-13. Flujo neto de agua por protón a través de la MEA (α). Modelos de 25 cm^2 de área reactiva. $I_{avg} = 0.6$ A cm^{-2} . (Mod #1: $\alpha=-0.19\div 1.18$, Mod #2: $\alpha=-0.33e-1\div 1.75$).....	202

Figura 7-14. Temperatura en la superficie de la membrana (K). Modelos de 25 cm ² de área reactiva. I _{avg} = 0.6 A cm ⁻² . (Mod #1: T=350÷363.3 K, Mod #2: T=359.4÷400 K)	202
Figura 7-15. MEA de 3 capas tipo Nafion® N-117 de 25 cm ² de área reactiva	204
Figura 7-16. GDL con microcapa porosa de carbón teflonado.....	205
Figura 7-17. Diseño modular de una monocelda	206
Figura 7-18. Anverso de placa Mod #1 de 25 cm ² de área reactiva. Cámaras de distribución.....	207
Figura 7-19. Reverso de placa Mod #1 de 25 cm ² de área reactiva. Campo de flujo.....	207
Figura 7-20. Placa Mod #2 de 25 cm ² de área reactiva. Campo de flujo	208
Figura 7-21. Anverso de placa mixta (Mod #1 y Mod #2) de 6.25 cm ² de área reactiva	209
Figura 7-22. Reverso de placa mixta (Mod #1 y Mod #2) de 6.25 cm ² de área reactiva.....	209
Figura 7-23. Anverso y reverso de placas terminales que incluye conexiones para refrigeración	210
Figura 7-24. Anverso y reverso de placas terminales sin conexiones para refrigeración	210
Figura 7-25. Fresadora CNC y detalle del mecanizado de una placa	211
Figura 7-26. Simulación del proceso de mecanizado y generación del programa CNC en SurfCAM 2003.....	212
Figura 7-27. Proceso de montaje de una monocelda	213
Figura 7-28. Esquema de funcionamiento del banco de ensayos.....	214
Figura 7-29. Banco de ensayos dual para pilas de combustible de tipo PEM	215
Figura 7-30. Análisis de una monocelda en el banco de ensayos	215
Figura 7-31. Ensayos 1 y 2. Curvas de polarización y de potencia para el Mod #1 de 6.25 cm ² de área reactiva en posiciones diferentes	217
Figura 7-32. Ensayo 3. Curva de polarización y de potencia para el Mod #2 de 6.25 cm ² de área reactiva.....	218
Figura 7-33. Ensayos 4 y 5. Curvas de polarización y de potencia para el Mod #1 de 25 cm ² de área reactiva con MEAs diferentes.	218
Figura 7-34. Ensayo 6. Curva de polarización y de potencia para el Mod #2 de 25 cm ² de área reactiva. Temperatura de operación 80° C	219
Figura 7-35. Ensayo 7. Curva de polarización y de potencia para el Mod #2 de 25 cm ² de área reactiva. Temperatura de operación 50° C	219

3. Índice de Tablas

Tabla 2-1. Comparativa de pilas de combustible y características principales.....	28
Tabla 2-2. Entalpías y entropías de formación de los productos y reactantes de una PEMFC, a 25 °C y presión atmosférica.	33
Tabla 2-3. Entalpías, entropías y energía libre de Gibbs para el proceso de oxidación del hidrógeno, a 25 °C y presión atmosférica.....	35
Tabla 2-4. Entalpía, entropía, energía libre de Gibbs y potencial teórico de pila para la reacción de oxidación del hidrógeno a diferentes temperaturas.	35
Tabla 3-1. Ecuaciones fundamentales.....	60
Tabla 3-2. Términos fuente para las ecuaciones fundamentales.....	61
Tabla 3-3. Ecuaciones para el modelado de los efectos electroquímicos.....	63
Tabla 6-1. Parámetros de diseño de los canales de flujo CH: Altura del canal, CW: Anchura del canal, CL: Longitud del canal, Ly: Anchura del área reactiva (MEA), Lx: Longitud del área reactiva (MEA)	154
Tabla 6-2. Detalles geométricos y propiedades de los materiales: GDL (Gas Diffusion Layer) y MEA (Membrane Electrode Assembly).....	155
Tabla 6-3. Condiciones de operación; $i_{avg} = 0.6 \text{ A cm}^{-2}$	156
Tabla 7-1. Condiciones de operación utilizadas en las simulaciones	195
Tabla 7-2. Condiciones de operación en diferentes estudios publicados.....	197
Tabla 7-3. Condiciones de operación utilizadas en los ensayos.....	216

4. Glosario

NASA (Acrónimo en inglés de *National Aeronautics and Space Administration*; Administración Nacional de Aeronáutica y del Espacio de los Estados Unidos)

PEMFC (Acrónimo en inglés de *Proton Exchange Membrane Fuel Cells*; Pilas de combustible de membrana de intercambio protónico, *también conocidas como Polymeric Electrolyte Membrane Fuel Cells*; Pilas de Combustible de Membrana de Electrolito Polimérico)

DMFC (*Direct Methanol Fuel Cells*); Pilas de combustible de metanol directo

RFC (*Regenerative Fuel Cells*) Pilas de combustible reversibles o regenerativas,

AFC (*Alkaline Fuel Cells*) Pilas de combustible alcalinas,

PAFC (*Phosphoric Acid Fuel Cells*) Pilas de combustible de ácido fosfórico,

MCFC (*Molten Carbonate Fuel Cells*) Pilas de combustible de carbonatos fundidos,

SOFC (*Solid Oxide Fuel Cells*) Pilas de combustible de óxido sólido,

Crossover (Efecto por el que algunas moléculas de hidrógeno circulan a través de la membrana de intercambio protónico desde el ánodo hasta el cátodo, donde se combinan con el oxígeno sin proporcionar electrones al circuito eléctrico externo)

GDL (Acrónimo en inglés de *Gas Diffusion Layer*)

MEA (Acrónimo en inglés de *Membrane Electrode Assembly*).

OCV (Acrónimo en inglés de *Open Circuit Voltage*; potencial de circuito abierto)

Stack (Del inglés *Fuel Cell Stack*, apilamiento de varias monoceldas de combustible interconectándolas en serie y/o paralelo con el fin de obtener el potencial y la intensidad de corriente deseados)

Back diffusion (Fenómeno por el que el agua circula desde el cátodo hacia el ánodo difundiéndose a través de la membrana)

CFD (Acrónimo en inglés de *Computational Fluid Dynamics*; Dinámica de Fluidos Computacional)

Volumen de control (Técnica de análisis que consiste en la aplicación de las leyes básicas de conservación para un determinado volumen fijo, con respecto a un sistema de referencia, separado del exterior por la superficie de control)

Flooding (Efecto que consiste en el bloqueo del acceso de los reactivos a las capas catalíticas mediante el agua en fase líquida. También se conoce como inundación)

SSF (Acrónimo en inglés de *Serpentine-single flow field*; canal de flujo simple de tipo serpentín)

MVF (Método de Volúmenes Finitos)

CAD (Acrónimo en inglés de *Computer Aided Design*; Diseño Asistido por Ordenador)

STL (*Stereolithography*; Archivo de estereolitografía),

Rib (Espacio entre dos canales adyacentes)

Cross-leakage flow (Flujo de gas por convección bajo *rib*)

MPH (Modelos con sección transversal del canal en posición horizontal, $C_H < C_W$)

MPV (Modelos con sección transversal del canal en posición vertical, $C_H > C_W$)

HDFD (Acrónimo en inglés de *Homogeneous Distribution Flow Field*; Campo de Flujo con Distribución Homogénea)

SFF (Acrónimo en inglés de *Serpentine Flow Field*, Campo de flujo tipo Serpentín)

CNC (Acrónimo de *Control Numérico por Computador*)

CAM (Acrónimo en inglés de *Computer Aided Manufacturing*; Fabricación Asistida por ordenador)

IGES (Acrónimo en inglés de *Initial Graphics Exchange Specification*; Especificación para Intercambio Inicial de Gráficos)

Starvation (Fenómeno por el que se genera corriente eléctrica con un aporte de gases inadecuado (pobre), de manera que el platino y el carbón soportado sobre las capas catalíticas de la pila pierden parte de su funcionalidad. También se conoce como inanición)

A decorative graphic on the right side of the page. It features three blue circles of varying sizes, each composed of concentric circles in different shades of blue. These circles are connected by thin, light blue lines that form a triangular shape pointing downwards. The largest circle is at the top, a smaller one in the middle, and the largest of all is at the bottom right, partially cut off by the edge of the page.

Capítulo 1

Objetivos y contenidos de la tesis

Índice

CAPÍTULO 1: Objetivos y contenido de la tesis	5
1.1. Objetivos.....	5
1.2. Contenido de la tesis	6

CAPÍTULO 1: Objetivos y contenido de la tesis

1.1. Objetivos

La actual crisis de los combustibles fósiles hace necesaria la búsqueda de nuevas alternativas energéticas. La mayoría de los esfuerzos se dirigen hacia la obtención de energías baratas, renovables y no contaminantes que puedan ser producidas por todos los países, eliminando así los monopolios. Una de las que se perfila con más futuro es el hidrógeno, por su elevada eficiencia energética, la ausencia de emisiones contaminantes, y la reducción de la dependencia energética que ello supondría para las naciones. Sin olvidar que, el hidrógeno, por su carácter de vector energético, sólo puede ser considerado limpio si proviene a su vez de fuentes de energía limpias.

Las pilas de combustible se presentan hoy día como una de las alternativas de generación de energía limpia más adecuadas y, entre ellas, las pilas de combustible de membrana de intercambio protónico o membrana de electrolito polimérico (PEMFC). Estas producen energía eléctrica por conversión electroquímica del hidrógeno y el oxígeno en agua. En la actualidad, muchos de los esfuerzos en investigación se centran en el desarrollo de PEMFC más eficientes con un menor coste.

Aunque son muchos los factores que intervienen en la eficiencia de una PEMFC, cada vez más estudios analizan la influencia de las diferentes variables geométricas relacionadas con los canales de flujo por los que circulan el hidrógeno y el oxígeno. Es precisamente este ámbito en el que se centra este proyecto de tesis, siendo sus objetivos más importantes:

- a) Elaboración de un procedimiento para la simulación numérica de prototipos de pila de combustible de tipo PEM mediante el software STAR-CD, estableciendo así una metodología de trabajo que permita el estudio sistemático de la influencia de las distintas variables de operación en el rendimiento de dichas pilas, reduciendo al máximo los tiempos del proceso sin disminuir la precisión del cálculo.
- b) Análisis de la influencia que la geometría de los canales de flujo de las placas tiene sobre las condiciones de funcionamiento de las pilas de combustible de tipo PEM y sobre su rendimiento.
- c) Desarrollo de una geometría óptima de canales de flujo para placas de pilas de combustible de tipo PEM, que proporcione un rendimiento global óptimo al sistema, permitiendo una homogeneización de las condiciones de operación a lo largo de toda la superficie reactiva y, por tanto, un aumento de la vida útil de la MEA (Membrane Electrode Assembly).

1.2. Contenido de la tesis

El segundo capítulo de este proyecto de tesis tiene por objetivo establecer una visión global de lo que son las pilas de combustible, de cómo funcionan y de cuáles son las leyes que rigen este funcionamiento, centrándose en las denominadas pilas de combustible de tipo PEM.

En el capítulo 3 se describe el modelo matemático utilizado para el desarrollo de este proyecto de tesis. Un modelo matemático avanzado con capacidad para resolver simultáneamente las ecuaciones de conservación de la masa, conservación de la cantidad de movimiento, conservación de la energía y conservación de las especies químicas teniendo en cuenta los efectos de las reacciones electroquímicas que se suceden en el interior de la pila, imprescindible para el modelado computacional de las complejidades físicas asociadas a las pilas de combustible de tipo PEM.

El objetivo del Capítulo 4 es la elaboración de un procedimiento optimizado para la simulación numérica de prototipos de pila de combustible de tipo PEM mediante un software comercial de fluidodinámica computacional, estableciendo así una metodología de trabajo que permita el estudio sistemático de la influencia de las distintas variables de operación en el rendimiento de una pila de combustible de tipo PEM, reduciendo al máximo los tiempos del proceso pero sin disminuir la precisión del cálculo.

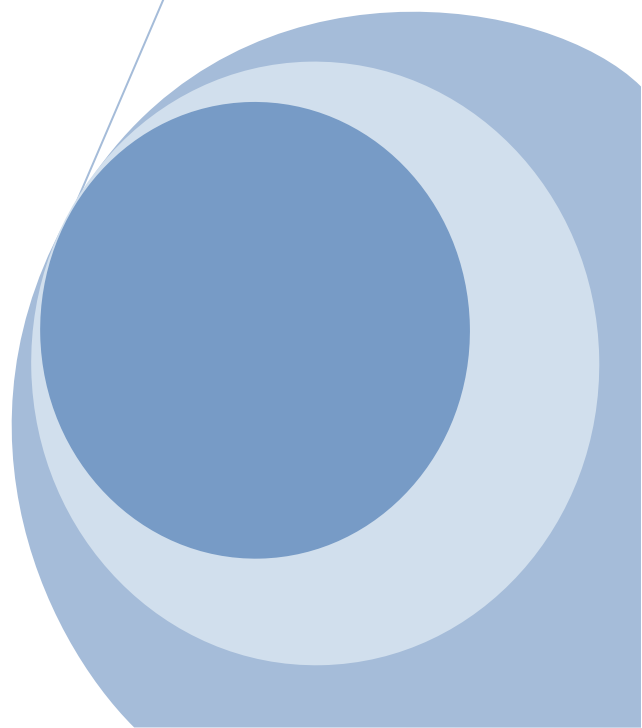
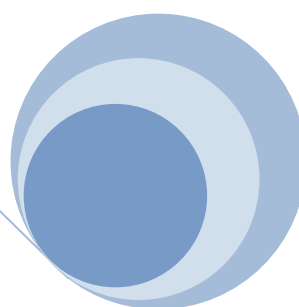
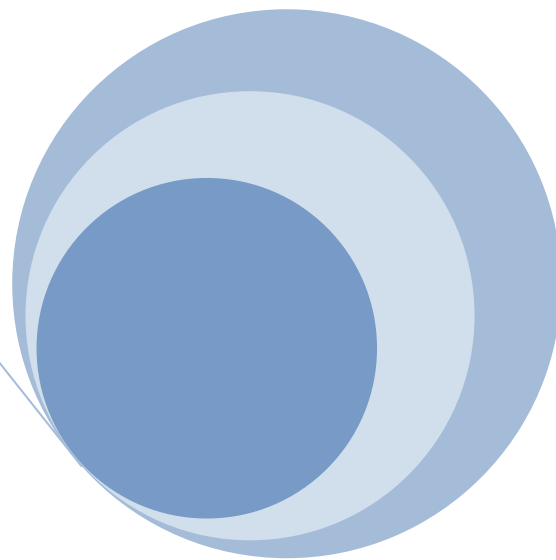
En el Capítulo 5 se presenta una recopilación de los resultados más importantes de los estudios realizados en los últimos años relacionados con la influencia de los diferentes parámetros geométricos de los canales de flujo en el rendimiento global de una pila de combustible de tipo PEM.

El Capítulo 6 está dedicado al estudio de la influencia de la configuración de la sección transversal del canal de flujo en el funcionamiento de una pila de combustible de tipo PEM con canales de flujo de tipo serpentín. Para ello, se han analizado diez modelos con canales de flujo de tipo serpentín con relaciones de altura/anchura del canal diferentes, manteniendo constantes el resto de parámetros geométricos y las condiciones de operación de la pila.

Para finalizar, el Capítulo 7 describe una propuesta de geometría de canales de flujo que proporcione un rendimiento global óptimo al sistema a través de la homogeneización de las condiciones de operación a lo largo de toda la superficie reactiva, incluyendo tanto los resultados de las simulaciones numéricas realizadas como los resultados experimentales obtenidos en el laboratorio sobre varios prototipos fabricados. Además, se indican las líneas a seguir en futuros trabajos de investigación.

Capítulo 2

Introducción



Índice

CAPÍTULO 2: Introducción.....	13
2.1. Antecedentes.....	13
2.2. Pilas de combustible	15
2.2.1. Historia.....	16
2.2.2. Tipos de pilas de combustible.....	18
2.2.3. Comparativa de las diferentes pilas de combustible.....	29
2.3. Funcionamiento de una PEMFC.....	29
2.3.1. Componentes de una pila de tipo PEM	29
2.3.2. Capacidad energética útil. Energía libre de Gibbs	32
2.3.3. Potencial teórico de la pila.....	33
2.3.4. Influencia de la temperatura	34
2.3.5. Influencia de la presión.....	35
2.3.6. Eficiencia teórica de la pila	37
2.3.7. Rendimiento de la pila. Curva V-I	38
2.3.8. Influencia de la geometría en el rendimiento	40
2.4. Referencias	41

CAPÍTULO 2: Introducción

2.1. Antecedentes

Desde el último tercio del siglo XIX, los combustibles fósiles (petróleo, carbón y gas natural) son la energía primaria más importante del mundo. Prácticamente todas las actividades económicas, a nivel mundial, se sustentan en ellos como fuente energética. En 2009, por primera vez desde 1982, el consumo mundial de energía primaria se redujo en un 1,1% y, aunque continúa perdiendo cuota de mercado, el petróleo sigue siendo el combustible principal (34,8% del consumo mundial de energía primaria), mientras que la participación del carbón en el consumo global fue la mayor desde 1970 [1].

Al igual que el resto de combustibles fósiles, el petróleo es un recurso natural no renovable, por lo que existe la posibilidad del agotamiento de las reservas en el futuro. Se estima que al ritmo de consumo actual queda petróleo para unos 40 años [2].

En la actualidad, los combustibles fósiles cubren casi el 88% de la demanda energética mundial, que se estima en más de 11.000 millones de toneladas equivalentes de petróleo. Esta gran dependencia de los combustibles fósiles tiene importantes repercusiones tanto económicas como ambientales. La producción localizada en unas pocas naciones del mundo permite que sean factores políticos los que la gobiernen, provocando la volatilidad de unos precios impuestos por un mercado oscilante e imprevisible. Por otra parte, el ritmo de agotamiento de las reservas provocará el aumento progresivo de los precios, permitiendo que puedan llegar hasta niveles tales que afecten al desarrollo económico global.

En cuanto a las repercusiones ambientales, los productos resultantes de la quema de los diferentes combustibles fósiles producen diferentes efectos medioambientales negativos tales como lluvia ácida, contaminación por partículas (cenizas) y el calentamiento global entre otros. Por otra parte, el reciente incidente nuclear en Japón a causa del seísmo de grado 9 en la escala de Richter y el posterior tsunami, han impulsado un profundo debate sobre los riesgos de la energía nuclear, desviando la atención hacia otras alternativas energéticas.

Por tanto, dado que el modelo energético actual basado fundamentalmente en los combustibles fósiles es insostenible y que la energía atómica puede no ser la opción más adecuada, los países siguen buscando otras alternativas, centrando sus esfuerzos en la obtención de energías baratas, renovables y no contaminantes que puedan ser producidas por todos los países eliminando así los monopolios.

Una de las alternativas que con más fuerza se perfila como la respuesta al problema del uso de los combustibles fósiles es el uso del hidrógeno. En este sentido, aunque se están realizando importantes avances tecnológicos, la implantación de una economía basada en el hidrógeno

no es inmediata y aún requiere dar respuesta a importantes retos tecnológicos, económicos y sociales.

Barreras a la tecnología del hidrógeno

Hay que recordar que el hidrógeno no es una fuente de energía sino un vector energético, es decir, de él podemos obtener energía, pero no sin transformación previa. El hidrógeno, aunque es muy abundante, no se encuentra en estado libre, sino combinado con otros elementos formando compuestos como los hidrocarburos o el agua, por lo que debe ser obtenido a partir de dichos compuestos mediante diferentes procesos de transformación. Actualmente el hidrógeno necesario en la industria se obtiene extrayéndolo de combustibles fósiles o mediante electrolisis (rotura de moléculas de agua con electricidad). Este último proceso, aún siendo el de menor rendimiento energético (1,02 kJ de H₂ por kJ de electricidad a 25 °C) [3] es el más respetuoso con el medio ambiente puesto que los únicos productos del proceso son oxígeno e hidrógeno. Así, el hidrógeno obtenido será tan limpio como lo sea la energía primaria utilizada para su obtención. De la producción total actual de hidrógeno, un 48% se obtiene a partir del gas natural, un 30% a partir del petróleo, un 18% a partir del carbón y sólo un 4% a partir de procesos de electrolisis. Además, todavía más del 70% del hidrógeno producido es utilizado en aplicaciones químicas y no energéticas. A pesar de este panorama de dependencia de los combustibles fósiles, la tendencia actual apunta a un desarrollo de la tecnología que permita aumentar la eficiencia de los procesos de obtención del hidrógeno de forma sostenible y más ecológica.

El almacenamiento del hidrógeno producido es otra barrera por superar ya que, debido a su baja densidad energética, para alimentar procesos con alta demanda energética son necesarios volúmenes de hidrógeno muy grandes. Como ejemplo, el proceso de licuefacción del hidrógeno puede suponer un consumo de energía de hasta el 30% de la energía contenida en el hidrógeno almacenado. Así, en la actualidad se investiga el desarrollo de tanques de alta presión, adsorbentes porosos e hidruros metálicos que permitan almacenar cantidades suficientes de este compuesto en espacios más reducidos con un menor consumo de energía.

A pesar del alto consumo de energía tanto en la obtención como en el acondicionamiento para el almacenamiento y en el transporte de hidrógeno, si éste se produce de forma racional y sostenible a partir de energías renovables, el proceso será siempre rentable [4], tanto desde un punto de vista medioambiental como de liberación de las naciones de los monopolios energéticos.

Usos del hidrógeno

El hidrógeno producido se puede utilizar directamente como fuente de energía (combustión) o transformándolo en electricidad (reacción electroquímica) por medio de las llamadas pilas de combustible. La combustión directa de hidrógeno para la generación de electricidad mediante turbinas de gas y ciclos combinados o como combustible de motores ofrece ventajas frente a

los combustibles fósiles. Éstas se centran en las elevadas eficacias que pueden alcanzarse (aumentos del rendimiento del 25-30% con respecto a los motores equivalentes en gasolina) y en que el único producto de su combustión es vapor de agua, estando exento de NO_x (si se controla la temperatura para inhibir la reacción entre el nitrógeno y el oxígeno atmosféricos) y de CO_2 , evitando la contribución al calentamiento global.

En opinión del ingeniero Stephen A. Ciatti del Centro de I+D de Tecnología del Transporte de Argonne, Illinois (Transportation Technology R&D Center) [5], *“los motores de combustión interna alimentados por hidrógeno constituyen una tecnología económica a corto plazo y pueden ser el catalizador para construir una infraestructura del hidrógeno para las pilas de combustible”*.

2.2. Pilas de combustible

Las pilas de combustible son dispositivos electroquímicos que convierten directamente la energía química de un combustible en electricidad. A diferencia de las baterías, que son dispositivos de almacenamiento de energía, las pilas de combustible proporcionan energía de manera continua mientras se mantenga la alimentación de los reactivos. En el caso de pilas que utilizan hidrógeno como combustible y oxígeno como oxidante, los únicos subproductos son el calor de la reacción y agua.

La Figura 2-1 muestra un esquema básico de una pila de combustible de hidrógeno. Esta se compone principalmente de dos electrodos (que contienen un catalizador) separados por un electrolito.

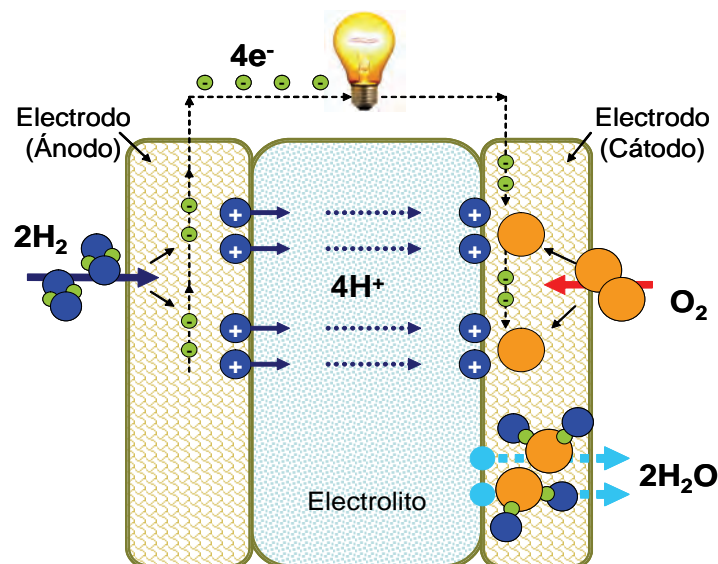


Figura 2-1. Esquema de funcionamiento de una pila de combustible de hidrógeno

Un electrolito o electrólito es una sustancia que contiene iones libres y que se comporta como un medio conductor eléctrico. En una pila de combustible el hidrógeno entra en contacto con el catalizador del electrodo en el ánodo y se descompone en protones y electrones. Los electrones circulan a través del electrodo hacia un circuito externo realizando un trabajo eléctrico, mientras que los protones son conducidos a través del electrolito desde el ánodo hacia el cátodo. En el cátodo el oxígeno reacciona con los protones y electrones llegados desde el ánodo formando agua. Las reacciones básicas que se producen en el ánodo y cátodo son respectivamente:



La alta eficiencia de las pilas de combustible y las perspectivas de generación de electricidad sin emisiones han convertido a las pilas de combustible en serias candidatas a sustituir a los motores de combustión interna en los vehículos de transporte. Esta eficiencia radica en que, como en un reactor electroquímico, la pila de combustible produce energía eléctrica cuando convierte el hidrógeno y el oxígeno en vapor de agua a temperatura baja, mientras que en un motor de combustión interna la mayor parte de la energía generada en la combustión se pierde en forma de calor, que se cede al medio ambiente, y sólo una fracción muy pequeña de esa energía se convierte en energía mecánica útil.

Por otra parte, en los últimos años se está extendiendo el uso de pilas de combustible en aplicaciones de generación remota de energía, sustituyendo a las baterías convencionales que presentan una disponibilidad más reducida debido a la baja relación *tiempo de alimentación / tiempo de recarga*.

2.2.1. Historia

Aunque ya en 1802 Sir Humphry Davy construyó una pila de combustible (C | H₂O, HNO₃ | O₂ | C), la falta de documentación de los resultados obtenidos en dicho experimento sitúa en 1839 el descubrimiento del principio básico de la pila de combustible por el químico alemán Christian Friedrich Schönbein, quién publicó su artículo sobre la pila de combustible de hidrógeno y oxígeno en el "*Philosophical Magazine*". Casi al mismo tiempo, el inglés Sir William Grove, al que se le conoce como el padre de la pila de combustible, estuvo trabajando en diferentes conexiones serie y paralelo para su potente batería de platino-zinc.

En un artículo publicado el mismo año y también en el "*Philosophical Magazine*", Sir Grove apuntaba la posibilidad de la reacción de hidrógeno y oxígeno en presencia de un electrolito para producir electricidad [6].

En 1842 Grove presentó su primera pila de combustible en todos sus detalles. La Figura 2-2 muestra un esquema de la celda electrolítica presentada. Esta pila, que fue el primer prototipo de una pila de combustible de ácido fosfórico, fue utilizada en los primeros telégrafos americanos (1840-1860). Su segunda pila fue la predecesora de las modernas pilas de combustible. Basó sus experimentos en el hecho de que haciendo circular una corriente eléctrica a través del agua ésta se disocia en oxígeno e hidrógeno. Entonces Grove trató de invertir la reacción, combinando oxígeno e hidrógeno para producir electricidad y agua. Esta es la base de una pila de combustible.

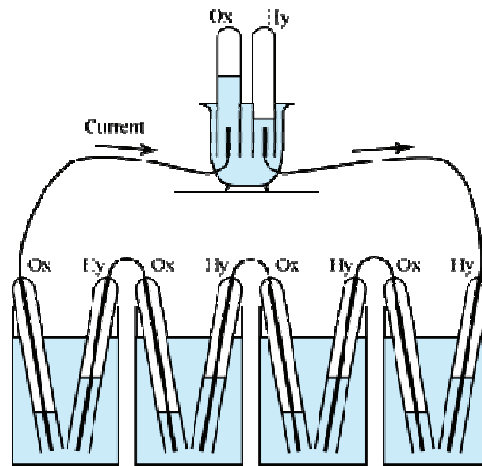


Figura 2-2. Celda electrolítica de Grove. 1842

Aunque tanto William Grove como Christian Friedrich Schönbein originalmente la denominaron “batería de gas”, en 1889, Ludwig Mond y Charles Langer le asignaron el término actual de pila de combustible. En 1932, el ingeniero Francis T. Bacon diseñó una pila de combustible con los electrodos más baratos (sustituyendo Pt por Ni) y con un electrolito mucho menos corrosivo (hidróxido potásico en lugar de ácido sulfúrico), pero fue en 1959 cuando Bacon demostró un uso práctico de las pilas de combustible, construyendo un sistema estacionario de 5 kW capaz de impulsar una máquina de soldar. En Octubre de 1959, Harry Karl Ihrig, un ingeniero de la Allis-Chalmers Manufacturing Company, presentó un tractor de 20 CV como el primer vehículo impulsado por un sistema de pila de combustible.

Debido a la fácil accesibilidad y grandes cantidades de petróleo y a la invención del motor de combustión interna (Carl Friedrich Benz y Gottlieb Daimler), las pilas de combustible fueron olvidadas hasta mediados del siglo XX. El verdadero interés en la pila de combustible como generador de energía eléctrica práctico, llegó a comienzos de los años 60 cuando la NASA (Acrónimo en inglés de *National Aeronautics and Space Administration*; Administración Nacional de Aeronáutica y del Espacio de los Estados Unidos) decidió usar pilas de combustible

en los vehículos espaciales, ya que el uso de reactores nucleares era un riesgo demasiado elevado y las baterías o paneles solares necesarios eran demasiado grandes.

Actualmente la electricidad y el agua potable para la tripulación del Space Shuttle se generan mediante pilas de combustible de tipo alcalino. El diseño de Bacon fue elegido por la NASA para las fuentes de alimentación en la misión Apolo y para los STS Shuttle Orbiters. Durante los primeros años 60 General Electric fabricó sistemas de alimentación basados en pilas de combustible de membrana de intercambio protónico o PEMFC (Acrónimo en inglés de *Proton Exchange Membrane Fuel Cells*, también conocidas como *Polymeric Electrolyte Membrane Fuel Cells*; Pilas de Combustible de Membrana de Electrolito Polimérico) para los proyectos de la Gemini y Apolo. General Electric también utilizó los principios de la pila de Bacon como base para sus diseños.

A pesar de su éxito en programas espaciales, estos sistemas se limitaron a aplicaciones especiales, donde el coste no era un problema. Fue la primera crisis del petróleo en 1973 quién condujo al segundo renacimiento de las pilas de combustible, centrándose el interés en grandes plantas basadas en pilas de alta temperatura. El Profesor Karl Kordesch de la Universidad de Graz (Austria) fue uno de los pioneros en este campo. Junto con sus colaboradores desarrolló en los años 70 una motocicleta y un automóvil propulsado por una pila de combustible alcalina [7].

A finales de los años 80 y principios de los 90, las pilas de combustible se convirtieron en una opción real para uso más amplio. Varias innovaciones, catalizadores con menos platino y electrodos de película fina redujeron su coste, haciendo que el desarrollo de sistemas PEMFC para otras aplicaciones comenzara a ser realista. Aunque ya en 1905 Friedrich Wilhelm Ostwald y Walther Hermann Nernst (Premios Nobel de Química en 1909 y 1920 respectivamente) presentaron una teoría general sobre las pilas de combustible, fue Gerhard Ertl, ganador del Premio Nobel de Química en 2007, el descubridor del funcionamiento de las pilas de combustible.

2.2.2. Tipos de pilas de combustible

Generalmente las pilas de combustible se clasifican atendiendo al tipo de electrolito que utilizan. Esta clasificación no sólo determina el tipo de electrolito que emplean sino el tipo de reacciones electroquímicas que tienen lugar en la pila, el tipo de catalizadores necesarios, el rango de temperaturas de operación de la pila o el tipo de combustible a utilizar entre otras características. Así, las pilas de combustible se pueden clasificar en:

- Pilas de combustible de membrana de intercambio protónico PEMFC (Proton Exchange Membrane Fuel Cells)
 - Pilas de combustible de metanol directo, DMFC (Direc Methanol Fuel Cells)

- Pilas de combustible reversibles o regenerativas, RFC (Regenerative Fuel Cells)
- Pilas de combustible alcalinas, AFC (Alkaline Fuel Cells)
- Pilas de combustible de ácido fosfórico, PAFC (Phosphoric Acid Fuel Cells)
- Pilas de combustible de carbonatos fundidos, MCFC (Molten Carbonate Fuel Cells)
- Pilas de combustible de óxido sólido, SOFC (Solid Oxide Fuel Cells)

Según la temperatura de operación, las pilas de combustible también se pueden clasificar como sigue:

- Pilas de baja temperatura (alrededor de 80 °C)
 - PEMFC
 - DMFC
 - AFC
- Pilas de temperatura media (alrededor de 200 °C)
 - PAFC
- Pilas de alta temperatura (entre 650 °C y 1000 °C)
 - MCFC
 - SOFC

En general, las pilas de combustible de baja temperatura son más adecuadas para aplicaciones de transporte (10-200 kW), aplicaciones estacionarias de baja potencia (hasta 5 kW) y aplicaciones portátiles. Las pilas de combustible de temperatura media son adecuadas para aplicaciones estacionarias de hasta 10 MW, mientras que las pilas de combustible de alta temperatura son más adecuadas para aplicaciones estacionarias en donde la potencia demandada puede llegar hasta los 100 MW [8].

2.2.2.1. Pilas de combustible de membrana de intercambio protónico PEMFC (Proton Exchange Membrane Fuel Cells)

Las pilas de combustible PEMFC, también llamadas de membrana de electrolito polimérico, ofrecen una alta densidad de potencia por unidad de peso y volumen en comparación con otros tipos de pilas. El electrolito utilizado es un polímero sólido (ácido perfluorosulfónico) y los electrodos son finas capas de carbón poroso que contienen el catalizador (normalmente platino). Estas pilas sólo necesitan ser alimentadas con hidrógeno y oxígeno (o aire) para operar, obteniéndose agua y calor como únicos subproductos. La temperatura de operación de estas pilas de combustible es relativamente baja (40-80 °C), lo que favorece un arranque más rápido (menos tiempo de calentamiento) y una durabilidad mayor de sus componentes. Sin embargo, a estas temperaturas el catalizador necesario para separar los electrones y protones suele ser un metal noble (platino) que aumenta considerablemente el coste global del sistema.

Además, el platino es extremadamente sensible al envenenamiento por CO, por lo que cuando el combustible es un alcohol (metanol) o un derivado de un hidrocarburo es necesario un pretratamiento para reducir el contenido de CO del mismo, lo que incrementa el coste. En la actualidad se están desarrollando catalizadores de rutenio, que son más resistentes a la contaminación por CO.

Tanto el reducido tiempo de arranque como la alta relación potencia/peso convierte a las pilas de combustible de tipo PEM como las más adecuadas para aplicaciones de transporte (automóviles y autobuses), estacionarias de baja potencia y portátiles. Sin embargo, el almacenamiento de hidrógeno sigue siendo un importante obstáculo para el desarrollo de las aplicaciones en transporte. La mayoría de vehículos que utilizan pila de combustible de hidrógeno almacenan el combustible en forma de gas comprimido. A causa de la baja densidad de energía del hidrógeno, es difícil almacenar suficiente gas a bordo como para recorrer la misma distancia que los vehículos con motor de gasolina. Aunque se podrían utilizar combustibles líquidos (metanol, etanol, hidrocarburos) para aumentar la densidad de energía y reducir así la necesidad de almacenamiento, los vehículos necesitarían de un sistema para obtener el hidrógeno a partir del combustible líquido (reformador). Este requisito aumentaría el coste y el mantenimiento de los vehículos. Además el reformado también libera dióxido de carbono (un gas de efecto invernadero), aunque en cantidad mucho menor que la emitida por los motores de gasolina actuales.

La Figura 2-3 representa un esquema de funcionamiento de una pila de combustible de tipo PEM.

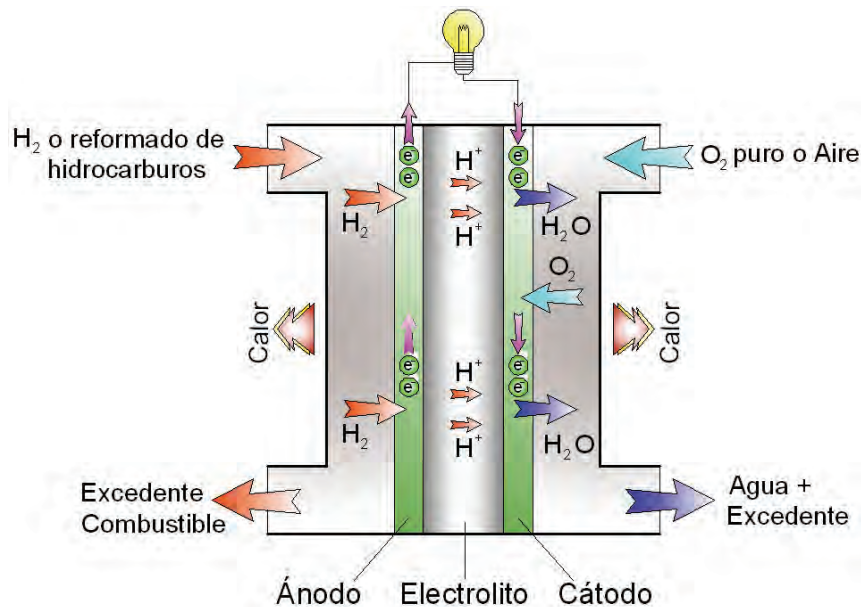


Figura 2-3. Esquema de funcionamiento de una pila de combustible de tipo PEMFC

Las reacciones en el ánodo y cátodo son respectivamente:



2.2.2.2. Pilas de combustible de metanol directo, DMFC (Direct Methanol Fuel Cells)

Las pilas de metanol directo son una variante de las pilas de tipo PEM en las que el combustible es una disolución de metanol. Las reacciones en el ánodo y cátodo son respectivamente:



La Figura 2-4 representa un esquema de funcionamiento de una pila de combustible de metanol directo DMFC.

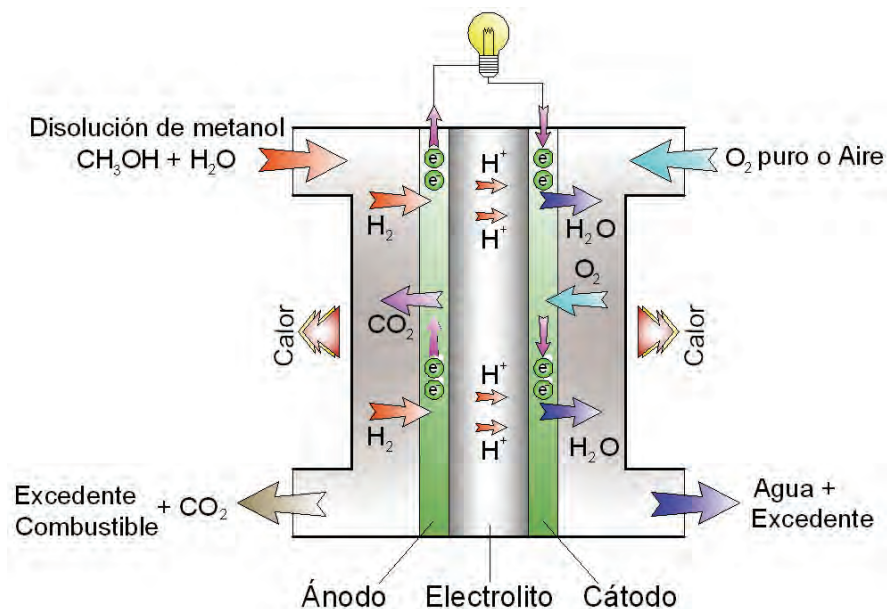


Figura 2-4. Esquema de funcionamiento de una pila de combustible de tipo DMFC

La principal ventaja frente a las pilas alimentadas por hidrógeno puro es que se evita el problema del almacenamiento del combustible, ya que el metanol tiene una densidad de energía superior al hidrógeno gas, aunque menor que la de la gasolina. Además, por ser un líquido como la gasolina, el metanol es más fácil de transportar y distribuir con la infraestructura actualmente disponible.

La pila de metanol directo es un sistema adaptable a numerosas aplicaciones, desde milivatios hasta kilovatios, ya sean portátiles o estacionarias. Al igual que las pilas alimentadas con hidrógeno puro, las DMFC trabajan a temperaturas bajas (tiempo de encendido reducido) y proporcionan altas densidades de potencia en comparación con otras pilas.

2.2.2.3. Pilas de combustible reversibles o regenerativas, RFC (Regenerative Fuel Cells)

Las pilas de combustible reversibles o regenerativas son una variante de las pilas de membrana de intercambio protónico (PEMFC) que pueden funcionar como pila de combustible o como electrolizador en función de las necesidades. De esta forma, se evita uno de los principales inconvenientes de las fuentes de energía renovables: que su disponibilidad no siempre coincide con la demanda de energía. Así, la pila de combustible reversible actúa como un electrolizador para generar gas hidrógeno a partir del agua cuando se genera un exceso de electricidad con recursos renovables. Este gas hidrógeno se almacena para cuando la energía renovable no esté disponible. La pila de combustible reversible funcionará entonces como una pila de combustible tradicional, utilizando el hidrógeno almacenado para generar electricidad. Esta tecnología de pilas de combustible es aún relativamente joven y está siendo desarrollado por la NASA entre otros [9].

2.2.2.4. Pilas de combustible alcalinas, AFC (Alkaline Fuel Cells)

Las pilas de combustible alcalinas fueron una de las primeras que se desarrollaron. Concretamente para utilizarlas en el programa espacial de la NASA como fuente de energía eléctrica y agua a bordo de las naves espaciales. Estas pilas de combustible utilizan una solución de hidróxido de potasio como electrolito y pueden utilizar una variedad de metales no preciosos como catalizador tanto en el ánodo como en el cátodo, lo que reduce el coste en este apartado. La Figura 2-5 muestra un esquema de funcionamiento de una pila AFC, en la que la reacción que se produce en el ánodo es:



Los electrones liberados en el ánodo reaccionan en el cátodo con el oxígeno y con parte del agua producida en la reacción anterior, liberando los hidroxilos que toman parte en la reacción del ánodo. La reacción que se produce en el cátodo es:



Aunque las pilas de combustible alcalinas operan generalmente a temperaturas medias (100-250 °C), se están desarrollando nuevos diseños capaces de operar a temperaturas más bajas (23-70 °C). El alto rendimiento de estas pilas se debe principalmente a la velocidad con que tienen lugar las reacciones electroquímicas en su interior, demostrando eficiencias del orden del 60%.

La principal desventaja de este tipo de pila de combustible es la facilidad de intoxicación por dióxido de carbono (CO₂). De hecho, incluso pequeñas cantidades de CO₂ en el aire pueden afectar al funcionamiento de esta pila, por lo que es necesario purificar tanto el hidrógeno como el oxígeno utilizado. Este proceso de purificación es muy costoso. Además, la susceptibilidad al envenenamiento también afecta la vida de la pila, lo que incrementa aún más el coste global por unidad de energía creada.

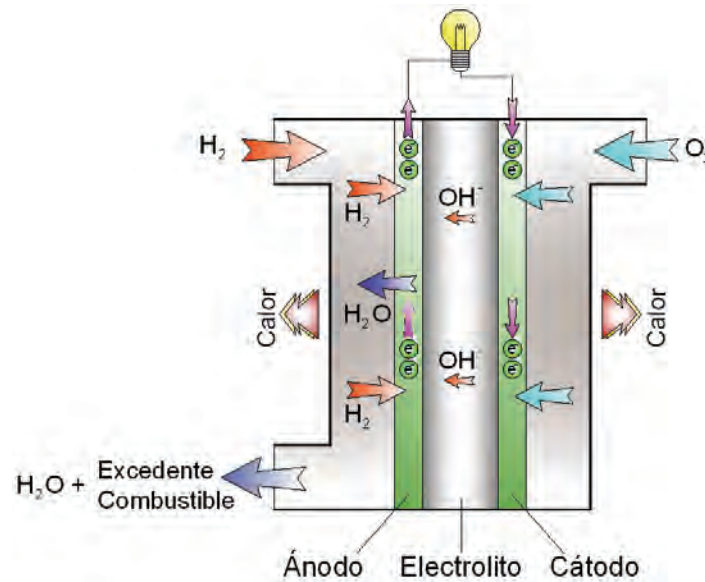


Figura 2-5. Esquema de funcionamiento de una pila de combustible de tipo AFC

Aunque el coste es un factor menos importante para ubicaciones remotas, tales como el espacio o el mar, estas pilas de combustible deberán ser más rentables para competir eficazmente en la mayoría de los principales mercados comerciales. Se han demostrado duraciones de más de 8.000 horas en pilas AFC operando de manera estable. Para que este tipo de pila sea económicamente viable en aplicaciones de servicios públicos a gran escala, será necesario que los tiempos de funcionamiento superen las 40.000 horas, algo que todavía no se ha logrado debido a problemas de durabilidad de los materiales. Este obstáculo es posiblemente el más importante en la comercialización de esta tecnología.

2.2.2.5. Pilas de combustible de ácido fosfórico, PAFC (Phosphoric Acid Fuel Cells)

La pila de combustible de ácido fosfórico (PAFC) es considerada como la "primera generación" de las pilas de combustible modernas. Es uno de los tipos de células más desarrollados y el primero en ser utilizado de manera comercial. Este tipo de pila de combustible se utiliza normalmente para la generación de energía estacionaria, pero algunas se han utilizado en vehículos de gran potencia, como autobuses urbanos. El electrolito utilizado es el ácido fosfórico (H_2PO_4). En la pila PAFC se producen las reacciones de una manera similar a la pila de tipo PEMFC pero a 200 °C. Estas reacciones son para el ánodo y cátodo respectivamente:



Aunque el rendimiento de las pilas de combustible de ácido fosfórico es más bajo que en otras (37%-42%), en aplicaciones de cogeneración pueden presentar rendimientos hasta del 85%. Las pilas de tipo PAFC son menos potentes que otras pilas de combustible para un mismo peso y volumen. Como resultado, estas pilas suelen ser grandes y pesadas. Al igual que las pilas de combustible de tipo PEM, las PAFCs requieren un catalizador de platino, lo que eleva su coste además de presentar la misma sensibilidad al envenenamiento del platino por el CO. La Figura 2-6 presenta un esquema de funcionamiento de una pila de combustible de ácido fosfórico.

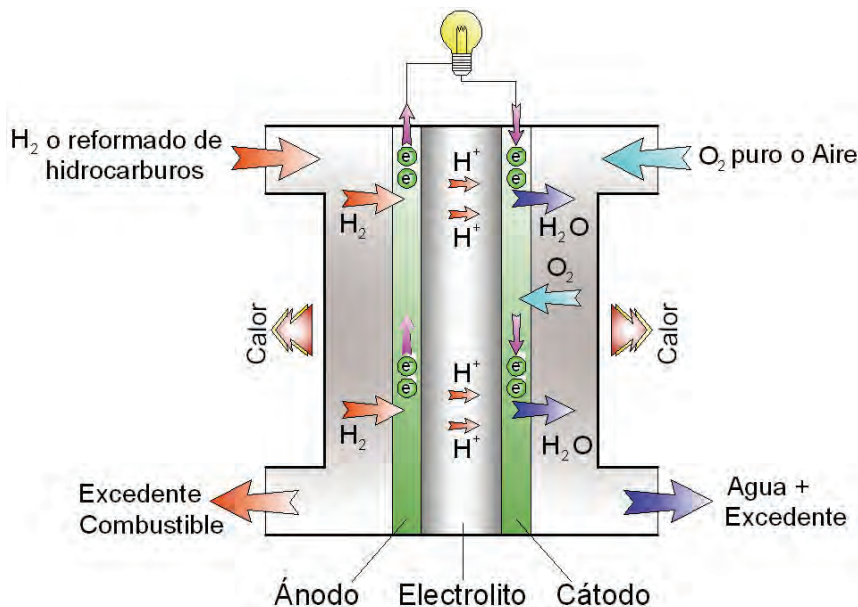


Figura 2-6. Esquema de funcionamiento de una pila de combustible de tipo PAFC

2.2.2.6. Pilas de combustible de carbonatos fundidos, MCFC (Molten Carbonate Fuel Cells)

Las pilas de combustible de carbonatos fundidos utilizan como electrolito una mezcla bifásica de carbonatos metálicos (como litio y potasio o litio y sodio) contenido en una matriz cerámica porosa de LiAlO_2 . Debido a que operan a muy altas temperaturas (650 °C y superiores), pueden utilizarse metales no preciosos como catalizadores (óxido de níquel para el ánodo y aleaciones de níquel para el cátodo), reduciendo su coste.

Las pilas de combustible MCFC pueden alcanzar eficiencias de hasta el 65%, superando a las pilas de ácido fosfórico PAFC, y hasta del 85% en aplicaciones de cogeneración.

A diferencia de las pilas alcalinas AFC, de ácido fosfórico PAFC y de las de membrana de intercambio protónico PEMFC, las pilas de carbonatos fundidos MCFC no necesitan un reformador externo para obtener el hidrógeno a partir de combustibles con alta densidad energética. Debido a las altas temperaturas en las que operan, estos combustibles se convierten en hidrógeno dentro de la propia pila mediante un proceso llamado reformado interno, lo que también se traduce en una reducción del coste.

Las reacciones producidas en el ánodo y en el cátodo son respectivamente:



La pila MCFC no presenta envenenamiento por CO, el cual puede ser incluso utilizado como combustible. Esta propiedad permite utilizar como combustible gases que provengan del carbón. Las reacciones en el ánodo y cátodo serían entonces respectivamente:



Normalmente el CO_2 producido en el ánodo se recircula a través de un circuito externo para ser consumido en el cátodo.

La Figura 2-7 muestra un esquema de funcionamiento de una pila de combustible de carbonatos fundidos MCFC.

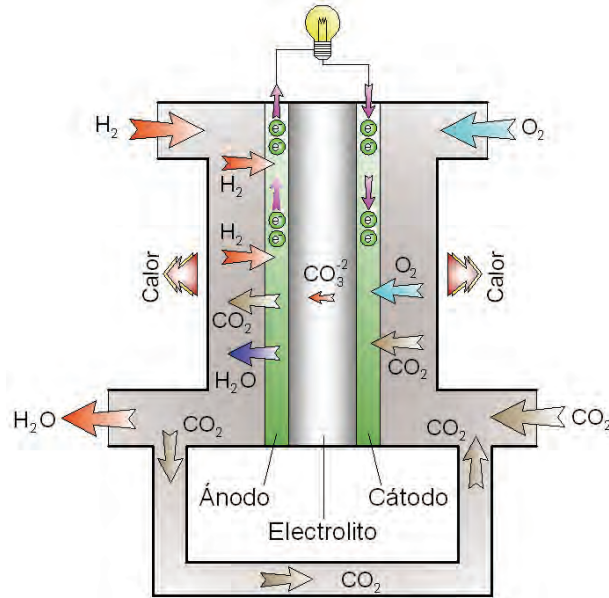


Figura 2-7. Esquema de funcionamiento de una pila de combustible de tipo MCFC

La principal desventaja de las pilas MCFC es la durabilidad. Las altas temperaturas en las que estas pilas operan y el electrolito corrosivo utilizado aceleran la corrosión de los componentes, disminuyendo la vida útil de la pila. Actualmente se están estudiando materiales para los componentes resistentes a la corrosión, así como diseños para aumentar la vida útil de la pila sin disminuir su rendimiento.

2.2.2.7. Pilas de combustible de óxido sólido, SOFC (Solid Oxide Fuel Cells)

Las pilas de combustible de óxido sólido SOFC utilizan un material cerámico como electrolito, lo que significa que es completamente sólido. Por lo tanto, son más simples en su construcción que las pilas de media y alta temperatura descritas anteriormente. La pila SOFC presenta rendimientos del 50% al 60% en la conversión de combustible a electricidad. En aplicaciones diseñadas para recoger y utilizar el calor residual (cogeneración), la eficiencia podría llegar al 85%.

Las pilas de combustible de óxido sólido funcionan a temperaturas muy altas (alrededor de 1.000 °C), lo que evita la necesidad de catalizadores de metales nobles, reduciendo así su coste. Además, permite el reformado interno de combustibles, lo que facilita el uso de una variedad de combustibles reduciendo el coste asociado a un reformador en el sistema. Las reacciones producidas en el ánodo y en el cátodo son respectivamente:





La pila SOFC no presenta envenenamiento por CO, el cual puede ser incluso utilizado como combustible. Esta propiedad permite utilizar como combustible gases que provengan del carbón. Las reacciones en el ánodo y cátodo serían entonces respectivamente:



La principal desventaja proviene de la alta temperatura de operación, que se traduce en un arranque muy lento, la necesidad de un escudo térmico para proteger al personal y estrictos requisitos de durabilidad de los materiales utilizados. Actualmente se están desarrollando pilas de combustible de tipo SOFC para operar a temperaturas inferiores (800 °C o menores) evitando muchos de los problemas de durabilidad a costa de producir menos energía eléctrica. La Figura 2-8 representa un esquema de funcionamiento de una pila de combustible de óxidos sólidos SOFC.

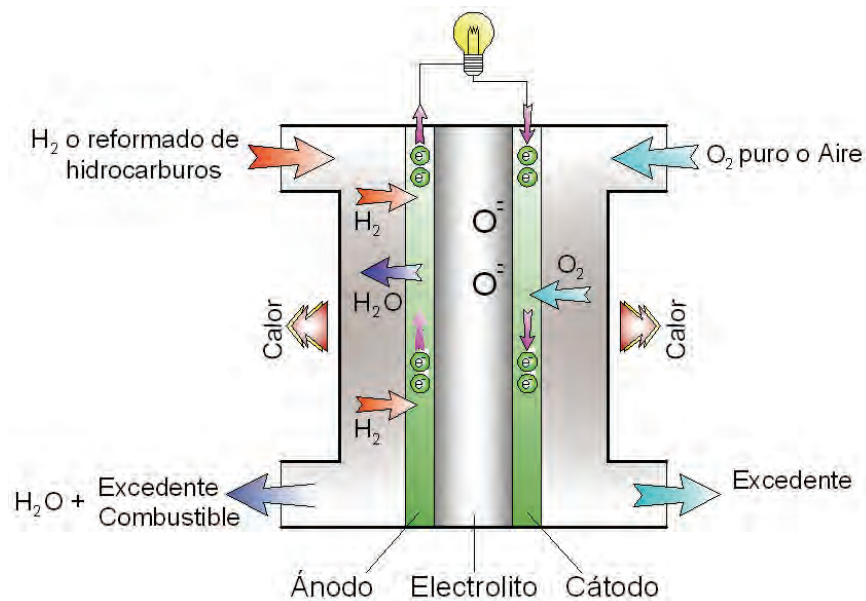


Figura 2-8. Esquema de funcionamiento de una pila de combustible de tipo SOFC

Tabla 2-1. Comparativa de pilas de combustible y características principales.

Tipo	Electrolito	Temperatura de operación	Rango potencias	Eficiencia	Aplicaciones	Ventajas	Inconvenientes
Membrana de intercambio protonico (PEMFC)	Ácido perfluorosulfónico	40-80 °C	< 1kW - 100kW	60% en aplicaciones de transporte 35% en aplicaciones estacionarias	<ul style="list-style-type: none"> - Portátiles - Generación distribuida - Transporte - Vehículos especiales 	<ul style="list-style-type: none"> - Menores problemas de corrosión - Baja temperatura - Arranque rápido 	<ul style="list-style-type: none"> - Catalizadores caros - Sensible a las impurezas del combustible y al CO₂ - No permite cogeneración
Alcalina (AFC)	Solución acuosa de hidróxido de potasio empapado en una matriz.	100-250 °C	10kW - 100 kW	60%	<ul style="list-style-type: none"> - Militares - Espaciales 	<ul style="list-style-type: none"> - Reacción catódica rápida - Electrolito con alto rendimiento en la conducción - Componentes más baratos 	<ul style="list-style-type: none"> - Sensible al CO₂ del combustible - Gestión del electrolito
Ácido fosfórico (PAFC)	Ácido fosfórico empapado en una matriz. (H ₂ PO ₄)	200 °C	400 kW - 100 kW	40%	<ul style="list-style-type: none"> - Generación distribuida 	<ul style="list-style-type: none"> - Permite cogeneración - Aumento de la tolerancia a las impurezas del combustible 	<ul style="list-style-type: none"> - Catalizadores caros - Arranque lento - Densidad de corriente y potencia bajos
Carbonatos fundidos (MCFC)	Solución de litio, sodio y / o carbonatos de potasio, empapado en una matriz.	650 °C	300 kW - 3 MW	65%	<ul style="list-style-type: none"> - Generación distribuida 	<ul style="list-style-type: none"> - Alta eficiencia - Flexibilidad de combustible - Puede usar una variedad de catalizadores - Permite cogeneración 	<ul style="list-style-type: none"> - Corrosión y vida reducida de los componentes por la alta temperatura - Arranque lento - Baja densidad de potencia
Óxido sólido (SOFC)	Circona estabilizada con itria ZrO ₂ -Y ₂ O ₃	1000 °C	1 kW - 2 MW	60%	<ul style="list-style-type: none"> - Potencia auxiliar - Generación distribuida 	<ul style="list-style-type: none"> - Alta eficiencia - Flexibilidad de combustible - Puede usar una variedad de catalizadores - Permite cogeneración - Electrolito sólido 	<ul style="list-style-type: none"> - Corrosión y vida reducida de los componentes por la alta temperatura - Arranque lento

2.2.3. Comparativa de las diferentes pilas de combustible

Cada tipo de pila de combustible presenta diferentes ventajas e inconvenientes con respecto a los demás tipos. La Tabla 2-1 muestra a modo de resumen una comparativa de todas ellas, destacando las características principales en cada caso [10].

2.3. Funcionamiento de una PEMFC

Aunque a simple vista el sistema formado por una pila de combustible de tipo PEM es bastante simple, existen diferentes reacciones electroquímicas y fenómenos de transporte que tienen lugar en su interior que dificultan la comprensión de su funcionamiento interno. Con respecto a los fenómenos de transporte, se pueden destacar el transporte de masa convectivo de los reactivos y productos hacia (o desde) la superficie de los electrodos, el transporte de masa de reactivos y productos a través de los electrodos porosos, la conducción de electrones a través de las capas difusoras y placas, la conducción de iones a través del electrolito y los electrodos, la generación de agua en el cátodo y su movimiento a través del medio poroso, así como los procesos de conducción, convección y radiación de calor a través de la pila.

2.3.1. Componentes de una pila de tipo PEM

La Figura 2-9 muestra una sección transversal de una monocelda de una pila de combustible de tipo PEM en la que se muestran las diferentes zonas y componentes que intervienen en el funcionamiento de la misma.

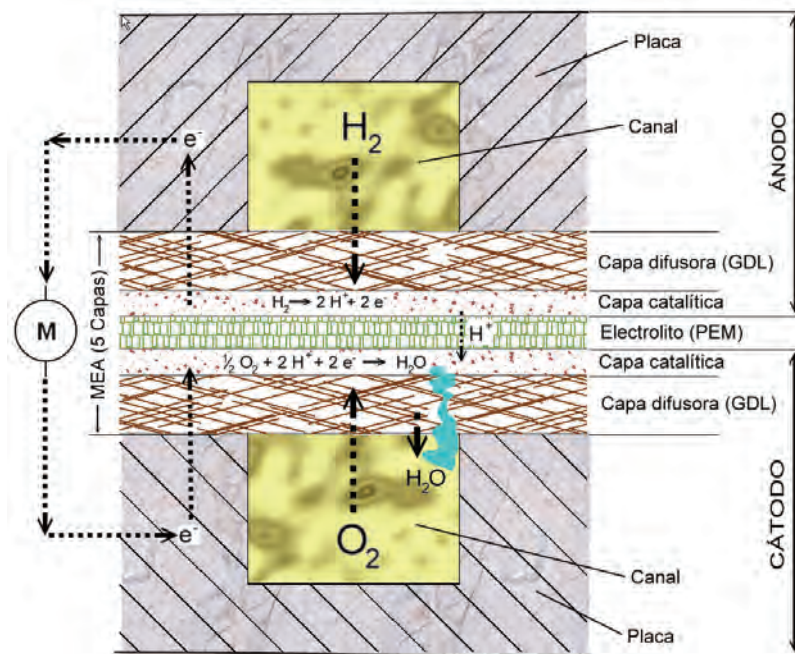


Figura 2-9. Sección transversal de una monocelda de pila de combustible de tipo PEM

Según se aprecia en la Figura 2-9, la pila de combustible tiene dos zonas (anódica y catódica) separadas por una membrana (electrolito polimérico sólido). En el electrodo de la zona anódica se oxida el combustible (hidrógeno) y en el electrodo de la zona catódica ocurre la reducción del oxidante (oxígeno).

2.3.1.1. Membrana de intercambio protónico (PEM)

Uno de los elementos más importantes de una pila de combustible es el electrolito. En el caso de las pilas de combustible de membrana de intercambio protónico, el electrolito es una membrana de ácido polimérico capaz de conducir protones (H^+) mientras que es impermeable al paso de los gases reactivos y los electrones. El electrolito más comúnmente utilizado es el Nafion[®] de la marca DuPont[™], que consiste en un polímero perfluorado con grupos sulfonato polares que en presencia de agua se convierte en un excelente conductor protónico. De hecho, la conductividad protónica depende directamente del contenido de agua, por lo que es imprescindible mantener un nivel de hidratación de la membrana para obtener un óptimo funcionamiento de la pila. El espesor de la membrana también es importante, ya que una membrana fina reduce las pérdidas por resistencia a la conducción iónica. Sin embargo, si la membrana es demasiado fina, algunas moléculas de hidrógeno podrían atravesarla para llegar al cátodo recombinándose con el oxígeno sin proporcionar electrones al circuito eléctrico externo. Este efecto se denomina *crossover* y es considerado como una pérdida de rendimiento de la pila. El espesor de la membrana suele ser de 5 - 200 μm .

2.3.1.2. Electrodo

Se componen de una o varias capas difusoras y una capa que contiene el catalizador necesario para que las reacciones electroquímicas tengan lugar.

Capa catalítica

A la temperatura de operación de una pila PEMFC las reacciones electroquímicas ocurren a una velocidad muy lenta, sobre todo en el cátodo. Para que las reacciones tengan lugar en los electrodos a una velocidad adecuada, es imprescindible la presencia de catalizadores. Un catalizador es una sustancia que estando presente en la reacción electroquímica en contacto físico con los reactivos acelera, induce o propicia dicha reacción sin actuar en la misma. En este caso el más utilizado es el platino (Pt) soportado sobre carbón. Este catalizador se coloca como una fina capa sobre la propia membrana de Nafion[®].

Capas difusoras o GDL

Las capas difusoras o GDL (Acrónimo en inglés de *Gas Diffusion Layer*) son capas porosas formadas por fibras de carbón encargadas de la distribución de los reactantes hacia la capa catalítica, de eliminar los productos de la reacción y de conducir los electrones hacia el circuito

externo. Al conjunto formado por la membrana, las capas catalizadoras y las capas difusoras se denomina MEA (Acrónimo en inglés de *Membrane Electrode Assembly*).

2.3.1.3. Placas

Las placas son uno de los componentes clave de una pila de combustible, ya que realizan diferentes funciones esenciales para el buen funcionamiento del sistema: servir de soporte mecánico, mantener separados los diferentes reactantes, distribuir los reactantes a lo largo de la superficie catalizadora mediante canales de flujo, conducir la corriente eléctrica generada o gestionar el agua y el calor producidos en el interior de la pila. Algunas de estas funciones están más asociadas a las propiedades fisicoquímicas del material. Otras, en cambio, están íntimamente ligadas a la geometría de los canales de flujo.

Para conseguir la tensión y corriente necesarias, las monoceldas se agrupan combinándolas en serie y paralelo, formando un **stack** o apilamiento de celdas de combustible (Figura 2-10). Cuando las placas ejercen las funciones de ánodo y cátodo a la vez, se denominan placas bipolares.

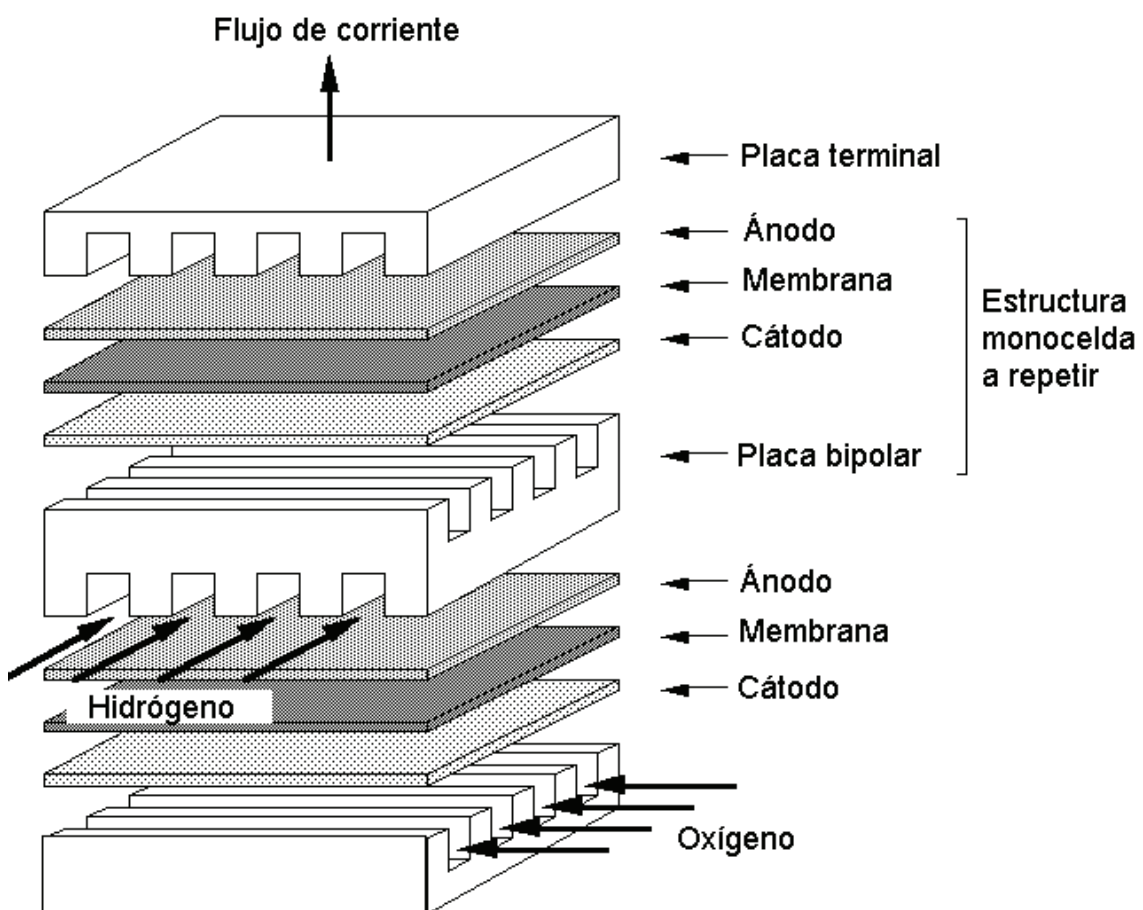


Figura 2-10. Esquema de montaje de un stack

2.3.2. Capacidad energética útil. Energía libre de Gibbs

Puesto que una pila de combustible es un dispositivo electroquímico que convierte la energía química de un combustible directamente en energía eléctrica, su funcionamiento está sujeto a las leyes de la termodinámica. Las reacciones electroquímicas que se suceden simultáneamente en el ánodo y el cátodo son:



Y la reacción global por tanto:



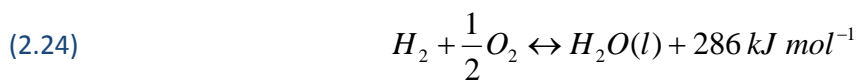
El calor (o entalpía) de la reacción es la diferencia entre los calores de formación de los productos y reactivos, es decir:

$$(2.22) \quad \text{Calor} = \Delta H = (h_f)_{H_2O} - (h_f)_{H_2} - (h_f)_{O_2}$$

Sustituyendo por los valores indicados en la Tabla 2-2:

$$(2.23) \quad \text{Calor} = \Delta H = -286.02 - 0 - 0 = -286 \text{ kJ mol}^{-1}$$

El signo (negativo por convención) denota que es un calor que se cede al sistema, es decir, que la reacción es exotérmica. Este valor se corresponde con el poder calorífico superior del hidrógeno. La reacción global se puede escribir entonces como:



Esta ecuación es válida cuando la reacción es completa a 25 °C, presión atmosférica y para el agua en estado líquido.

Si la reacción se produce con exceso de oxígeno (o aire) el producto es agua en estado vapor y, por lo tanto, el calor producido es menor (241.98 kJ·mol⁻¹) coincidiendo con el poder calorífico inferior del hidrógeno.

Esta será la máxima cantidad de energía (térmica) teórica que se puede extraer del hidrógeno. Sin embargo, debido a la entropía producida en toda reacción química, no toda la entalpía de la reacción se convierte en trabajo útil. Así, el máximo de energía que se puede convertir en electricidad (el trabajo neto máximo que se puede obtener de dicha reacción) se corresponde con la *Energía Libre de Gibbs*, según la ecuación:

$$(2.25) \quad \Delta G = \Delta H - T \Delta S$$

Donde, al igual que con la entalpía, la entropía de la reacción es la diferencia entre la entropía de los productos y los reactantes:

$$(2.26) \quad \Delta S = (s_f)_{H_2O} - (s_f)_{H_2} - (s_f)_{O_2}$$

Por lo tanto, de toda la energía disponible a 25 °C y presión atmosférica (241.98 kJ·mol⁻¹), sólo 237.34 kJ·mol⁻¹ se podrían convertir en energía eléctrica y el resto en calor.

Tabla 2-2. Entalpías y entropías de formación de los productos y reactantes de una PEMFC, a 25 °C y presión atmosférica.

	h_f (kJ mol ⁻¹)	s_f (kJ mol ⁻¹ K ⁻¹)
Hidrógeno, H ₂	0	0.13066
Oxígeno, O ₂	0	0.20517
Agua (líquida), H ₂ O (l)	-286.02	0.06996
Agua (vapor), H ₂ O (g)	-241.98	0.18884

2.3.3. Potencial teórico de la pila

El trabajo eléctrico es el producto de la carga por el potencial, según la ecuación:

$$(2.27) \quad W_{el} = q E$$

donde:

W_{el} = trabajo eléctrico (J mol⁻¹)

q = carga (Culombios mol⁻¹)

E = Potencial (Voltios)

Por otra parte, la carga transferida en la reacción (2.19) es:

$$(2.28) \quad q = n N_{Avg} q_{el}$$

donde:

q = carga (Culombios mol^{-1})

n = número de electrones liberados por molécula ($n=2$ para este caso)

N_{Avg} = número de moléculas por mol o número de Avogadro (6.022×10^{23} moléculas mol^{-1})

q_{el} = carga de un electrón (1.602×10^{-19} Culombios electrón $^{-1}$)

El producto del número de Avogadro y la carga de un electrón se conoce como la constante de Faraday, $F = 96485$ Culombios electrón $^{-1}$ mol^{-1} .

Como se ha indicado anteriormente, la máxima cantidad de energía eléctrica generada por una pila se corresponde con la energía libre de Gibbs, por lo tanto, en un proceso a temperatura y presión constante se verifica que:

$$(2.29) \quad W_{el} = n F E = -\Delta G$$

Y el potencial teórico de la pila a 25 °C, presión atmosférica y suponiendo que el producto de la reacción es agua en estado líquido será entonces:

$$(2.30) \quad E = \frac{-\Delta G}{n F} = \frac{237.34 \times 10^3 \text{ J mol}^{-1}}{2 \times 96485 \text{ A s mol}^{-1}} = 1.2299 \cong 1.23 \text{ Voltios}$$

2.3.4. Influencia de la temperatura

Para analizar el comportamiento del potencial con la temperatura, se sustituye la ecuación (2.25) en la ecuación (2.30), obteniendo:

$$(2.31) \quad E = -\left(\frac{\Delta H}{n F} - \frac{T \Delta S}{n F} \right)$$

La Tabla 2-3 muestra los valores de la entalpía, entropía y energía libre de Gibbs para el proceso de oxidación del hidrógeno a 25 °C y presión atmosférica. Dado que ΔH y ΔS son valores negativos, el aumento de la temperatura de operación de la pila conllevará una reducción del potencial teórico de la misma. Sin embargo, para temperaturas de hasta 100 °C

las variaciones del potencial teórico no son muy significativas como puede observarse en la Tabla 2-4.

Tabla 2-3. Entalpías, entropías y energía libre de Gibbs para el proceso de oxidación del hidrógeno, a 25 °C y presión atmosférica.

	ΔH (kJ mol ⁻¹)	ΔS (kJ mol ⁻¹ K ⁻¹)	ΔG (kJ mol ⁻¹)
$H_2 + \frac{1}{2} O_2 \rightarrow H_2O$ (l)	-286.02	-0.1633	-237.34
$H_2 + \frac{1}{2} O_2 \rightarrow H_2O$ (g)	-241.98	-0.0444	-228.74

Tabla 2-4. Entalpía, entropía, energía libre de Gibbs y potencial teórico de pila para la reacción de oxidación del hidrógeno a diferentes temperaturas.

T (K)	ΔH (kJ mol ⁻¹)	ΔS (kJ mol ⁻¹ K ⁻¹)	ΔG (kJ mol ⁻¹)	E (V)
273.15 (25 °C)	-286.02	-0.16328	-273.34	1.23
333.15 (60 °C)	-284.85	-0.15975	-231.63	1.2
353.15 (80 °C)	-284.18	-0.15791	-228.42	1.118
373.15 (100 °C)	-283.52	-0.15617	-225.24	1.167

2.3.5. Influencia de la presión

Las ecuaciones presentadas hasta el momento sólo son válidas para presión atmosférica. Sin embargo, una pila puede operar a presiones hasta 5-7 bar. Para un proceso isotérmico la variación de en la energía libre de Gibbs se puede expresar como [11]:

$$(2.32) \quad dG = V_m dP$$

donde V_m es el volumen molar (m³ mol⁻¹) y P es la presión (Pa). Además, para un gas ideal:

$$(2.33) \quad PV_m = RT$$

Por lo tanto:

$$(2.34) \quad dG = RT \frac{dP}{P}$$

Integrando la ecuación anterior:

$$(2.35) \quad G = G_0 + RT \ln\left(\frac{P}{P_0}\right)$$

donde G_0 es la energía libre de Gibbs en condiciones estándar de presión y temperatura (1 atm y 25 °C) y P_0 es la presión estándar o de referencia (1 atm).

Para cualquier reacción química se puede escribir:



La variación de la energía libre de Gibbs de la reacción es la variación entre los productos y los reactantes:

$$(2.37) \quad \Delta G = mG_C + nG_D - jG_A - kG_B$$

Sustituyendo la ecuación (2.37) en la ecuación (2.35) se obtiene:

$$(2.38) \quad \Delta G = \Delta G_0 + RT \ln \left[\frac{\left(\frac{P_C}{P_0}\right)^m \left(\frac{P_D}{P_0}\right)^n}{\left(\frac{P_A}{P_0}\right)^j \left(\frac{P_B}{P_0}\right)^k} \right]$$

Esta ecuación se conoce como ecuación de Nernst, donde P es la presión parcial de los reactantes o productos y P_0 es la presión estándar o de referencia (1 atm). La ecuación de Nernst para una pila de combustible de hidrógeno y oxígeno es:

$$(2.39) \quad \Delta G = \Delta G_0 + RT \ln \left[\frac{P_{H_2O}}{P_{H_2} P_{O_2}^{0.5}} \right]$$

Finalmente, sustituyendo la ecuación (2.30) en la ecuación (2.39) se obtiene:

$$(2.40) \quad E = E_0 + \frac{RT}{nF} \ln \left[\frac{P_{H_2} P_{O_2}^{0.5}}{P_{H_2O}} \right]$$

Donde E_0 es el potencial teórico a 25 °C y presión atmosférica, es decir, 1.23 V. Es importante resaltar que el potencial obtenido mediante la ecuación de Nernst se corresponde con un estado de equilibrio y que se denomina potencial de circuito abierto OCV (Acrónimo en inglés de *Open Circuit Voltage*). El potencial bajo condiciones de operación (cuando $I \neq 0$) es siempre menor que E_0 . Además, la ecuación anterior sólo es válida cuando tanto los productos como los reactivos están en fase gaseosa. Cuando el agua producida en el cátodo está en fase líquida, $P_{H_2O} = 1$. De la ecuación (2.40) se deduce que a medida que la presión de los reactivos aumenta se incrementa el potencial de la pila. Además, si los reactivos están diluidos (por ejemplo al utilizar aire en lugar de oxígeno puro) la presión parcial de los mismos es proporcional a su concentración y, en consecuencia, el potencial de la pila es menor.

2.3.6. Eficiencia teórica de la pila

La eficiencia de cualquier dispositivo de conversión de energía se define como la relación entre la energía útil extraída y la energía total utilizada en el proceso. Así, en el caso de una pila de combustible, la energía útil es la energía eléctrica generada y la energía total utilizada es la entalpía del hidrógeno. Es decir:

$$(2.41) \quad \eta_{\text{Teórico}} = \frac{\Delta G}{\Delta H} = \frac{237.34}{286.02} = 83\%$$

La eficiencia teórica de una pila expresada como relación de potenciales:

$$(2.42) \quad \eta_{\text{Teórico}} = \frac{-\Delta G}{-\Delta H} = \frac{\frac{-\Delta G}{nF}}{\frac{-\Delta H}{nF}} = \frac{1.23}{1.482} = 0.83$$

donde:

$\frac{-\Delta G}{nF} = 1.23$ voltios es el potencial teórico de la pila suponiendo como producto de la reacción agua en estado líquido.

$\frac{-\Delta H}{nF} = 1.482$ voltios es el potencial correspondiente al poder calorífico superior del hidrógeno.

Si la eficiencia se expresa con relación al poder calorífico inferior del hidrógeno, tal y como se expresa la eficiencia de los motores de combustión interna, la eficiencia sería:

$$(2.43) \quad \eta_{\text{Teórico}} = \frac{-\Delta G}{-\Delta H_{\text{PCI}}} = \frac{\frac{-\Delta G}{nF}}{\frac{-\Delta H_{\text{PCI}}}{nF}} = \frac{-228.74}{-241.98} = \frac{1.185}{1.254} = 94.5\%$$

2.3.7. Rendimiento de la pila. Curva V-I

El rendimiento de un dispositivo de pila de combustible puede resumirse con una gráfica de las variables intensidad de corriente y potencial de pila. Esta gráfica, denominada como curva V-I o curva de polarización, representa el voltaje de la pila para cada intensidad de corriente dada. Dado que una pila más grande puede producir más electricidad que una pequeña, normalmente los valores de la intensidad de corriente se representan como valores de densidad de corriente (Intensidad/área reactiva, en A cm^{-2}), haciendo así comparables los resultados de pilas de diferente tamaño [12].

Una pila ideal podría proporcionar cualquier cantidad de corriente manteniendo el constante voltaje que determina la termodinámica. Sin embargo, en la práctica el voltaje que proporciona una pila de combustible es menor que el voltaje ideal calculado termodinámicamente, debido a pérdidas irreversibles. De hecho, al aumentar la densidad de corriente dichas pérdidas se incrementan reduciendo el voltaje de salida de la pila, limitando al mismo tiempo la potencia total que el dispositivo puede entregar. La Figura 2-11 muestra una curva típica de polarización (V-I) de una pila de tipo PEM.

Hay cuatro tipos principales de pérdidas (también denominadas polarizaciones o sobrepotenciales) que dan a la curva V-I su forma característica:

- Pérdidas por corrientes internas y *crossover*
- Pérdidas por activación
- Pérdidas óhmicas
- Pérdidas por concentración o transporte de masa

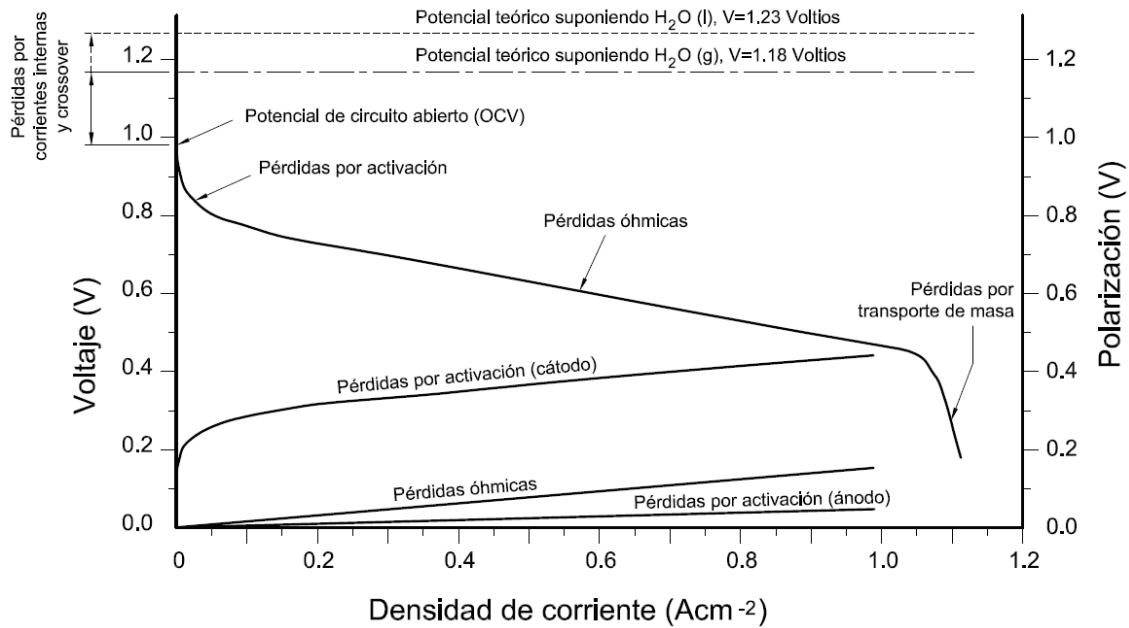


Figura 2-11. Curva típica de polarización de una pila de tipo PEM

2.3.7.1. Pérdidas por corrientes internas y crossover

Aunque el electrolito no es conductor eléctrico y es prácticamente impermeable a los gases reactantes, en la práctica una cantidad de moléculas de hidrógeno lo atraviesan hasta llegar al cátodo donde se oxidan sin aportar electrones al circuito externo. Además, también puede suceder que algunos de los electrones generados en el ánodo se transfieran hacia el cátodo a través del electrolito (cortocircuito electrónico). Estas pérdidas de corriente generalmente son pequeñas (del orden de miliamperios) en relación con la intensidad de corriente de funcionamiento típica de una pila de combustible y no son una fuente significativa de ineficiencia en la corriente. Sin embargo, estas pérdidas tienen un efecto muy significativo en el potencial de circuito abierto (OCV) de la pila, manteniéndose siempre inferior al potencial teórico calculado mediante la ecuación de Nernst, y normalmente inferior a 1 voltio. Si el espesor del electrolito aumenta, las pérdidas por corrientes internas disminuirán pero las pérdidas por resistencia al paso de la corriente iónica se incrementarán (pérdidas óhmicas).

2.3.7.2. Pérdidas por activación

La polarización por activación son pérdidas irreversibles de voltaje asociadas con superar la barrera de energía para que la reacción ocurra en el electrodo. Las pérdidas por activación son principalmente función de la temperatura, la presión, la concentración de especies y las propiedades del electrodo. A mayor densidad de corriente menores son las pérdidas por activación. Aunque estas pérdidas ocurren tanto en el ánodo como en el cátodo, la reducción del oxígeno requiere mayor energía de activación, es decir, que es una reacción mucho más

lenta que la oxidación del hidrógeno. Las pérdidas por activación dependen del material y microestructura del catalizador, de la actividad química de los reactantes y, en menor medida, de la densidad de corriente.

2.3.7.3. Pérdidas óhmicas

Las pérdidas óhmicas incluyen tanto las pérdidas debidas a la resistencia al paso de la corriente iónica a través del electrolito, como las debidas a la resistencia al paso de la corriente de electrones a través de los electrodos y de las placas. Las resistencias electrónicas están asociadas con las resistencias de los electrodos, de las capas de difusión (GDL), de las placas, así como las resistencias de contacto en las uniones de estos componentes. Sin embargo, las pérdidas debidas a las resistencias electrónicas son normalmente mucho menores que las debidas a la resistencia al transporte de iones a través del electrolito, que, en el caso de una PEMFC, es el transporte de protones (H^+). Las pérdidas óhmicas son proporcionales a la densidad de corriente y dependen del tipo de material utilizado, la geometría de la pila y la temperatura.

2.3.7.4. Pérdidas por concentración o transporte de masa

Las pérdidas por concentración se producen como resultado del consumo de los reactantes en la superficie de los electrodos, que genera a su vez un gradiente en la concentración entre la superficie de los electrodos y los canales de flujo. Los mecanismos de transporte de los reactantes a través de las capas difusoras (GDL) y de la estructura del electrodo hasta la superficie catalizadora incluyen convección, difusión y/o migración de reactantes y productos (H_2 , O_2 , H^+ y agua) hacia y desde las capas catalíticas situadas en el ánodo y cátodo. Las pérdidas por concentración o transporte de masa dependen fuertemente de la densidad de corriente, la activación de los reactantes, la estructura de los electrodos y de la geometría de los canales de flujo [13].

2.3.8. Influencia de la geometría en el rendimiento

Un diseño apropiado de los canales de flujo de una PEMFC permitirá potenciar las velocidades de transporte de reactivo en el propio canal así como en la GDL antes de alcanzar la capa catalítica, donde tiene lugar la reacción. También será beneficioso en la gestión de agua generada en el cátodo, con el fin de que se elimine de forma adecuada. Además, una distribución homogénea del gas en el canal de flujo, proporcionará a su vez, una densidad de corriente homogénea en toda el área reactiva y, por tanto, una distribución uniforme de la temperatura, que ocasionará menos tensiones mecánicas en la MEA, prolongando la vida útil de la PEMFC.

Teniendo en cuenta que el coste de la MEA representa casi el 70% del coste total de una pila de combustible [14], es evidente que la vida útil de este componente es una variable importante sobre la que se puede actuar para aumentar el rendimiento global del sistema.

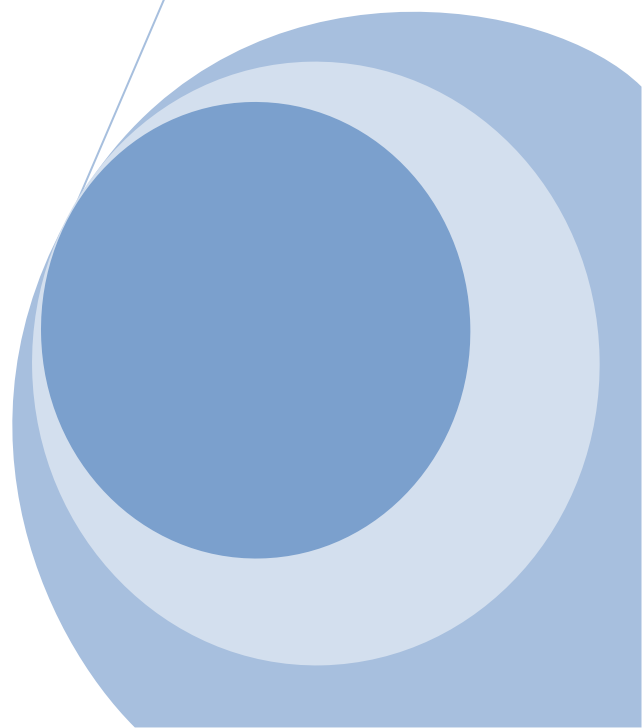
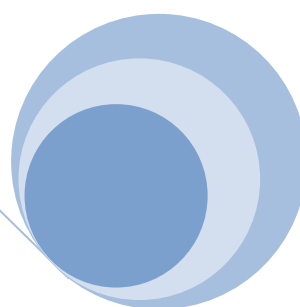
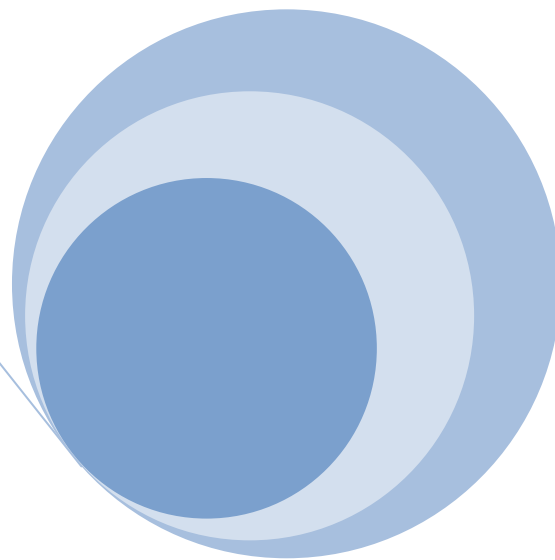
2.4. Referencias

- [1] BP Statistical Review of World Energy (June 2010). Dirección URL: <http://bp.com/statisticalreview>. [Consulta: 30 marzo 2011].
- [2] Fernando Bullón Miró, El mundo ante el cenit del petróleo, Asociación para el estudio de los recursos energéticos (AEREN), 2006. Dirección URL: [http://www.crisisenergetica.org/staticpages/El mundo ante el cenit del petroleo.htm](http://www.crisisenergetica.org/staticpages/El_mundo_ante_el_cenit_del_petroleo.htm). [Consulta: 30 marzo 2011].
- [3] José Ignacio Linares Hurtado, Beatriz Yolanda Moratilla Soria, El hidrógeno y la energía, Editado por Asociación Nacional de Ingenieros del ICAI y Universidad Pontificia de Comillas, 2007.
- [4] Mario Aguer Hortal, Ángel L. Miranda Barreras, EL HIDRÓGENO, Fundamento de un futuro equilibrado, Ed. Díaz de Santos, 2005.
- [5] Transportation Technology R&D Center. Argonne National Laboratory. Dirección URL: www.transportation.anl.gov/index.html. [Consulta: 30 marzo 2011].
- [6] Grove, W. R., On Voltaic Series and the Combination of Gases by Platinum, London and Edinburgh Philosophical Magazine and Journal of Science, Series 3, 14, pp. 127-130-420, 1839.
- [7] "The Birth of the Fuel Cell 1835-1845", Ulf Bossel, The European Fuel Cell Forum, Switzerland, 2000.
- [8] Gutiérrez L., El hidrógeno, combustible del futuro. Curso de energía y combustibles. Foro de la Industria Nuclear Española, 2005.
- [9] National Fuel Cell Research Center, University of California, Irvine. Dirección URL: www.nfcrcc.uci.edu. [Consulta: 30 marzo 2011].
- [10] Fuel Cell Technologies Program. U.S. Department of energy. Dirección URL: www.energy.gov. [Consulta: 30 marzo 2011].
- [11] Chen E., Thermodynamics and Electrochemical Kinetics, en G. Hoogers (editor), Fuel Cell Technology Handbook, CRC Press, 2003.

- [12] Ryan O'Hayre, Suk-Won Cha, Whitney Colella, Fritz B. Prinz, Fuel Cell Fundamentals (second edition), J. Wiley & Sons, New York, 2009.
- [13] Xianguo Li, Imran Sabir, International Journal of Hydrogen Energy 30 (2005) 359-371.
- [14] J. Sinha, S. Lasher, Y. Yang, Direct Hydrogen PEMFC Manufacturing Cost Estimation for Automotive Applications, DOE Annual Merit Review, Arlington, VA, May 21, 2009.

Capítulo 3

Modelo de una PEMFC



Índice

CAPÍTULO 3: MODELO DE UNA PEMFC	49
3.1. Introducción.....	49
3.2. Modelo matemático	51
3.2.1. Antecedentes.....	52
3.2.2. Modelo geométrico y dominio computacional	53
3.2.3. Desarrollo del modelo.....	55
3.2.4. Notación.....	57
3.2.5. Ecuaciones	60
3.3. Referencias	66

CAPÍTULO 3: MODELO DE UNA PEMFC

3.1. Introducción

Como se ha presentado en el Capítulo 2, una pila de combustible de tipo PEM es un dispositivo electroquímico de conversión energética que produce electricidad directamente a partir de combustibles por combinación electroquímica de los mismos con un oxidante. En el caso de pilas que utilizan hidrógeno como combustible y oxígeno como oxidante, los subproductos del proceso global son la corriente continua obtenida, el calor de la reacción exotérmica y agua. Las reacciones básicas que se producen en el ánodo y cátodo son respectivamente:



Cada pila consta de dos electrodos, un ánodo y un cátodo separados por un electrolito. El combustible se suministra al ánodo, donde ocurre la reacción de oxidación según la ecuación (3.1), liberando electrones al circuito externo. El oxidante se suministra al cátodo, a donde llegan los electrones del circuito externo, dando lugar a la reacción de reducción según la ecuación (3.2). El flujo de electrones, desde el ánodo al cátodo a través del circuito externo, produce corriente eléctrica. En las pilas de combustible tipo PEM, el electrolito es una membrana sólida que permite el transporte de protones desde el ánodo hasta el cátodo y está constituida normalmente por un polímero de ácido perfluorosulfónico hidratado tal como Nafion[®], que se coloca entre dos electrodos porosos a los que se incorpora el electrocatalizador (normalmente con base de platino). El paquete compuesto por el electrodo poroso o GDL del ánodo, capa de catalizador del ánodo, membrana polimérica, capa de catalizador del cátodo y electrodo poroso o GDL del cátodo, se denomina MEA.

Aunque a simple vista el sistema formado por una pila de combustible de tipo PEM es bastante simple, existen diferentes reacciones electroquímicas y fenómenos de transporte que tienen lugar en su interior que dificultan la comprensión de su funcionamiento interno y, por lo tanto, su modelado matemático. Con respecto a los fenómenos de transporte, se pueden destacar el transporte de masa convectivo de los reactivos y productos hacia (o desde) la superficie de los electrodos, el transporte de masa de reactivos y productos a través de las capas difusoras, la conducción de electrones a través de las capas difusoras y placas, la conducción de iones a través del electrolito y los electrodos, la generación de agua en el cátodo y su movimiento a través del medio poroso, así como los procesos de conducción, convección y radiación de calor a través de la pila.

La Figura 3-1 muestra un esquema básico de una pila de combustible de hidrógeno donde se indican algunos de los fenómenos de transporte que tienen lugar en ella. Los reactivos se transportan por difusión a través de las GDL hasta las capas catalizadoras. El transporte de agua a través del electrolito (membrana) es debido a varios procesos. Por una parte, el transporte de protones a través de la membrana se efectúa junto con moléculas de agua. Es lo que se denomina **arrastre electrosmótico** [$H^+ + n(H_2O)$]. Por otra parte, el agua generada en el cátodo por efecto de la reacción electroquímica se difunde a través de la membrana hacia el ánodo. Este efecto se conoce como difusión (**back diffusion**). Por lo tanto, el flujo neto de agua a través de la membrana será la diferencia entre el arrastre electrosmótico y el transporte por difusión.

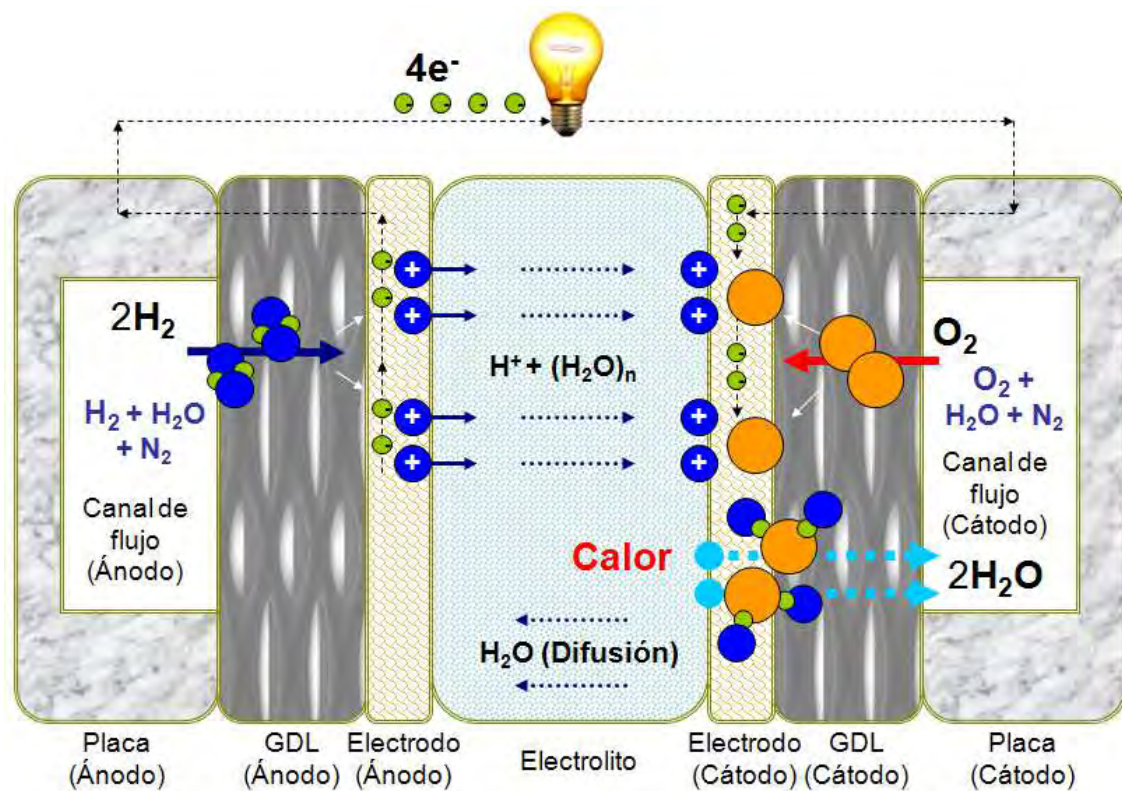


Figura 3-1. Esquema de funcionamiento de una pila de combustible de hidrógeno y fenómenos de transporte

Generalmente el combustible es una mezcla gases compuesta principalmente por hidrógeno y vapor de agua (debido a la humidificación del combustible) y que eventualmente podría contener nitrógeno. El oxidante puede ser oxígeno puro o aire, es decir, una mezcla de gases compuesta principalmente por oxígeno, nitrógeno y vapor de agua.

3.2. Modelo matemático

Los aspectos físicos de cualquier flujo de un fluido se rigen por tres principios fundamentales: ley de la **conservación de la masa**, ley de la **conservación de cantidad de movimiento** (conservación del momento lineal o moméntum, también conocida como la segunda ley de Newton) y ley de la **conservación de la energía** (primera ley de la termodinámica). Estos principios fundamentales se pueden expresar en términos de ecuaciones matemáticas, que en su forma más general suelen ser ecuaciones diferenciales parciales. A este conjunto de ecuaciones dadas en su forma diferencial también se le denomina ecuaciones de Navier-Stokes. Dado que no existe una solución general a dicho conjunto de ecuaciones debido a su complejidad, para cada problema concreto de mecánica de fluidos se estudian estas ecuaciones buscando simplificaciones que faciliten la resolución del problema. En algunos casos no es posible obtener una solución analítica, por lo que se ha de recurrir a la mecánica de fluidos computacional o CFD (Acrónimo en inglés de *Computational Fluid Dynamics*; Dinámica de Fluidos Computacional) que, utilizando métodos numéricos y algoritmos computacionales, permite obtener una solución lo más aproximada posible al problema real.

Para el modelado de las complejidades físicas asociadas a las pilas de combustible de tipo PEM es necesario un modelo matemático avanzado que pueda resolver simultáneamente las ecuaciones de conservación de la masa, conservación de la cantidad de movimiento, conservación de la energía y conservación de especies teniendo en cuenta los efectos de las reacciones electroquímicas que se suceden en el interior de la pila. El modelo matemático utilizado para el desarrollo de este proyecto de tesis es el incluido en el módulo experto **es-pemfc** (versión 2.2), desarrollado por un equipo de investigadores de la Universidad de Carolina del Sur en Estados Unidos como complemento al software de fluidodinámica computacional STAR-CD (versión 3.26) de la empresa CD-Adapco [28, 29]. Para la resolución del acoplamiento de todas las ecuaciones que rigen los procesos internos, este software utiliza una técnica de análisis de volumen de control, que consiste en la aplicación de las leyes básicas de conservación para un determinado volumen fijo (con respecto a un sistema de referencia) separado del exterior por la superficie de control.

El objetivo del módulo experto **es-pemfc** es la simulación tridimensional del comportamiento de pilas de combustible de tipo PEM con diferentes configuraciones de canales de flujo, a través de la predicción de las distribuciones locales de diferentes variables como la densidad de corriente, temperatura, concentración de especies (gases o líquidas) y de variables electroquímicas como el flujo neto de agua por protón, la conductividad de la membrana o el sobrepotencial (polarización). Las ecuaciones del modelo incluyen las ecuaciones de conservación de la masa, conservación del momento, transporte de especies y conservación de la energía en estado estacionario.

3.2.1. Antecedentes

Bajo condiciones de funcionamiento estándar los gases presentes se encuentran cerca de la saturación, por lo que en muchas ocasiones el agua se encontrará tanto en fase vapor como líquida formando un flujo bifásico homogéneo. Además, el transporte de especies no es únicamente en la dirección del flujo principal (dirección axial) sino que existen flujos en dirección perpendicular al flujo principal. Por lo tanto, el modelo matemático además de resolver las ecuaciones tridimensionales de Navier-Stokes para el flujo de múltiples especies, debe incluir los efectos del cambio de fase del agua. Esta inclusión es imprescindible para considerar sus efectos en la transferencia de masa y calor dentro de los canales de flujo de la PEMFC [1-9], [14-16], [18], [20-27].

La solución obtenida será más cercana a la realidad si las reacciones electroquímicas y las ecuaciones del cambio de fase del agua se resuelven simultáneamente con las ecuaciones de masa, cantidad de movimiento y energía para obtener las distribuciones de velocidad y presión a lo largo del canal de flujo. Por otra parte, para la ecuación de la energía se tienen en cuenta las distribuciones de temperatura en la membrana, en el canal de flujo y en las placas bipolares.

Las ecuaciones fundamentales que regulan los balances de masa, cantidad de movimiento y energía se recogen en la Tabla 3-1 (pág. 60). Los términos fuente que incluyen las diferentes especies y la generación de calor por las reacciones electroquímicas y de cambio de fase del agua se detallan en la Tabla 3-2 (pág. 61).

Las ecuaciones de estos términos fuente son el complemento necesario para que el SOLVER tridimensional de STAR-CD desarrolle una computación eficiente, alcanzando una convergencia numérica de las ecuaciones fundamentales con la tolerancia deseada.

En Shimpalee et al. [2] se presenta una revisión de diferentes modelos unidimensionales bidimensionales y tridimensionales de pilas de tipo PEM. Se han realizado simulaciones numéricas 3D de pilas tipo PEM utilizando una extensión de las ecuaciones de dichos modelos [3-8], pero sólo unos pocos hacen referencia al comportamiento bifásico del agua [3-5]. Otros trabajos [9,11] muestran modelos 2D bifásicos sin balance de energía.

En Wang et al. [12] se estudia el transporte de especies en un medio bifásico en el cátodo. En este modelo se muestra cómo puede influir el efecto de la capilaridad al transporte de agua en el interior de la pila. Por otra parte, dicho modelo no considera el efecto del calor generado en el interior de la pila y éste es suficientemente significativo como para reducir la cantidad de agua líquida presente mediante evaporación.

Varios trabajos [8, 11, 12] tienen en cuenta la distribución de agua en la membrana a través de ecuaciones que consideran el arrastre electroosmótico, pero algunos de ellos [8] utiliza

propiedades constantes en lugar de coeficientes que dependen de la concentración de agua entre el ánodo y el cátodo.

Sin embargo, en Shimpalee et al. [3, 4] se considera que el flujo global de agua a través de la membrana depende del parámetro denominado actividad del agua. Así, tanto el transporte por arrastre electroosmótico (desde el ánodo hacia el cátodo) como el transporte por difusión (desde el cátodo hacia el ánodo) son parámetros dependientes del contenido neto de agua en la membrana, que a su vez depende de la actividad del agua. Con la aplicación de estas ecuaciones se han obtenido simulaciones que coinciden con datos experimentales obtenidos en laboratorio cuando la cantidad de agua condensada era moderada [5, 13,14, 15, 26, 27] (para cantidades condensadas superiores el agua líquida impide el acceso de los reactivos a las capas catalíticas, bloqueando el funcionamiento de la pila, efecto denominado **flooding**).

En el modelo utilizado en este proyecto de tesis el balance de energía incluye términos fuente para considerar el calor generado por las pérdidas eléctricas, por la formación electroquímica del agua y por el cambio de fase. Además, se considera que el agua condensada forma una fina película que restringe el transporte de los reactivos y productos, que fluyen a través de dicha capa líquida de acuerdo a la ley de Henry de solubilidad [12].

En W. K. Lee et al. [15] se testeó el modelo descrito aquí y los resultados confirmaron que las ecuaciones proporcionan predicciones acordes con las mediciones experimentales del flujo de agua a través de una membrana determinada.

Por tanto, este modelo convierte los aspectos electroquímicos de las ecuaciones fundamentales en términos fuente apropiados para su uso en el análisis numérico. Además, los términos fuente que simulan la reacción electroquímica exotérmica y el calor del cambio de fase del agua están incluidos en la ecuación tridimensional de la energía como se mostró en [4].

3.2.2. Modelo geométrico y dominio computacional

El modelo geométrico utilizado para el desarrollo y verificación del modelo matemático es el de una monocelda con canal de flujo simple de tipo serpentin SSF (Acrónimo en inglés de *Serpentine-single flow field*) típico en este tipo de pilas. La configuración de los flujos en los canales del ánodo y cátodo puede ser en la misma dirección, a contracorriente o en flujos cruzados a 90°. En la Figura 3-2 se representa el modelo geométrico de una monocelda básica con canales de flujo en ánodo y cátodo en disposición paralela.

El dominio computacional utilizado para el modelado matemático de la PEMFC se ha desarrollado sobre la sección transversal de una monocelda con canales de flujo en el ánodo y cátodo dispuestos en paralelo. En la Figura 3-3 se representa el detalle de la geometría de la sección transversal del canal de flujo considerado en el dominio computacional, sus

componentes y una disposición típica del mallado utilizado para la simulación dinámica. El origen para el eje Z está situado en Z_7 .

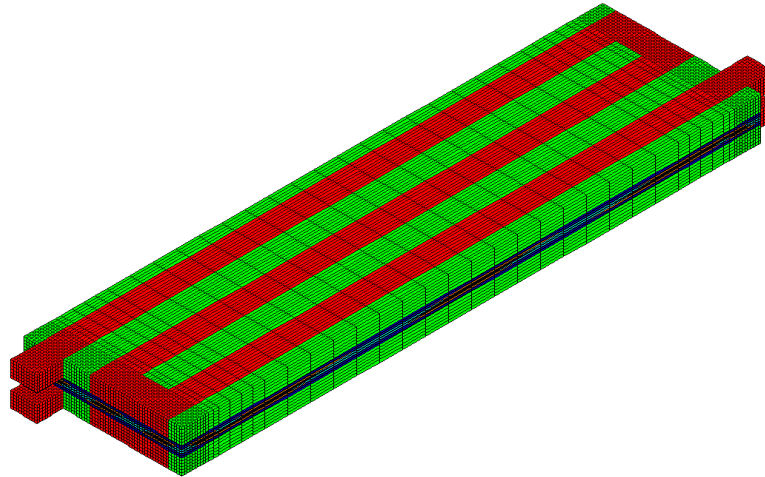


Figura 3-2. Modelo geométrico de una monocelda con canal de flujo simple de tipo serpentin

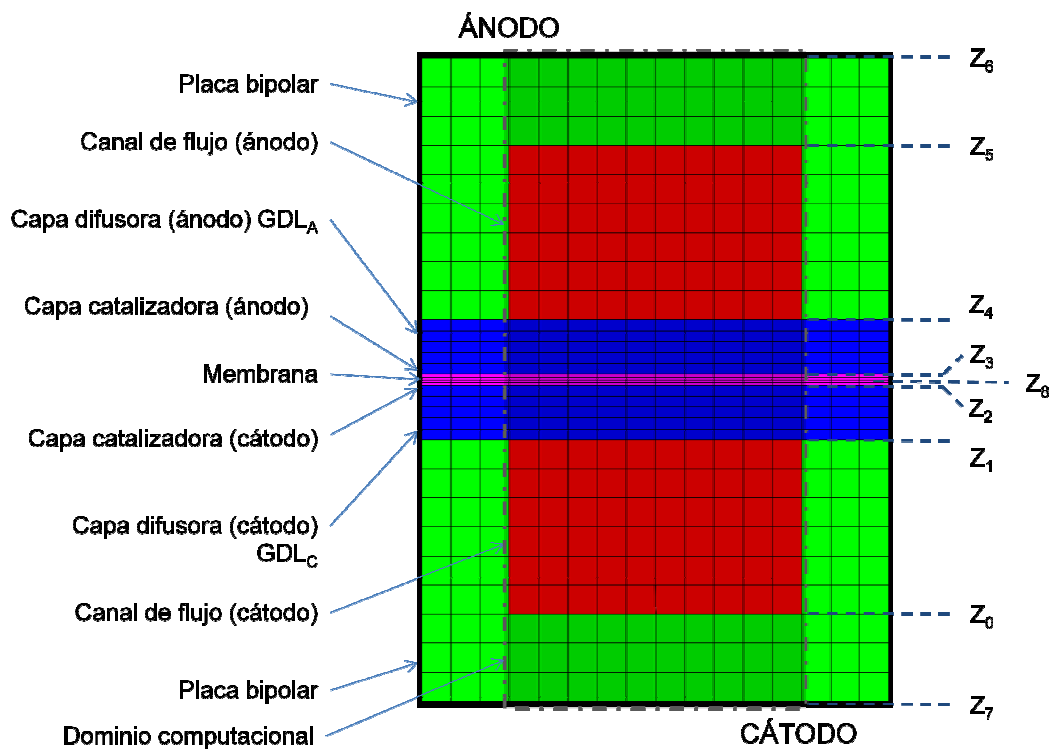


Figura 3-3. Modelo geométrico de la sección transversal de un canal de flujo y dominio computacional

Tal y como se aprecia en la Figura 3-3, el dominio computacional utilizado para el modelado matemático de la PEMFC se compone de las siguientes partes:

- Canal de flujo anódico ($Z_4 - Z_5$)
- Capa de difusión anódica o GDL_A ($Z_3 - Z_4$)
- Capa catalizadora anódica (electrodo) (Z_3)
- Membrana (Z_8)
- Capa catalizadora catódica (electrodo) (Z_2)
- Capa de difusión catódica o GDL_C ($Z_1 - Z_2$)
- Canal de flujo catódico ($Z_0 - Z_1$)
- Placas bipolares ($Z_7 - Z_0$ y $Z_5 - Z_6$)

3.2.3. Desarrollo del modelo

Para el desarrollo del modelo matemático utilizado en este proyecto de tesis se han considerado cuatro especies químicas diferentes: hidrógeno, oxígeno, nitrógeno y agua. El agua puede existir en estado líquido o en forma de vapor en función de la presión de vapor y total local. El nitrógeno por su parte puede existir en cualquier parte de la pila.

La ecuación de la conservación de la masa, ecuación (3.3) de la Tabla 3-1, se ha modificado en el solucionador del flujo tridimensional de STAR-CD para incluir los aspectos electroquímicos de una pila de combustible. El cambio de fase del agua se simula mediante los términos fuente S_m como se aprecia en las ecuaciones (3.11),(3.13)-(3.18) de la Tabla 3-2. Estos términos de la reacción electroquímica se corresponden con el consumo de hidrógeno y vapor de agua en el ánodo, y con el consumo de oxígeno y producción de agua en el cátodo. La ecuación (3.14) considera el cambio de fase del agua mediante comparación de la presión parcial del vapor de agua con la presión de saturación a la temperatura local. Si la presión parcial del vapor es mayor que la presión de saturación entonces el vapor de agua se condensa formándose agua en estado líquido. En cambio, si la presión parcial del vapor de agua es menor que la presión de saturación parte del agua líquida se transforma en vapor. La cantidad evaporada está limitada por la cantidad de agua líquida disponible en el volumen de control. Las ecuaciones (3.15) y (3.16) representan los términos fuente del vapor producido y consumido por efectos electroquímicos en la superficie de la membrana, tanto en la zona anódica como catódica.

El flujo de agua a través de la membrana se incluye como término fuente en el ánodo y cátodo a través de la consideración del flujo neto de agua por protón. Este parámetro, $\alpha(x,y)$, representa la diferencia entre el arrastre electroosmótico y el transporte por difusión (*back diffusion*) y depende del contenido de agua en la membrana λ y el coeficiente de difusión del agua D_w , definidos respectivamente en las ecuaciones (3.24), (3.25), (3.26) y (3.27) de la Tabla 3-3 (pág. 63).

La ecuación de la conservación de la cantidad de movimiento, (3.4) de la Tabla 3-1, incluye un término fuente para el medio poroso ($z_3 \leq z \leq z_4$ y $z_2 \leq z \leq z_1$) utilizado para modelar el flujo a través de las capas de difusión (GDL). Este término está basado en la ecuación de Darcy [17].

Las ecuaciones del transporte de especies (ecuaciones (3.5), (3.6), (3.7) y (3.8) de la Tabla 3-1) se resuelven para los flujos másicos de hidrógeno, vapor de agua, agua en estado líquido y oxígeno, considerando las velocidades del flujo global de la mezcla (u , v y w) y los flujos másicos de difusión ($J_{\xi,n}$). El modelo asume que el agua en estado líquido está en forma de pequeñas gotitas suspendidas en el flujo gaseoso. Así mismo, este modelo utiliza la ecuación de Navier-Stokes en su forma Laplaciana, por lo que se asume que el flujo es un flujo bifásico homogéneo. Esta consideración se ajusta perfectamente a las condiciones normales de funcionamiento de una PEMFC, ya que una gran cantidad de agua en estado líquido bloquearía el funcionamiento de la pila.

Los coeficientes binarios de difusión se calculan mediante la ecuación (3.23) de la Tabla 3-3. El coeficiente de difusión de cada especie en la mezcla se considera en la GDL para incluir el efecto de la porosidad y la tortuosidad de los poros, como se discute en Dutta et al. [18].

El flujo de agua a través de la membrana es una variable importante para una correcta predicción del comportamiento de una PEMFC. Este modelo utiliza la misma ecuación para el contenido de agua en la membrana que en Springer et al. [19]. La ecuación (3.26) representa la relación entre el coeficiente de arrastre electroosmótico y el contenido de agua en la membrana. Esta ecuación está obtenida mediante ajuste a una curva de los datos publicados en Springer et al. [19]. La ecuación para calcular el coeficiente de difusión del agua, ecuación (3.27) de la Tabla 3-3, utiliza un coeficiente de difusión corregido (D_λ) que depende de la temperatura de operación y del contenido neto de agua en la superficie de la membrana (λ).

Las expresiones para la concentración de agua en las fases líquida y gaseosa en las zonas anódica y catódica se representan en las ecuaciones (3.28) y (3.29). La densidad de corriente local, ecuación (3.30), es una función de las propiedades de la membrana, del potencial de la pila y del sobrepotencial [1], [14], [16], [20-27]. La ecuación para la conductividad de la membrana o resistencia iónica de la membrana, se representa mediante la ecuación (3.31). Esta ecuación está desarrollada a partir de los datos de Springer et al. [19] y es función del contenido de agua en la zona anódica de la membrana y la temperatura local. La ecuación (3.32) representa la expresión para el sobrepotencial local de la pila, incluyendo entre otros el efecto de la polarización debido a la dilución del hidrógeno en nitrógeno [1], [4], [16]. Para el cálculo del sobrepotencial local el modelo utilizado permite diferentes opciones. La primera opción sólo considera las pérdidas por activación tanto en el ánodo como en el cátodo, por lo que es útil para simplificar los cálculos en puntos de la curva de polarización donde la intensidad de corriente es baja. La segunda opción considera tanto las pérdidas por activación como las pérdidas por concentración, resultando la opción más cercana al proceso real sobre todo para el cálculo de puntos donde la intensidad de corriente es cercana a la intensidad

límite. En los cálculos desarrollados en este proyecto de tesis siempre se ha utilizado esta segunda opción.

Es importante resaltar que todos los términos fuente de la Tabla 3-2 corresponde al volumen de control y no a las condiciones de contorno en las superficies anódica y catódica de la membrana. Para la correcta determinación de las concentraciones y actividades entre la membrana y las capas de difusión, la fracción molar de cada especie utilizada en estas ecuaciones es extrapolada a la superficie de la membrana. El modelo utilizado en este proyecto de tesis utiliza una extrapolación lineal que ha resultado satisfactoria, con soluciones independientes del mallado en un dominio computacional como el de la Figura 3-3 [18]. Sin embargo, en el caso de que exista una película de agua en estado líquido en la superficie de la membrana no se utiliza esta extrapolación lineal, sino que se considera la resistencia a la transferencia de masa de los reactivos a través de esta película según la ley de Henry de solubilidad mediante las ecuaciones (3.33), (3.34), (3.35), (3.36), (3.37) de la Tabla 3-3.

Las fuentes de calor utilizadas en este modelo combinan las pérdidas de energía electroquímica, S_{he} , y los efectos térmicos debidos al cambio de fase del agua, S_{hp} . El calor generado por las pérdidas electroquímicas ocurre en el interior de la membrana (z_8 en la Figura 3-3). La magnitud de esta energía viene dado por la diferencia entre el calor producido por la reacción electroquímica de formación del agua en la superficie catódica de la membrana (z_2 en la Figura 3-3) y la energía eléctrica extraída de la pila, como muestra la ecuación (3.19) de la Tabla 3-2. La segunda fuente de calor, S_{hp} , es debida al efecto del cambio de fase del agua. Este fenómeno puede ocurrir en cualquier punto de los canales de flujo y GDLs, y viene dado por la ecuación (3.20) de la Tabla 3-2.

3.2.4. Notación

a_k	Actividad del agua en la corriente k . Adimensional.
A_{cv}	Superficie específica del volumen de control (v.c.), m^{-1}
$Area_{cv}$	Superficie del volumen de control, m^2
C_{wk}	Concentración de vapor de agua en la $k^{ésima}$ interfaz de la membrana, $mol\ m^{-3}$
C_{wlk}	Concentración de agua líquida en la $k^{ésima}$ interfaz de la membrana, $mol\ m^{-3}$
$D_{H_2/l}$	Coefficiente de difusión de H_2 en una película de agua líquida, $6.3 \times 10^{-9}\ m^2\ s^{-1}$
$D_{O_2,l}$	Coefficiente de difusión de O_2 en una película de agua líquida, $2.4 \times 10^{-9}\ m^2\ s^{-1}$
$D_{n,j}$	Coefficiente de difusión binaria de la especie n en la mezcla de gases j , $m^2\ s^{-1}$
D_w	Coefficiente de difusión del agua, $m^2\ s^{-1}$
D_ϕ	Conductividad efectiva (S/m) de las GDL y placas bipolares
F	Constante de Faraday, $96487\ C\ mol^{-1}$

$H_{H_2,l}$	Constante de la ley de Henry para el hidrógeno en una película de agua líquida, 8.9×10^9 Pa
$H_{O_2,l}$	Constante de la ley de Henry para el oxígeno en una película de agua líquida, 2.12×10^{10} Pa
h_{rxn}	Entalpía de formación del agua, kJ kmol^{-1}
h_{fg}	Entalpía de vaporización del agua, kJ kmol^{-1}
I	Densidad de corriente local, A m^{-2}
$I_{o,K}$	Densidad de corriente de intercambio para la reacción K, A m^{-2}
$m_{n,K}$	Fracción másica de la especie n en la corriente k. Adimensional.
$M_{m,dry}$	Peso equivalente de la membrana seca, kg mol^{-1}
M_n	Peso molecular de la especie n, kg mol^{-1}
$mass_n$	Masa de la especie n, kg
$m_{w,l}$	Fracción másica de agua líquida
n_d	Arrastre electroosmótico (número de moléculas de agua transportadas por protón)
$P_{w,k}^{sat}$	Presión de vapor del agua en la corriente k, Pa
P	Presión, Pa
P_n	Presión parcial de la especie n, Pa
Q	Flujo volumétrico, m^3s^{-1}
R	Constante universal de los gases, $8.314 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$
r	Tasa de condensación, s^{-1}
S	Término fuente
S_{he}	Término fuente del calor debido a las pérdidas electroquímicas para la ecuación de la energía.
S_{hp}	Término fuente del calor debido al cambio de fase del agua para la ecuación de la energía.
S_ϕ	Término fuente del potencial de fase. (A/m^3)
t_m	Espesor de la membrana, m
$t_{f,a}$	Espesor de la película de agua líquida en el ánodo, m
$t_{f,c}$	Espesor de la película de agua líquida en el cátodo, m
T	Temperatura, K
u,v,w	Velocidad en las direcciones x, y, and z respectivamente, m s^{-1}
V_{oc}	Voltaje de pila a circuito abierto, V
V_{cell}	Voltaje de pila, V

X_L	Longitud del canal medido desde la entrada del ánodo, m
$X_{i,k}$	Fracción molar de la especie i en la corriente k

Símbolos griegos

$\alpha(x, y)$	Flujo neto de agua por protón
α_K	Coefficiente de transferencia para la reacción K , ver Tabla 2-3
β_ξ	Permeabilidad en la dirección ξ
ε	Porosidad de la capa de difusión de gas (GDL)
$\eta(x, y)$	Sobrepotencial (polarización) para la reacción del oxígeno, V , ver Tabla 2-3
λ	Contenido de agua en la membrana
η	Viscosidad dinámica, $\text{kg}\cdot\text{s}\cdot\text{m}^{-2}$
$\rho_{m,dry}$	Densidad de la membrana seca, $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$
ρ	Densidad de la mezcla, $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$
ρ_n	Densidad de la especie n , $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$
σ_m	Conductividad de la membrana, $\text{S}\cdot\text{m}^{-1}$

Subíndices y superíndices

a	Ánodo
c	Cátodo
e	Reacción electroquímica
H_2	Hidrógeno
K	Ánodo o cátodo
l	Líquido
N_2	Nitrógeno
O_2	Oxígeno
p	Cambio de fase
v	Vapor de agua
w	Agua líquida
sat	Saturada
ξ	Variable para la dirección x , y , o z

3.2.5. Ecuaciones

Tabla 3-1. Ecuaciones fundamentales

Ecuaciones fundamentales de la dinámica de fluidos	
Conservación de la masa	$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho v) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho w) = S_m \quad (3.3)$ $u \frac{\partial}{\partial x} (\rho u) + v \frac{\partial}{\partial y} (\rho u) + w \frac{\partial}{\partial z} (\rho u) =$ $= -\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial z} \right) + S_{px}$
Conservación de la cantidad de movimiento	$u \frac{\partial}{\partial x} (\rho v) + v \frac{\partial}{\partial y} (\rho v) + w \frac{\partial}{\partial z} (\rho v) = \quad (3.4)$ $= -\frac{\partial P}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial z} \right) + S_{py}$ $u \frac{\partial}{\partial x} (\rho w) + v \frac{\partial}{\partial y} (\rho w) + w \frac{\partial}{\partial z} (\rho w) =$ $= -\frac{\partial P}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial z} \right) + S_{pz}$
Transporte de hidrógeno (Ánodo)	$\frac{\partial}{\partial t} (\rho m_{H_2}) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho m_{H_2}) + v \frac{\partial}{\partial y} (\rho m_{H_2}) + w \frac{\partial}{\partial z} (\rho m_{H_2}) = \quad (3.5)$ $= \frac{\partial}{\partial x} (J_{x,H_2}) + \frac{\partial}{\partial y} (J_{y,H_2}) + \frac{\partial}{\partial z} (J_{z,H_2}) + S_{H_2}$
Transporte de vapor de agua	$\frac{\partial}{\partial t} (\rho m_{wv}) + u \frac{\partial}{\partial x} (\rho m_{wv}) + v \frac{\partial}{\partial y} (\rho m_{wv}) + w \frac{\partial}{\partial z} (\rho m_{wv}) = \quad (3.6)$ $= \frac{\partial}{\partial x} (J_{x,wv}) + \frac{\partial}{\partial y} (J_{y,wv}) + \frac{\partial}{\partial z} (J_{z,wv}) + S_{wv,p} + S_{awv,e} + S_{cwv,e}$

Ecuaciones fundamentales de la dinámica de fluidos (Cont.)

$$\begin{aligned} \text{Transporte de agua líquida} \quad & \frac{\partial}{\partial t}(\rho m_{w1}) + u \frac{\partial}{\partial x}(\rho m_{w1}) + v \frac{\partial}{\partial y}(\rho m_{w1}) + w \frac{\partial}{\partial z}(\rho m_{w1}) = \\ & = \frac{\partial}{\partial x}(J_{x,w1}) + \frac{\partial}{\partial y}(J_{y,w1}) + \frac{\partial}{\partial z}(J_{z,w1}) + S_{w1p} \end{aligned} \quad (3.7)$$

$$\begin{aligned} \text{Transporte de oxígeno} \quad & \frac{\partial}{\partial t}(\rho m_{O_2}) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho m_{O_2}) + v \frac{\partial}{\partial y}(\rho m_{O_2}) + w \frac{\partial}{\partial z}(\rho m_{O_2}) = \\ \text{(Cátodo)} \quad & = \frac{\partial}{\partial x}(J_{x,O_2}) + \frac{\partial}{\partial y}(J_{y,O_2}) + \frac{\partial}{\partial z}(J_{z,O_2}) + S_{O_2} \end{aligned} \quad (3.8)$$

$$\begin{aligned} \text{Conservación de la energía} \quad & \frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u h) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v h) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho w h) = \\ & = \frac{\partial}{\partial x}\left(k \frac{\partial T}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(k \frac{\partial T}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(k \frac{\partial T}{\partial z}\right) + S_{hp} + S_{he} \end{aligned} \quad (3.9)$$

$$\text{Transporte de electrones} \quad \int_S D_\phi \nabla \phi \cdot dS + \int_V S_\phi dV \quad (3.10)$$

Tabla 3-2. Términos fuente para las ecuaciones fundamentales

Términos fuente volumétricos y lugar de aplicación de acuerdo con la Figura 3-3

$$\begin{aligned} \text{Conservación de la masa} \quad & S_m = S_{H_2} + S_{wvp} + S_{wlp} + S_{awve} \quad \text{en } z = z_3 \\ & S_m = S_{O_2} + S_{wvp} + S_{wlp} + S_{awve} \quad \text{en } z = z_2 \end{aligned} \quad (3.11)$$

$$\begin{aligned} \text{Conservación de la cantidad de movimiento} \quad & S_{px} = -\frac{\mu u}{\beta_x} S_{py} = -\frac{\mu v}{\beta_y} S_{pz} = -\frac{\mu w}{\beta_z} \quad \text{en } z_1 \leq z \leq z_2 \quad \text{and} \\ & z_3 \leq z \leq z_4 \end{aligned} \quad (3.12)$$

$$\text{Transporte de } H_2 \text{ (Ánodo)} \quad S_{H_2} = -\frac{I(x,y)}{2F} M_{H_2} A_{cv} \quad \text{en } z = z_3 \quad (3.13)$$

**Términos fuente volumétricos y lugar de aplicación de acuerdo con la
Figura 3-3 (Cont.)**

$$S_{wvp} = \frac{M_{H_2O} \Sigma_{nofv} \frac{mass_{nofv}}{M_{nofv}}}{\left(1 - \frac{P_{wv}^{sat}}{P}\right)} \left[\frac{P_{wv}^{sat} - P_{wv}}{P} \right] r \quad \text{en } z_0 \leq z \leq z_5 \quad (3.14)$$

Transporte de agua
en fase vapor

$$S_{awve} = -\frac{\alpha(x,y)}{F} I(x,y) M_{H_2O} A_{cv} \quad \text{en } z = z_3 \quad (3.15)$$

$$S_{cwwve} = -\frac{1+2\alpha(x,y)}{2F} I(x,y) M_{H_2O} A_{cv} \quad \text{en } z = z_2 \quad (3.16)$$

Transporte de agua
líquida

$$S_{wlp} = -S_{wvp} \quad \text{en } z_0 \leq z \leq z_5 \quad (3.17)$$

Transporte de O₂
(Cátodo)

$$S_{O_2} = -\frac{I(x,y)}{4F} M_{O_2} A_{cv} \quad \text{en } z = z_2 \quad (3.18)$$

Calor generado por pérdidas electroquímicas

$$S_{he} = h_{rxn} \left[\frac{1}{2F} I(x,y) A_{cv} \right]_{z=z_2} - (I(x,y) V_{cell} A_{cv})_{z=z_2} \quad \text{en } z = z_8 \quad (3.19)$$

Conservación de la
energía

Calor generado por el cambio de fase

$$S_{hp} = S_{wlp} h_{fg} \quad \text{en } z_0 \leq z \leq z_5 \quad (3.20)$$

S_{Φ} = Término fuente de potencial de fase (A/m³)

Transporte de
electrones

$$\begin{aligned} \text{En la capa catalítica del ánodo: } S_{\Phi} &= -\nabla \cdot i \text{ (A/m}^3\text{)} \\ \text{En la capa catalítica del cátodo: } S_{\Phi} &= \nabla \cdot i \text{ (A/m}^3\text{)} \end{aligned} \quad (3.21)$$

i = Densidad de corriente (A/m²)

Tabla 3-3. Ecuaciones para el modelado de los efectos electroquímicos

Ecuaciones para el modelado de los efectos electroquímicos	
Flujo másico de difusión de la especie n en la dirección ξ	$J_{\xi,n} = -\rho D_{\xi,n} \frac{\partial m_{K,n}}{\partial \xi} \quad (3.22)$
Coefficiente binario de difusión	$\frac{PD_{n,j}(x,y)}{(P_{c-n}P_{c-j})^{1/3} (T_{c-n}T_{c-j})^{5/12} \left(\frac{1}{M_n} + \frac{1}{M_j}\right)^{1/2}}$ $= 3.64 \times 10^{-8} \left(\frac{T(x,y)}{\sqrt{T_{c-n}T_{c-j}}}\right)^{2.334} \quad (3.23)$
Coefficiente de transferencia neta de agua por protón	$\alpha(x,y) = n_d(x,y) - \frac{F}{I(x,y)} D_w(x,y) \left(\frac{C_{wc}(x,y) - C_{wa}(x,y)}{t_m}\right) \quad (3.24)$
Contenido neto de agua en la membrana	$\lambda = B1 + B2a_K + B3a_K^2 + B4a_K^3 + B5a_K^4 \quad 0 < a_K \leq 1$
	$\lambda = B6 + B7(a_K - 1) \quad 1 < a_K \leq 3$ $a_K = a_a \text{ por defecto} \quad (3.25)$
Coefficiente de arrastre electroosmótico	$n_d = E3\lambda^3 + E2\lambda^2 + E1\lambda + E4$
	$E1 = 0.05, E2 = 0.0029, E3 = 0.0, E4 = -3.4 \times 10^{-19} \quad (3.26)$

Ecuaciones para el modelado de los efectos electroquímicos (Cont.)

$$D_w = D_\lambda \exp\left(G0\left(\frac{1}{G4} - \frac{1}{T(x,y)}\right)\right)$$

$$D_\lambda = G1 \quad \lambda < L2$$

$$D_\lambda = G1(1 + L2(\lambda - L2)) \quad L2 \leq \lambda \leq L3$$

Coefficiente de difusión del agua $D_\lambda = G2(L3 - L1(\lambda - L3)) \quad L3 < \lambda < L4$ (3.27)

$$D_\lambda = G3 \quad \lambda \geq L4$$

$$G0 = 2416 \text{ K}, G1 = 1 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}, G2 = 1 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s},$$

$$G3 = 1.25 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}, G4 = 303 \text{ K}$$

$$L1 = 1.67, L2 = 2.0, L3 = 3.0, L4 = 4.5$$

Concentración de vapor de agua en las superficies anódica y catódica de la membrana

$$C_{wk}(x, y) = \frac{\rho_{m,dry}}{M_{m,dry}} \lambda \quad (3.28)$$

Actividad del agua $a_K = \frac{X_{w,K} P(x, y)}{P_{w,K}^{sat}} \quad (3.29)$

Densidad de corriente local

$$I(x, y) = \frac{\sigma_m(x, y)}{t_m} (V_{oc} - V_{cell} - \eta(x, y)) \quad (3.30)$$

Conductividad local de la membrana

$$\sigma_m(x, y) = \left(H1 \frac{M_{m,dry}}{\rho_{m,dry}} C_{wa}(x, y) - H2 \right) \exp\left(\left(H3 \left(\frac{1}{H4} - \frac{1}{T(x, y)} \right) + H0 \right)\right) \quad (3.31)$$

$$H1 = 0.514 \text{ S/m}, H2 = 0.326 \text{ S/m}, H3 = 1268 \text{ K}$$

$$H4 = 303 \text{ K}, H0 = 0 \text{ S/m}$$

Ecuaciones para el modelado de los efectos electroquímicos (Cont.)

Opción 1: Sobrepotencial de activación o superficie:
 Término 1 + Término 2

$$\eta(x, y) = \frac{RT(x, y, z_2)}{\alpha_c F} \left(\ln \left[\frac{I(x, y)P(x, y, z_2)}{I_{0O_2} P_{O_2}(x, y, z_2)} \right] \right) + \frac{RT(x, y, z_3)}{\alpha_a F} \left(\ln \left[\frac{I(x, y)P(x, y, z_3)}{I_{0H_2} P_{H_2}(x, y, z_3)} \right] \right)$$

Sobrepotencial local

Opción 2: Opción 1 + sobrepotencial por concentración: (3.32)
 Término 1 + Término 2 + Término 3 + Término 4

$$\eta(x, y) = \frac{RT(x, y, z_2)}{\alpha_c F} \left(\ln \left[\frac{I(x, y)P(x, y, z_2)}{I_{0O_2} P_{O_2}(x, y, z_2)} \right] \right) + \frac{RT(x, y, z_3)}{\alpha_a F} \left(\ln \left[\frac{I(x, y)P(x, y, z_3)}{I_{0H_2} P_{H_2}(x, y, z_3)} \right] \right) + \frac{RT}{4F} \left(\ln \frac{P_{O_2, in}}{P_{O_2}(x, y, z_2)} \right) + \frac{RT}{2F} \left(\ln \frac{P_{H_2, in}}{P_{H_2}(x, y, z_3)} \right)$$

Espesor de la película de agua

$$t_{f,k} = \frac{m_{w,l}(\sum \text{mass}_n)}{\epsilon \rho_{w,l} \text{Area}_{cv}} \quad (3.33)$$

$$P_{O_2}(x, y, z_2) = X_{O_2}(x, y, z_2)P(x, y, z_2) \quad (3.34)$$

$$-\frac{I(x,y)}{4F} M_{O_2} = \rho_{O_2} D_{O_2,l} \left[\frac{X_{O_2}(x,y,z_2-t_{f,c})P(x,y,z_2-t_{f,c})H_{O_2,l}^{-1} - X_{O_2}(x,y,z_2)}{t_{f,c}} \right] \quad (3.35)$$

Solubilidad del gas

$$P_{H_2}(x, y, z_3) = X_{H_2}(x, y, z_3)P(x, y, z_3) \quad (3.36)$$

$$-\frac{I(x,y)}{2F} M_{H_2} = \rho_{H_2} D_{H_2,l} \left[\frac{X_{H_2}(x,y,z_3-t_{f,a})P(x,y,z_3-t_{f,a})H_{H_2,l}^{-1} - X_{H_2}(x,y,z_3)}{t_{f,a}} \right] \quad (3.37)$$

3.3. Referencias

- [1] S. Dutta, S. Shimpalee, and J. W. Van Zee, "Numerical Prediction of Mass-Exchange Between Cathode And Anode Channels In A PEM Fuel Cell," *Intl. J. of Heat and Mass Transfer*, 44 (2001), 2029-2042.
- [2] S. Shimpalee, W. K. Lee, J. W. Van Zee, and H. Naseri-Neshat, "Advances In Computational Fluid Dynamics Modeling For PEM Fuel Cells," *Proceedings of 36th Intersociety Energy Conversion Engineering Conference in Savannah, GA, IECEC2001-ET-10* (2001) 959-965.
- [3] S. Shimpalee, "Numerical Prediction Of Gas-Humidification Effects On Energy Transfer In PEM Fuel Cell," Ph.D. dissertation, Dept. of Mechanical Engineering, University of South Carolina, Columbia, SC (2001).
- [4] S. Shimpalee and S. Dutta, "Numerical Prediction Of Temperature Distribution In PEM Fuel Cells," *Numerical Heat Transfer, Part A*, 38 (2000), 111-128.
- [5] S. Shimpalee, S. Dutta, and J. W. Van Zee, "Numerical Prediction Of Local Temperature And Current Density In A PEM Fuel Cell," *Proc. Of ASME IMECE, Orlando, FL. HTD 366-1* (2000) 1-12.
- [6] S. Um and C. Y. Wang, "Three-Dimensional Analysis Of Transport And Reaction In Proton Exchange Membrane Fuel Cells," *Proc. of ASME IMECE, Orlando, FL., HTD 366-1* (2000), 19.
- [7] T. Zhou and H. Liu, "3-D Model Of Proton Exchange Membrane Fuel Cells," *Proc. of ASME IMECE, Orlando, FL. HTD 366-1* (2000) 43 -49.
- [8] T. Berning, D. M. Lu, and N. Djilali, "Three-Dimensional Computational Analysis Of Transport Phenomena In A PEM Fuel Cell," *J. Power Sources*, 106 (2002) 284-294.
- [9] S. Um, C. Y. Wang, and K. S. Chen, "Computational Fluid Dynamics Of Proton Exchange Membrane Fuel Cells," *J. of Electrochemical Soc.*, 147 (2000), 4485-4493.
- [10] Yi, J. and Nguyen, Y., "Multicomponent Transport In Porous Electrodes Of Proton Exchange Membrane Fuel Cells Using The Interdigitated Gas Distributors," *J. of Electrochemical Soc.*, 146 (1999) 38-45.
- [11] T.V. Nguyen, "Modeling Two-Phase Flow in the Porous Electrodes of Proton Exchange Fuel Cells Using Interdigitated Flow Fields," *Proceedings of the Tutorial in Electrochemical Engineering and Mathematical Modeling*, The Electrochemical Society, Pennington, NJ, PV-99-14 (1999) 222-232.

- [12] Z. H. Wang, C. Y. Wang, and K. S. Chen, "Two-Phase Flow And Transport In The Air Cathode Of Proton Exchange Membrane Fuel Cells," *J. of Power Sources*, 94 (2001), 40-50.
- [13] W. K. Lee, J.W. Van Zee, S. Shimpalee, and S. Dutta, "Effect of Humidity on PEM Fuel Cell Performance Part I: Experiments," *Proceedings of ASME IMECE*, Nashville, TN., HTD 364-1, (1999) 359-366.
- [14] S. Shimpalee, S. Dutta, W. K. Lee, and J. W. Van Zee, "Effect Of Humidity On PEM Fuel Cell Performance Part II: Numerical Simulation," *Proc. of ASME IMECE*, Nashville, TN., HTD 364-1 (1999), 367-374.
- [15] W-k. Lee, S. Shimpalee, and J. W. Van Zee, "Verifying Predictions of Water and Current Distributions in a Serpentine Flow-Field PEMFC," *J. of the Electrochemical Society*, 150, (3), A341-A348 (2003).
- [16] S. Shimpalee, S. Greenway, D. Spuckler, and J. W. Van Zee, "Predicting Water and Current Distributions of a Commercial Size PEMFC." *J. of Power Source*, 135, 79 – 87, 2004.
- [17] R. Bird, W. Stewart, and E. Lightfoot, *Transport Phenomena*, John Wiley & Sons, New York, NY (1960).
- [18] S. Dutta, S. Shimpalee, and J. W. Van Zee, "Three-Dimensional Numerical Simulation Of Straight Channel PEM Fuel Cells," *J. of Applied Electrochemistry*, 30 (2000), 135-146.
- [19] T. Springer, T. Zawodzinski, and S. Gottesfeld, "Polymer Electrolyte Fuel Cell Model," *J of Electrochemical Society*, 138 (1991), 2334-2342.
- [20] S. Shimpalee, W-k. Lee, J. W. Van Zee, and H. Naseri-Neshat, "Predicting the Transient Response of a Serpentine Flow-field PEMFC. I: Excess to Normal Fuel and Air", *J. of Power Sources*, 156, 355-368, 2006.
- [21] S. Shimpalee, W-k. Lee, J. W. Van Zee, and H. Naseri-Neshat, "Predicting the Transient Response of a Serpentine Flow-field PEMFC. II: Normal to Minimal Fuel and Air", *J. of Power Sources*, 156, 369-374, 2006.
- [22] S. Shimpalee, D. Spuckler, J. W. Van Zee, "Prediction of transient response for a 25-cm² PEM fuel cell", *J. of Power Sources*, 167/1, 130-138, 2007.
- [23] S. Shimpalee, S. Greenway, and J. W. Van Zee, "The Impact of Channel Path Length on PEMFC Flow-field Design", *J. of Power Sources*, 160, 398-406, 2006.
- [24] S. Shimpalee and J. W. Van Zee, "Numerical study on rib/channel dimension of flow-field on PEMFC performance", *Int. J. of Hydrogen Energy*, 32/7, 842-856, 2007.

- [25] S. Shimpalee, U. Beuscher, and J. W. Van Zee, "Investigation of Gas Diffusion Media inside PEMFC Using CFD Modeling", *J. of Power Sources*, 163, 480-489, 2006.
- [26] S. Shimpalee, U. Beuscher, J. W. Van Zee, "Analysis of GDL flooding effects on PEMFC performance", *Electrochemical Acta*, 52/24, 6748-6754, 2007.
- [27] D-h. Jeon, S. Greenway, S. Shimpalee, and J. W. Van Zee, "The effect of serpentine flow-field designs on PEM fuel cells performance", *Intl. J. of Hydrogen Energy*, 33, 1052-1066, 2008.
- [28] Star-CD 3.2 Methodology, CD Adapco Group, <http://www.adapco.com>.
- [29] ES-PEMFC Methodology and Tutorial Manual, CD adapco Group, <http://www.adapco.com>.

A decorative graphic on the right side of the page. It features three blue circles of varying sizes, each composed of concentric circles with a gradient from dark blue to light blue. Two thin blue lines intersect at the top left, forming a large 'V' shape that frames the circles. The circles are positioned at the top, middle, and bottom right of the page.

Capítulo 4

Optimización del proceso de simulación numérica de prototipos de PEMFC

Índice

CAPÍTULO 4: Optimización del proceso de simulación numérica de prototipos de PEMFC	75
4.1. Introducción.....	75
4.1.1. Antecedentes.....	76
4.2. Simulación numérica	77
4.2.1. Preprocesado.....	78
4.2.2. Cálculo.....	85
4.2.3. Postprocesado.	85
4.3. Protocolo de simulación numérica de modelos de PEMFC.....	85
4.3.1. Planteamiento inicial	85
4.3.2. Optimización del procedimiento	88
4.4. Conclusiones	92
4.5. Ejemplos de aplicación del protocolo.....	93
4.5.1. Monocelda con canal doble de tipo serpiente	93
4.5.2. Monocelda comercial Heliocentris	98
4.6. Referencias	102

CAPÍTULO 4: Optimización del proceso de simulación numérica de prototipos de PEMFC

4.1. Introducción

El estudio teórico de la dinámica de fluidos se desarrolló a lo largo de los siglos XVIII y XIX. Su gran dificultad y la imposibilidad de obtener en ocasiones soluciones analíticas a las ecuaciones planteadas, ha impulsado hasta nuestros días la experimentación como metodología principal para abordar los problemas de dinámica de fluidos, ya fuera a escala real o en prototipos reducidos.

Sin embargo, la aparición de ordenadores capaces de trabajar con gran cantidad de datos y el desarrollo de métodos algorítmicos precisos permitió la aparición de la Dinámica de Fluidos Computacional, que revolucionó la manera en la que se estudia hoy la dinámica de fluidos. No obstante, aún siendo la CFD un complemento muy útil para el estudio de problemas de dinámica de fluidos, nunca podrá reemplazar al estudio teórico y experimental [1]. De hecho, los resultados obtenidos a través de este sistema son sólo una predicción que deberá ser siempre comprobada mediante la observación directa.

Las ventajas de utilizar técnicas de CFD son evidentes. Por una parte, aunque los resultados obtenidos a partir de un estudio computacional de fluidos son análogos a los que podemos obtener de modo experimental, la fabricación de prototipos para la experimentación puede resultar excesivamente costosa. Además, mientras que en un experimento las mediciones se limitan a unos puntos e instantes de tiempo determinados, en una simulación se pueden tomar medidas de cualquiera de los parámetros analizados prácticamente en cualquier coordenada y cualquier instante.

Por otra parte, los plazos en todo proyecto de investigación son un factor importante que siempre se intenta minimizar. Un claro ejemplo de ello son las empresas que se dedican a la Fórmula 1. El uso de CFD les permite realizar en poco tiempo muchas simulaciones con pequeñas variaciones sobre una misma geometría hasta llegar a una solución optimizada antes de fabricarla y testarla en un túnel de viento o en la pista, consiguiendo reducir ampliamente los plazos de desarrollo. En este sentido, la escudería de Fórmula 1 *Renault F1-team* compró en el año 2009 un supercomputador capaz de realizar 38 billones de operaciones por segundo: el Xtreme-X Supercomputer. Según datos de Renault su coste es un 50% inferior al de un túnel de viento real, cifra que puede rondar los 20 millones de euros, por lo que nada más arrancarlo ya genera un 50% de las ganancias de una instalación madura [2].

4.1.1. Antecedentes

Como se indicó en el Capítulo 3, para el modelado de las complejidades físicas asociadas a las pilas de combustible de tipo PEM es necesaria la resolución de un modelo matemático avanzado que considere simultáneamente las ecuaciones de conservación de la masa, conservación de la cantidad de movimiento, conservación de la energía (ecuaciones de Navier-Stokes) y conservación de especies teniendo en cuenta los efectos de las reacciones electroquímicas que se suceden en el interior de la pila.

Dada la imposibilidad de obtener una solución analítica a dicho conjunto de ecuaciones debido a su complejidad, se ha de recurrir a la mecánica de fluidos computacional que, utilizando métodos numéricos y algoritmos computacionales, permite obtener la solución más aproximada posible a la solución real del problema mediante la simulación numérica.

Para el desarrollo de este proyecto de tesis se ha utilizado el software de fluidodinámica computacional STAR-CD (versión 3.26) de la empresa CD-Adapco [3, 4], que incluye el módulo **es-pemfc** (Expert System PEM Fuel Cell, versión 2.2), desarrollado por un equipo de investigadores de la Universidad de Carolina del Sur en Estados Unidos [5].

Al igual que la mayoría de los programas de fluidodinámica computacional actuales, STAR-CD utiliza el Método de Volúmenes Finitos (MVF) para la resolución de las ecuaciones diferenciales definidas en el modelo matemático aplicadas al volumen de control.

El Método de Volúmenes Finitos es un procedimiento para la representación y la evaluación de las ecuaciones diferenciales parciales en forma de ecuaciones algebraicas. Como con el Método de Diferencias Finitas (MDF) o el Método de Elementos Finitos (MEF), los valores se calculan en lugares discretos en una geometría de malla [6].

Este método numérico se basa en dividir la geometría del volumen de control en pequeños elementos (volúmenes finitos) en los cuales se resuelven las ecuaciones diferenciales correspondientes en forma discreta. La resolución de estas ecuaciones se realiza de forma iterativa hasta que se alcanza convergencia en la solución.

El MVF transforma el problema definido en términos de ecuaciones diferenciales en un problema en forma matricial. La solución obtenida mediante el MVF es sólo aproximada, ya que la solución exacta sólo se calcula en un número finito de puntos llamados nodos, calculándose para el resto de puntos del volumen de control una solución mediante interpolación a partir de los resultados obtenidos para los nodos.

El conjunto de nodos forma una red denominada malla y está formada por retículos de diferentes formas. Cada uno de los retículos o celdas contenidos en dicha malla es un "volumen finito".

En general el MVF tal como se usa actualmente presenta algunas limitaciones:

- El MVF calcula soluciones numéricas concretas y adaptadas a unos datos particulares de entrada. No puede hacerse un análisis de sensibilidad sencillo que permita conocer como variará la solución si alguno de los parámetros se altera ligeramente. Es decir, proporciona sólo respuestas numéricas cuantitativas concretas, no relaciones cualitativas generales. Además, los resultados obtenidos mediante el software son aproximaciones cuya precisión dependerá del número de elementos utilizados.
- En el MVF la mayoría de aplicaciones prácticas requiere mucho tiempo para ajustar detalles de la geometría, existiendo frecuentemente problemas de mal condicionamiento de las mallas, desigual grado de convergencia de la solución aproximada hacia la solución exacta en diferentes puntos, etc. En general una simulación requiere el uso de numerosas pruebas y ensayos con geometrías simplificadas o casos menos generales que el que finalmente pretende simularse antes de empezar a lograr resultados satisfactorios. Esto puede generar un alto coste computacional y de tiempo por parte del usuario.

Con el fin de reducir tan alto coste, resulta imprescindible una buena planificación y optimización de todo el proceso de simulación. El objetivo de este Capítulo es la elaboración de un procedimiento para la simulación numérica de prototipos de pila de combustible de tipo PEM mediante el software STAR-CD, estableciendo así una metodología de trabajo que permita el estudio sistemático de la influencia de las distintas variables de operación en el rendimiento de la pila, reduciendo al máximo los tiempos del proceso pero sin disminuir la precisión del cálculo.

4.2. Simulación numérica

El procedimiento para el desarrollo de una simulación numérica consta de tres fases principales: Preprocesado, Cálculo y Postprocesado (Figura 4-1). En la primera fase se pueden encontrar algunas de las etapas más importantes para el buen desarrollo del análisis computacional: diseño, mallado, asignación de propiedades y establecimiento de las condiciones de contorno. La segunda fase se corresponde con el cálculo iterativo hasta conseguir una solución válida según el criterio de convergencia deseado. La tercera fase consta de dos etapas: presentación de los resultados obtenidos y el análisis de los mismos. Con las conclusiones extraídas a partir de este análisis se podrán tomar las decisiones más correctas para la optimización del diseño del sistema objeto de la simulación.

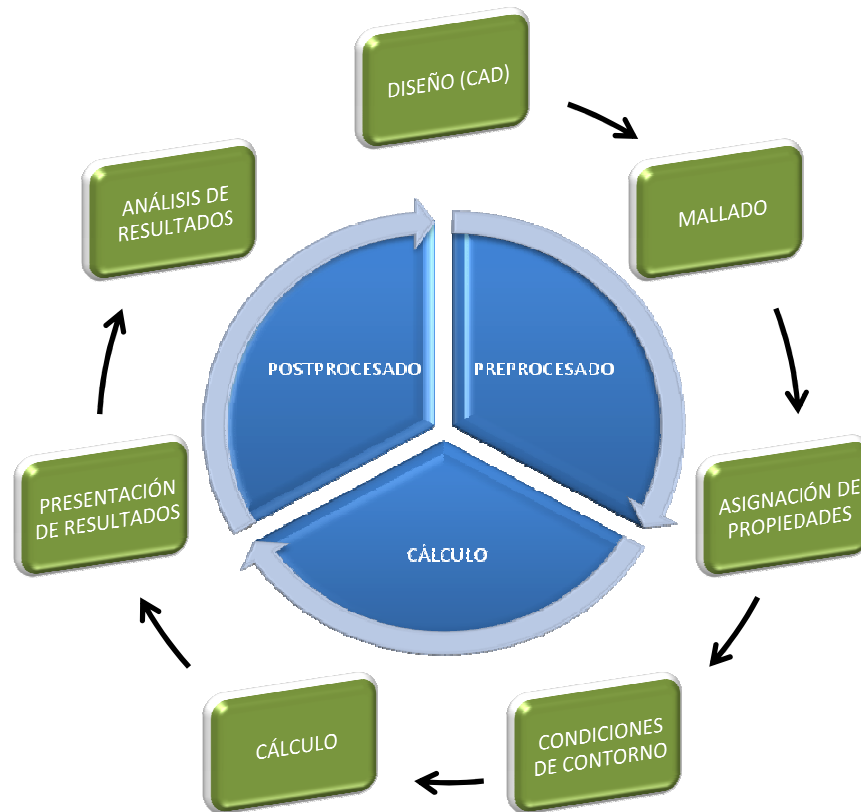


Figura 4-1. Fases y etapas para el desarrollo de una simulación numérica

4.2.1. Preprocesado

Consiste básicamente en la preparación del problema para poder realizar la simulación numérica mediante el cálculo iterativo y la obtención de resultados. Esta fase del proceso consta a su vez de cuatro etapas diferentes:

1. Definición de geometría del volumen de control
2. Generación de la malla tridimensional (discretización)
3. Asignación de propiedades a los materiales
4. Establecimiento de las condiciones de contorno

4.2.1.1. Definición de geometría del volumen de control

La definición geométrica del volumen de control se puede efectuar mediante un software de CAD (Acrónimo en inglés de *Computer Aided Design*; Diseño Asistido por Ordenador) para posteriormente ser importada y procesada por el software de CFD. Aunque STAR-CD incluye su

propia herramienta de CAD (STAR-Design), en este proyecto de tesis se han utilizado Solid Edge v19 y Solid Edge ST como herramientas de CAD por sus múltiples ventajas frente al anterior.

4.2.1.2. Generación de la malla tridimensional

La generación de la malla tridimensional puede ser la etapa más complicada y costosa de todo el preprocesado. Dado que el volumen de control objeto de la simulación se subdivide en pequeños volúmenes finitos, en los que se deben satisfacer las ecuaciones que rigen el fenómeno, las características y el número de estos volúmenes finitos influye considerablemente en el proceso de la resolución numérica. Una malla inadecuada puede condicionar todo el proceso de simulación, elevando los costes de computación, e incluso provocar la no convergencia de la solución en la etapa del cálculo. Por tanto, es fundamental obtener mallas de buena calidad que permitan conseguir la máxima precisión de los resultados con el menor tamaño de modelo y el menor tiempo de computación posible. Aunque existen diferentes herramientas independientes para la generación del mallado tridimensional, en este proyecto de tesis se han utilizado las herramientas propias de STAR-CD y **es-pemfc**.

STAR-CD ofrece la posibilidad de generar mallados tridimensionales utilizando diferentes tipologías de elementos (volúmenes finitos), de modo que se pueda adaptar a cualquier contorno. La Figura 4-2 muestra algunos de los tipos de celdas que maneja este software.

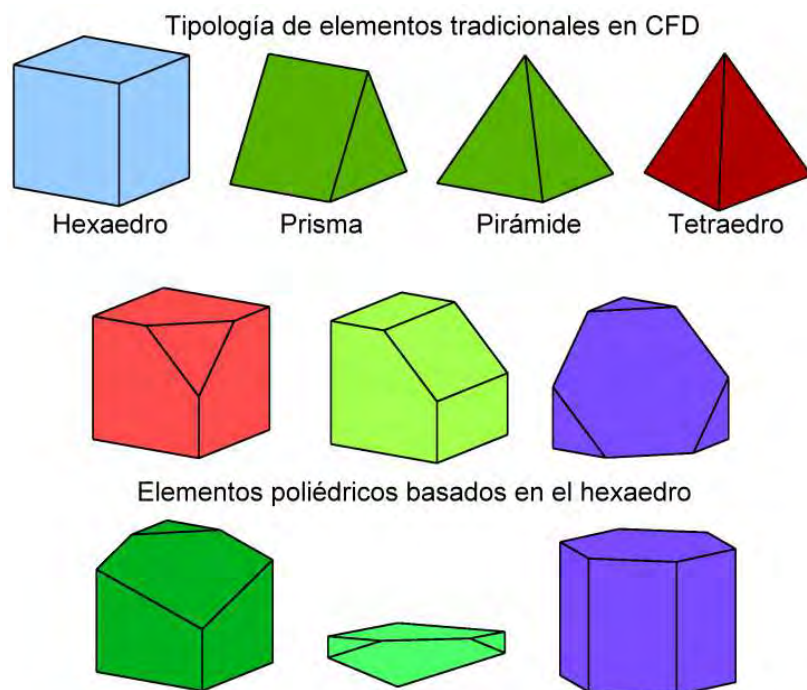


Figura 4-2. Tipología de elementos utilizados en STAR-CD

Durante el cálculo, STAR-CD aplica las ecuaciones del modelo matemático y calcula cada magnitud física en todos los nodos definidos en la malla. Después, asigna al centro de gravedad de cada volumen finito los valores para cada magnitud calculada que se obtienen por interpolación de los resultados de los nodos de cada elemento (Figura 4-3). Por lo tanto, la característica principal que diferencia a los distintos elementos es el número de nodos con el que se resuelven las ecuaciones dentro de su volumen finito de control. A mayor número de nodos por elemento, más precisa será su resolución interna. Así, dado que un elemento con forma tetraédrica tiene 4 nodos, uno piramidal tiene 5, un prisma tiene 6 y un hexaedro tiene 8 nodos, es evidente que un mallado compuesto por poliedros hexaédricos proporcionará una solución más precisa que uno compuesto por tetraedros (Figura 4-4).

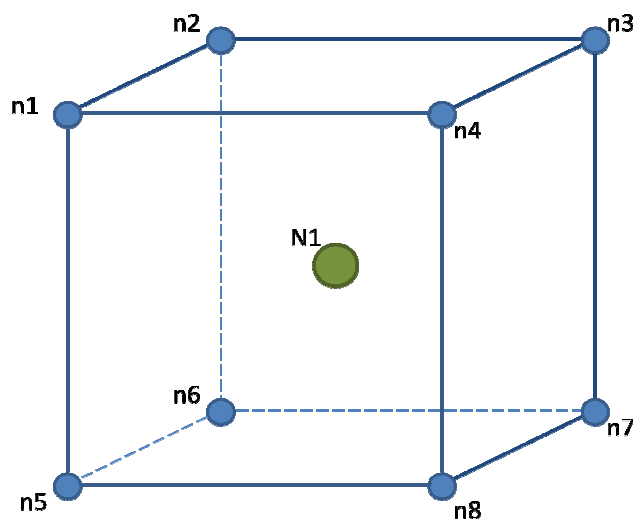


Figura 4-3. Los valores para cada magnitud calculada asignados al centro de gravedad de cada elemento N1, se obtienen por interpolación de los resultados de los nodos de dicho elemento (n1-n8)

Por el contrario, son los algoritmos de creación de elementos con forma de tetraedro los que mejor se ajustan en los procesos de generación de mallados de forma automática, reduciéndose considerablemente el tiempo invertido en esta etapa, mientras que los mallados con elementos hexaédricos se deben generar de forma manual o semiautomática (Figura 4-4). Además, son los elementos con forma de tetraedro los que mejor se adaptan a cualquier contorno que tenga el volumen de control.

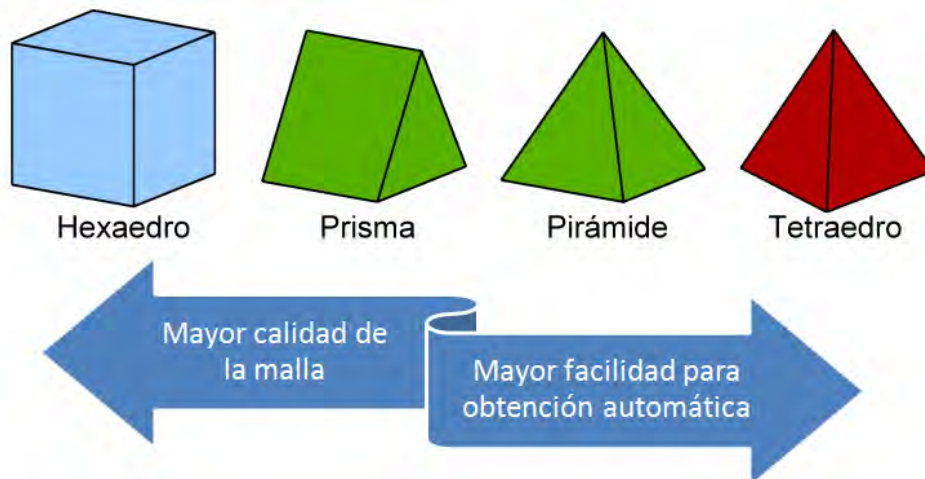


Figura 4-4. Calidad de la malla y facilidad para su generación automática según la forma del elemento utilizado

Así la alternativa óptima de mallado será aquella solución de compromiso que combine elementos en su mayoría hexaédricos junto con otros elementos que permitan ajustar la malla al contorno del volumen de control, y que el número de dichos elementos sea suficiente para obtener una solución con la precisión requerida sin que el tiempo de computación sea excesivo.

STAR-CD incluye una herramienta para generar un mallado de manera semiautomática (*pro-STAR AutoMesh module, pro-am*) mediante la cual se pueden generar diferentes tipos de mallas en las que además se puede construir un mallado superficial para la simulación de la capa límite en el comportamiento fluido. El procedimiento, descrito en la Figura 4-5, comienza con la importación de la superficie geométrica desde un sistema CAD a través del formato de archivo estándar de prototipado rápido: **STL** (*StereoLithography*; Archivo de estereolitografía), que utiliza una malla de pequeños triángulos sobre las superficies para definir la forma del objeto. El segundo paso es la creación de una subsuperficie que será el resultado de sustraer a la superficie inicial el espesor en el que se desee definir la capa límite. El tercer paso es la generación de la malla en el interior de la subsuperficie. Esta malla puede estar compuesta por elementos hexaédricos que se recortarán al contacto con la subsuperficie (malla trimada), por elementos tetraédricos (malla tetraédrica) o por elementos hexaédricos en el interior y tetraédricos en el ajuste con el contorno de la subsuperficie (malla híbrida). El cuarto paso consiste en crear una malla para la capa límite mediante la extrusión de las figuras poligonales planas contenidas en la subsuperficie, pudiendo determinar el número de capas de elementos que contendrá dicha capa límite. El quinto y último paso es el ensamblaje de ambas mallas. La Figura 4-6 presenta el resultado de los diferentes tipos de mallas que se pueden generar con *pro-STAR AutoMesh*.

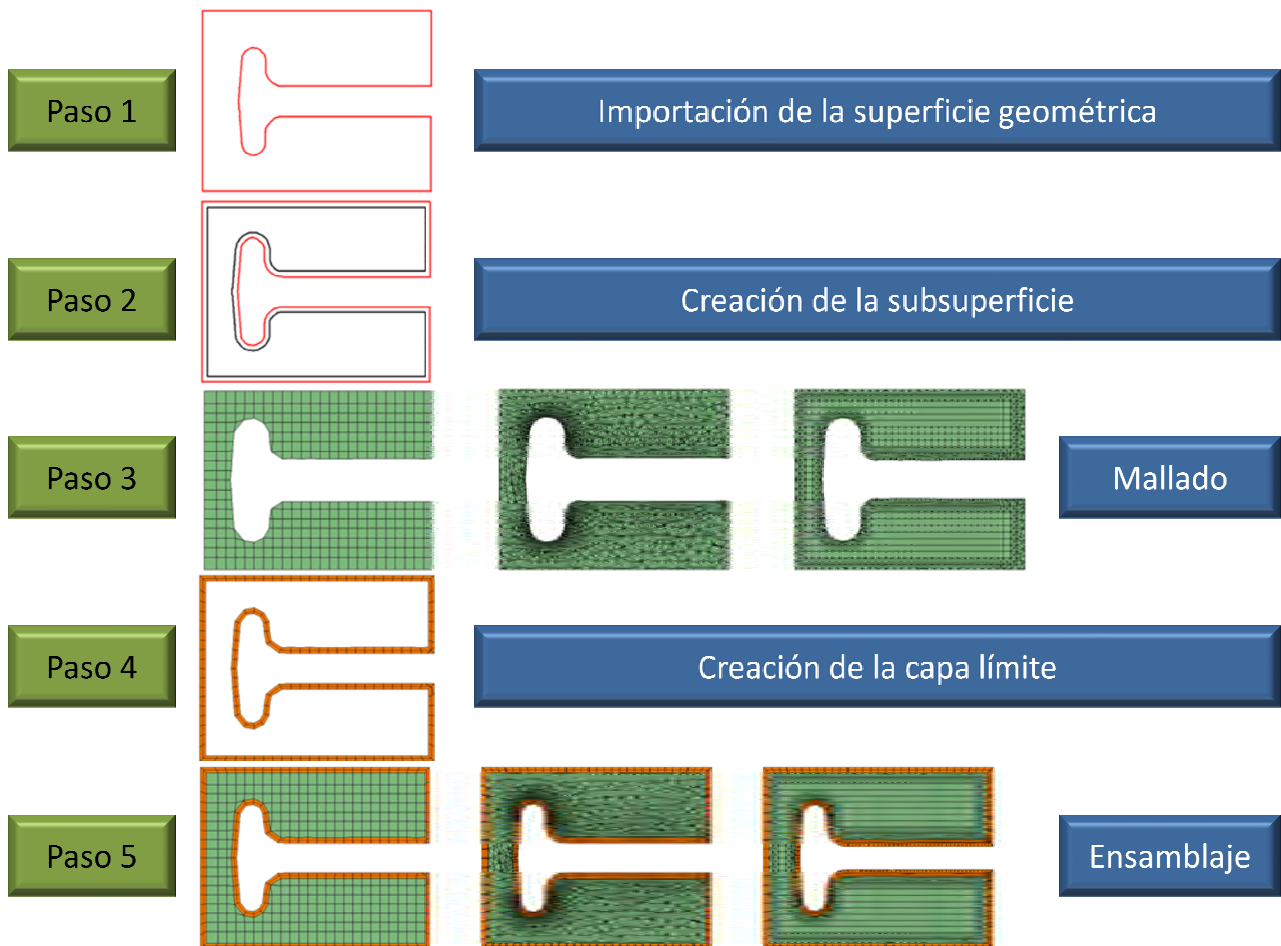


Figura 4-5. Procedimiento para la generación semiautomática del mallado mediante pro-STAR AutoMesh module, **pro-am**

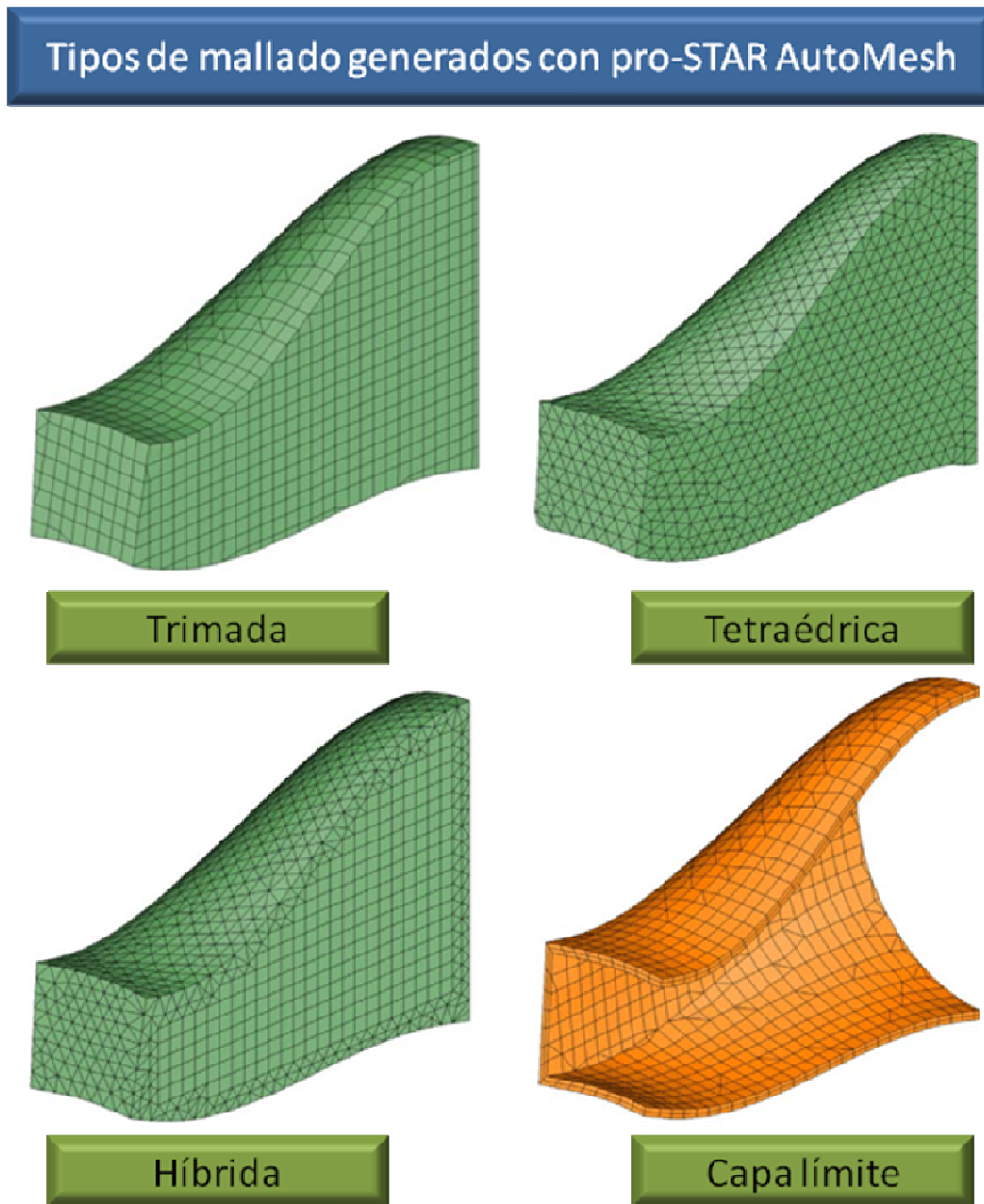


Figura 4-6. Resultado de los diferentes tipos de mallado posibles con pro-STAR AutoMesh module, **pro-am**

Para el mallado con tetraedros STAR-CD utiliza el algoritmo de la Triangulación de Delaunay, dando como resultado una red de triángulos que cumple la propia condición de Delaunay. Esta condición dice que la circunferencia circunscrita de cada triángulo de la red no debe contener ningún vértice de otro triángulo. Así, la triangulación de Delaunay maximiza los ángulos interiores de los triángulos generados, reduciéndose los errores de redondeo al mínimo [7]. Aunque es la forma más rápida de generar un mallado, no es el preferido por los usuarios de

CFD por su falta de precisión en el cálculo y porque el número de celdas necesarias para una correcta precisión es elevado, lo que dispara el tiempo de computación.

Consideraciones generales para un mallado óptimo

Algunas de las propiedades asociadas a la calidad de una malla se detallan a continuación:

- **Densidad.** Indica el número de elementos de la malla. En general, una mayor densidad permite una mayor precisión en el cálculo aunque el tiempo de computación y de postprocesado también son muy superiores.
- **Distribución de nodos.** La densidad de la malla se debe aumentar en aquellas zonas en las que los gradientes de las magnitudes a calcular se prevén superiores y reducir en el resto del volumen de control.
- **Suavidad.** Propiedad relacionada con la variación de volumen entre elementos adyacentes. Variaciones muy grandes conllevan grandes errores de truncamiento, definido como la diferencia entre las derivadas parciales en las ecuaciones de flujo y sus aproximaciones discretas.
- **Esquinamiento.** Se define como la diferencia entre la forma de un elemento determinado y la de un elemento hexaédrico del mismo volumen. Elementos muy esquinados reducen la precisión y desestabilizan la solución. Las mallas hexaédricas óptimas son aquellas cuyos ángulos en los vértices se aproximan a 90° , mientras que en las mallas tetraédricas los ángulos deberían aproximarse a 60° siendo todos menores de 90° .
- **Relación de aspecto.** Indica el estiramiento del elemento. En flujos isotrópicos se pueden obtener resultados muy precisos con un número inferior de elementos si éstos presentan una relación de aspecto grande, aunque se recomienda no utilizar relaciones de aspecto superiores a 5 y nunca en zonas donde el flujo sufre cambios. Las mallas hexaédricas permiten relaciones de aspecto superiores que las mallas tetraédricas, en las que una relación de aspecto grande conlleva un mayor esquinamiento que favorezca una no convergencia o una falta de precisión en el cálculo.
- **Alineación.** De forma general, una malla alineada con el flujo a estudiar proporciona mejores resultados incluso con un menor número de elementos. En este sentido, una malla hexaédrica favorece un alineamiento correcto mientras que en una tetraédrica el alineamiento es prácticamente imposible.

4.2.1.3. Asignación de propiedades a los materiales

En la simulación del funcionamiento de una PEMFC se modela tanto la parte fluida (canales de flujo) como las diferentes partes sólidas que la componen (placas bipolares, capas de difusión y membrana polimérica). Por tanto, además de indicar si es sólido o fluido, es necesario

adjudicar a cada elemento las propiedades que le corresponden: densidad, viscosidad (caso de fluidos), calor específico y conductividad.

4.2.1.4. Establecimiento de las condiciones de contorno

Las condiciones de contorno o frontera, son aquellas que definen el comportamiento del modelo en los límites del volumen de control, necesarias además para poder iniciar el cálculo. En este caso las condiciones de contorno que necesita STAR-CD son datos relativos a los flujos de entrada y de salida (presión, caudal, temperatura, velocidad, humedad relativa y composición) tanto para la zona anódica como catódica y datos relativos al funcionamiento de la pila (temperatura de operación y valores iniciales de voltaje y densidad de corriente).

4.2.2. Cálculo.

El resultado del preprocesado, en un problema simple no dependiente del tiempo, permite generar un conjunto de n ecuaciones con n incógnitas, que puede ser resuelto con cualquier algoritmo para la resolución de sistemas de ecuaciones lineales. Cuando el problema a tratar es un problema dependiente del tiempo, el cálculo consiste en una sucesión finita de sistemas de n ecuaciones con n incógnitas que deben resolverse uno a continuación de otro, y cuya entrada depende del resultado del paso anterior.

4.2.3. Postprocesado.

El cálculo proporciona valores de cierto conjunto de funciones en los nodos de la malla que define la discretización. En el postprocesado se calculan magnitudes derivadas de los valores obtenidos para los nodos y, en ocasiones, se aplican operaciones de suavizado, interpolación e incluso determinación de errores de aproximación.

4.3. Protocolo de simulación numérica de modelos de PEMFC

4.3.1. Planteamiento inicial

Para la definición del protocolo a seguir para el desarrollo de la simulación de prototipos de PEMFC se ha seguido el esquema general detallado en la Figura 4-7. Tal y como se representa en este esquema, se han considerado dos estrategias diferentes para la generación del mallado dentro de la fase de preprocesado.

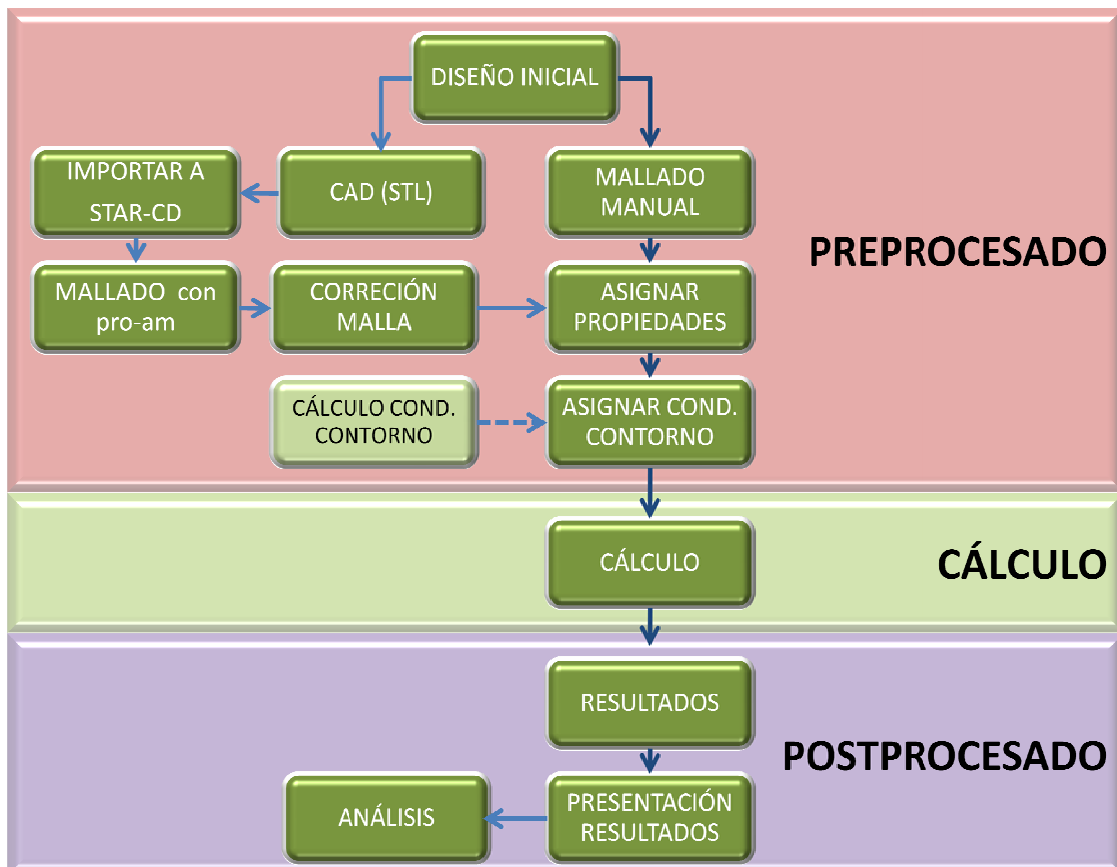


Figura 4-7. Esquema del proceso de simulación numérica

La primera estrategia consiste en la creación de la geometría del volumen de control en un sistema de CAD, para después importar dicha geometría a STAR-CD y generar la malla de manera semiautomática mediante el asistente de la aplicación *pro-STAR AutoMesh*, **pro-am**. Este método es el más apropiado para geometrías complejas, pudiendo resolverse con cualquiera de los tipos de mallado detallados en la Figura 4-6: malla trimada, tetraédrica o híbrida. En las pruebas realizadas, el procedimiento resultó bastante complejo por la aparición de múltiples celdas erróneas que necesitaban de una reparación manual. Por otra parte, la necesidad de asignar diferentes propiedades a los elementos correspondientes a la parte fluida (canales de flujo) y parte sólida (placas, capas de difusión y membrana) obliga a la generación de mallas independientes para cada entorno y su posterior acoplamiento. En la Figura 4-14 se representa una de las geometrías resuelta mediante una malla trimada (color verde) y capa límite (color dorado).

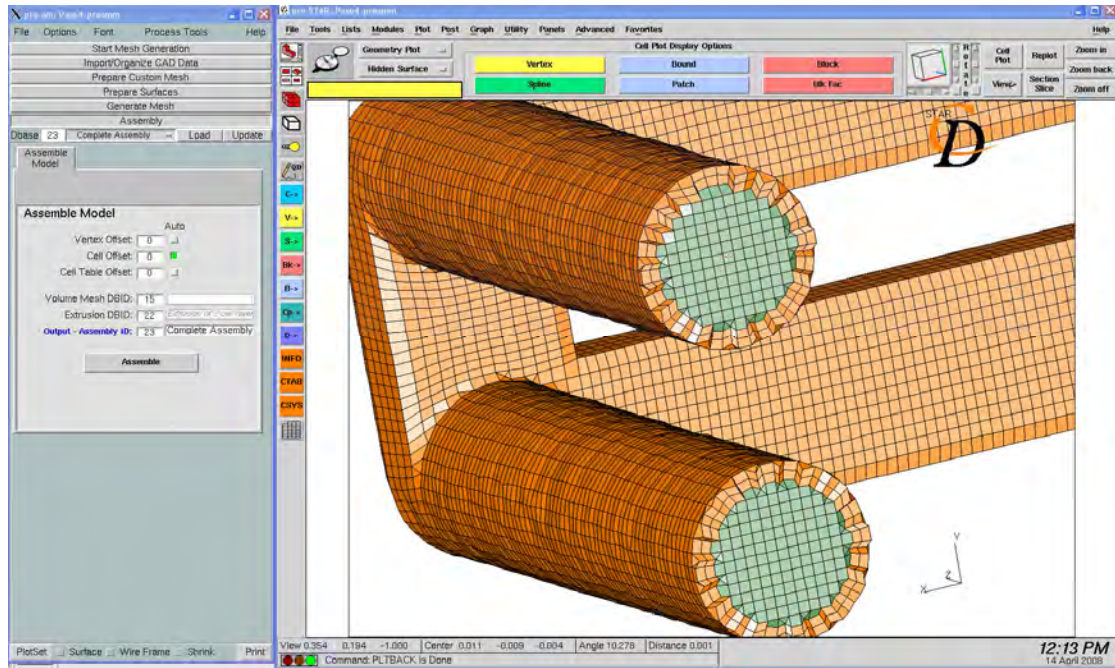


Figura 4-8. Ejemplo de mallado mediante el asistente de la aplicación *pro-STAR AutoMesh*

La segunda estrategia (Figura 4-7) consiste en la creación del mallado de manera manual mediante las herramientas del entorno de STAR-CD. Este método se presenta como el más apropiado para el mallado de volúmenes de control con geometrías sencillas, dando como resultado una malla de alta calidad formada por elementos hexaédricos con una relación de aspecto cercana a la unidad y dispuestos de manera alineada con el flujo principal. Aunque no sea necesario invertir tiempo en la reparación de ninguna celda, el tiempo de generación del mallado puede ser superior al del primer procedimiento.

La asignación de propiedades a los diferentes elementos que componen el mallado se hace de manera manual mediante las herramientas básicas de selección de elementos que se incluyen en STAR-CD. Este proceso también resulta en ocasiones demasiado extenso.

El módulo **es-pemfc** incluido en STAR-CD permite el cálculo de las condiciones de contorno mediante un panel presente en el asistente para el proceso de simulación. Sin embargo, hay que destacar la falta de flexibilidad de dicho asistente para extraer y tratar los diferentes datos con los que trabaja.

Así mismo, en la fase de postprocesado, la presentación de resultados es un tedioso proceso cuya duración es directamente proporcional al número de celdas que contenga el modelo estudiado.

En previsión de que el número de prototipos a simular pueda ser elevado, resulta necesaria la consideración de optimizar en la medida de lo posible todos estos procesos.

4.3.2. Optimización del procedimiento

Considerando, de una parte, que la geometría de los modelos a simular es de una complejidad menor y, por otra, las ventajas de generar un mallado con elementos hexaédricos alineados con el flujo principal, se ha optado por una optimización del proceso de mallado manual.

En general, la geometría de una monocelda de pila de combustible de tipo PEM se presta perfectamente para un mallado a partir de la extrusión de una malla bidimensional que se sitúe en un plano paralelo al que contiene la membrana. La estrategia de mallado se basa en el uso de bloques estructurados, lo que permite descomponer el problema en partes más manejables. Preferentemente se descomponen las diferentes zonas en áreas con forma cuadrada o rectangular, que se ajusten a una matriz de elementos cuadrangulares. Para las zonas curvas del volumen de control se divide el área circular en cinco áreas menores (malla tipo mariposa), tal y como se muestra en la Figura 4-9. Aunque en esta malla aparecen cuatro zonas con irregularidades coincidiendo con las diagonales, estas deficiencias no son demasiado graves, ya que el ángulo promedio de estos nodos es de 120° , sólo un 33% más del ideal de 90° . Además, el número de elementos utilizados no influye en estas irregularidades, afectando únicamente a la precisión del cálculo.

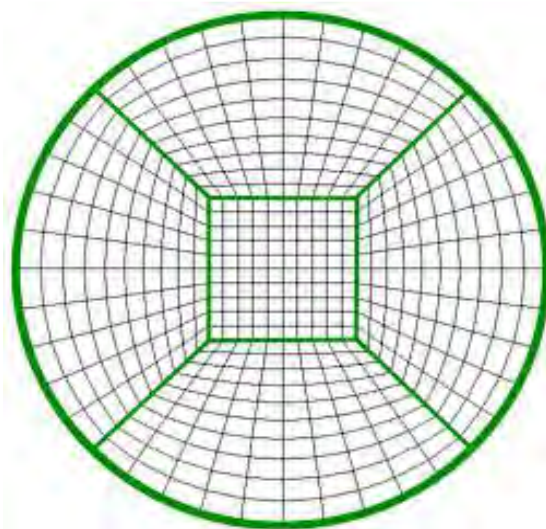


Figura 4-9. Mallado de superficie circular mediante bloques estructurados

Para su optimización, el proceso de mallado se ha dividido en dos fases (Figura 4-10), una manual y otra automática mediante una macro. En la fase manual el área se subdivide en bloques según se ha detallado anteriormente y se crea un archivo con las coordenadas de los vértices de todos los bloques. La fase automatizada se inicia con la carga del archivo de vértices en STAR-CD y consta de cinco etapas: creación de las polilíneas que forman los

perímetros de los bloques, generación de las mallas bidimensionales de los bloques, creación del mallado tridimensional mediante extrusión, normalización del mallado mediante el acoplamiento de las mallas de los diferentes bloques y el refinamiento de la malla en las zonas necesarias.

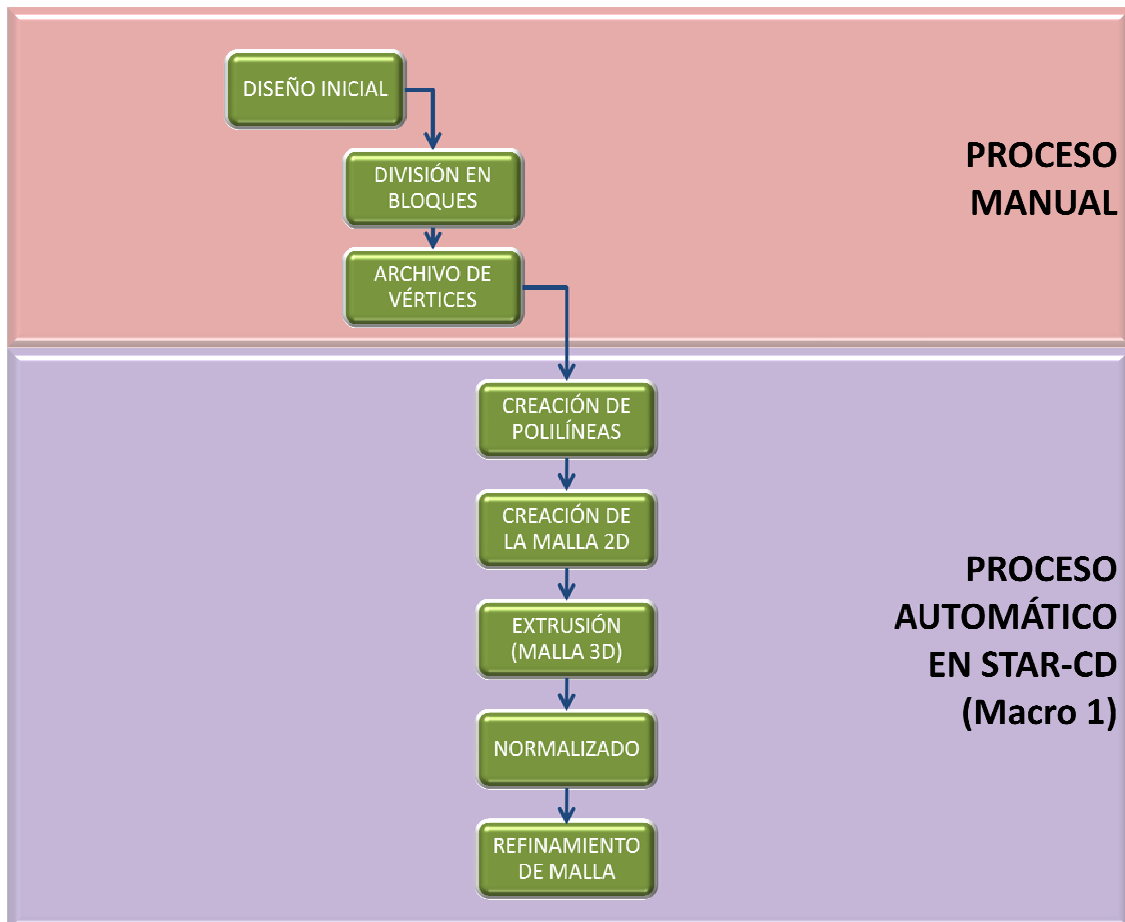


Figura 4-10. Optimización del proceso de mallado

Para el caso del análisis de pilas con placas cuyos canales de flujo sean de tipo serpentin, ya sean de canal simple o múltiple, se ha creado un algoritmo que escribe automáticamente el archivo de vértices necesario para la generación del mallado mediante el proceso anterior.

El proceso de asignación de propiedades a los diferentes elementos que componen la malla también se realiza utilizando una macro desarrollada en el entorno de STAR-CD. Así mismo, el proceso de presentación de resultados tras el cálculo se automatiza mediante otra macro que permite controlar la variable a representar, las escalas de valores, las escalas de colores y la posición de las figuras. Para más comodidad, se han desarrollado paneles de comandos para el

control de las diferentes macros. La Figura 4-11 muestra el panel de comandos que controla la presentación de resultados en la fase de postprocesado.

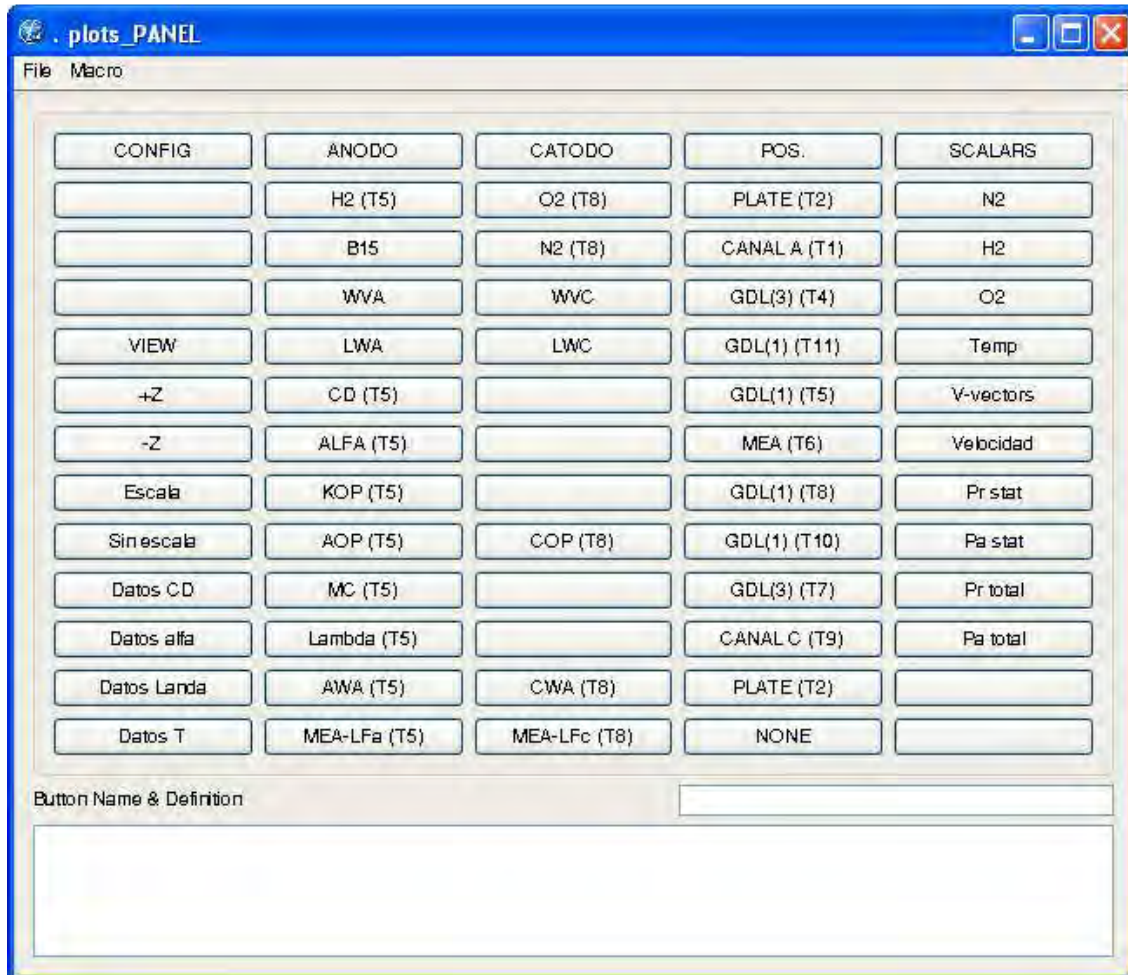


Figura 4-11. Panel de comandos para la presentación de resultados

Para el cálculo de las condiciones de contorno se ha programado una hoja de cálculo con diferentes capacidades en función de los datos disponibles. Así, es posible el cálculo del flujo másico a la entrada del ánodo y cátodo en base a unos índices estequiométricos dados (Figura 4-12) y, por otro lado, es posible fijar los flujos másicos a valores predeterminados y calcular los índices estequiométricos con los que funcionará el sistema (Figura 4-13).

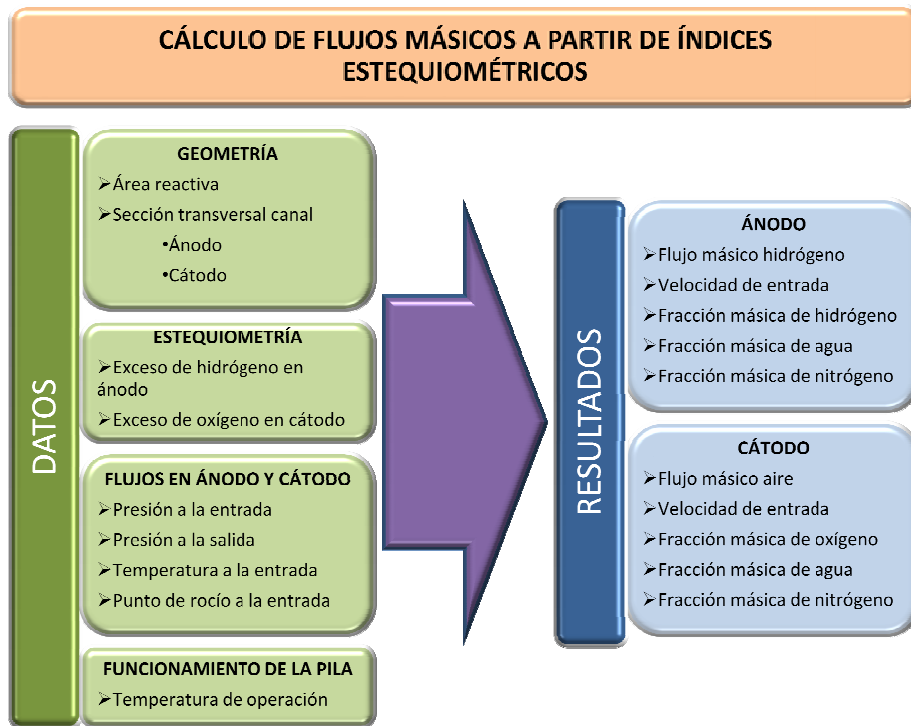


Figura 4-12. Cálculo de flujos máscos a partir de los índices estequiométricos

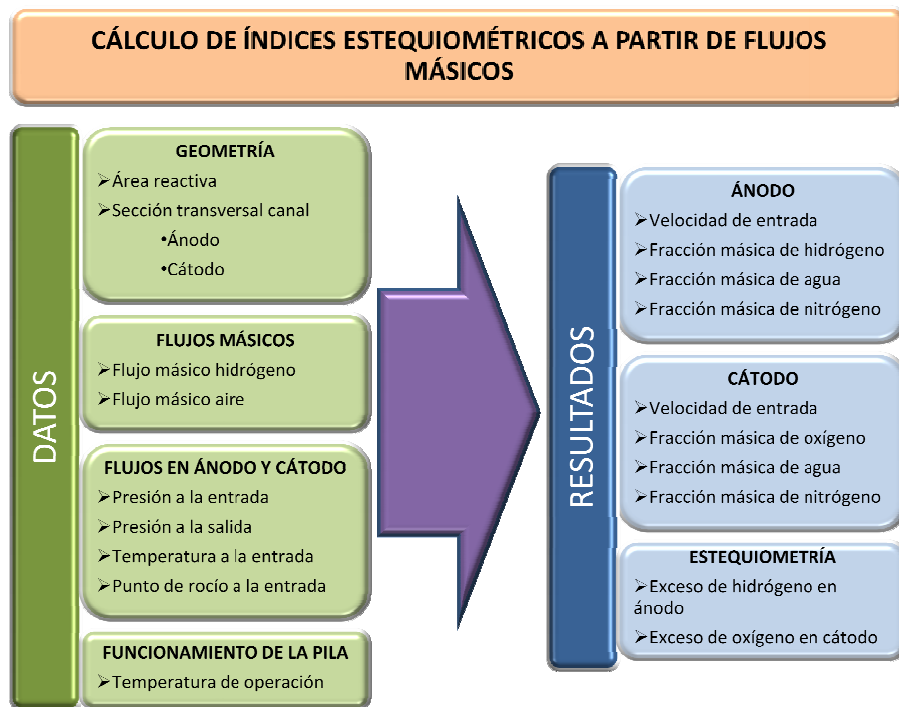


Figura 4-13. Cálculo de índices estequiométricos a partir de los flujos máscos

4.4. Conclusiones

Se ha establecido un protocolo optimizado para la simulación numérica de prototipos de pila de combustible de tipo PEM mediante el software STAR-CD, con el objetivo de reducir al máximo el tiempo invertido en el proceso. En la Figura 4-14 se representa el esquema de simulación optimizado definitivo.

En las pruebas realizadas se han constatado reducciones globales del tiempo de preprocesado y postprocesado por encima del 80% con respecto al proceso manual, e incluso superiores en el caso de geometrías de canales de flujo de tipo serpentín.

Por otra parte, el control en el proceso permite generar en un único proceso el mallado de la monocelda completa con todas las zonas diferenciadas: canal anódico, GDL anódica, membrana, GDL catódica, canal catódico y placas, dando como resultado una malla de gran calidad formada por elementos hexaédricos con una relación de aspecto cercana a la unidad y dispuestos de manera alineada con el flujo principal.

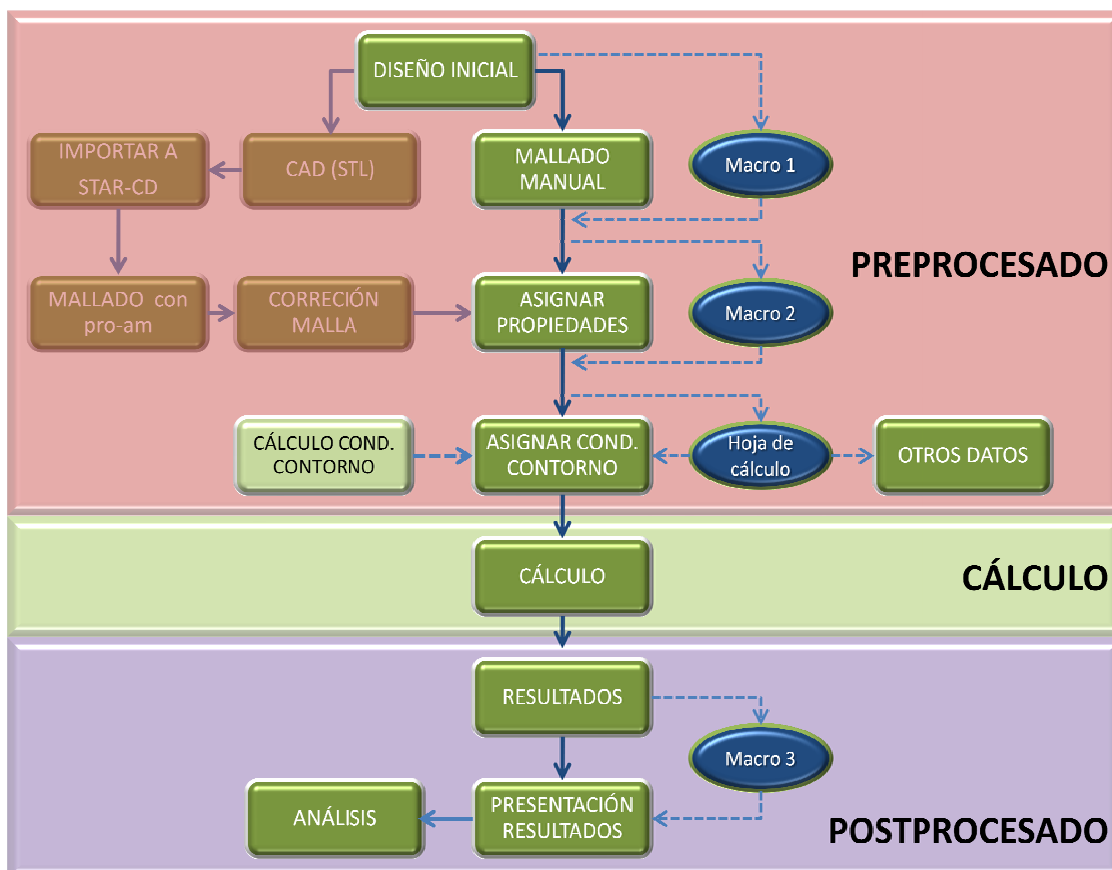


Figura 4-14. Esquema del proceso optimizado de simulación numérica

4.5. Ejemplos de aplicación del protocolo

4.5.1. Monocelda con canal doble de tipo serpentin

En la Figura 4-15 se muestra el diseño de la PEMFC utilizada en este estudio. El área reactiva es de 4.84 cm^2 . El canal de flujo es un serpentin de doble canal con una superficie total de $319,44 \text{ mm}^2$ y un volumen de $159,72 \text{ mm}^3$. La sección transversal del canal es de 1 mm de ancho con una profundidad de 0.5 mm. Ánodo y cátodo presentan la misma geometría.



Figura 4-15. Monocelda con canal doble tipo serpentin

En la Figura 4-16 a), b) y c), se detalla la geometría de una de las placas de la pila y la de los canales de flujo. Se han utilizado un total de 931456 celdas para el mallado y definición de los dominios computacionales necesarios para modelizar la PEMFC completa. En la Figura 4-16 d) y e) se muestran detalles del mallado tridimensional utilizado en los cálculos en STAR-CD.

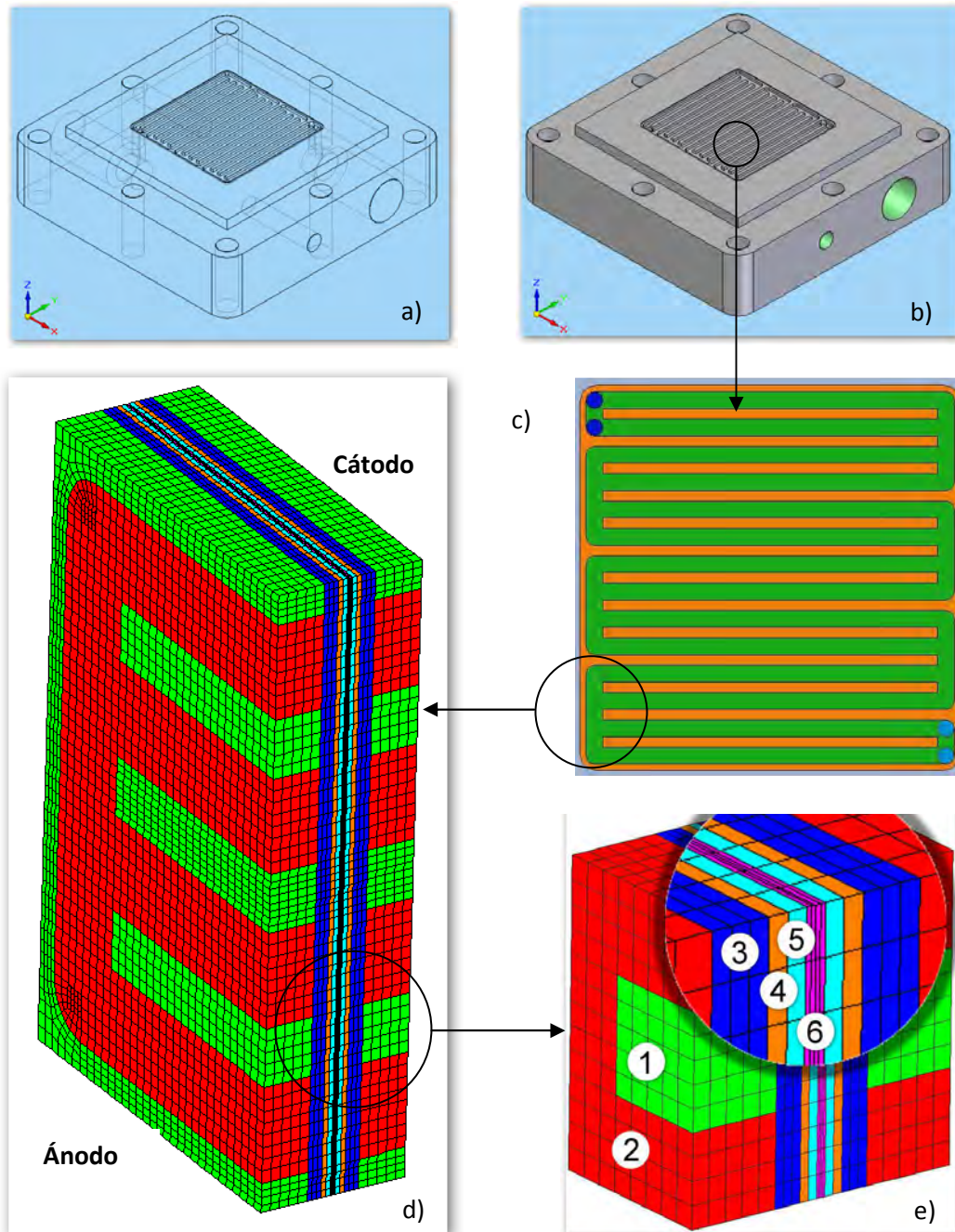


Figura 4-16. a), b): Modelado en CAD de la placa de la PEMFC; c): Detalle de los canales de flujo de la placa utilizada para la distribución de gas (hidrógeno y oxígeno) en la PEMFC; d) Mallado del volumen de control utilizado para los cálculos de CFD; e): Detalle de los componentes del mallado: (1) dominio sólido, (2) canal de flujo anódico y catódico (dominio fluido), (3,4,5) capas de difusión anódica y catódica y (6) membrana.

El proceso de generación del mallado en STAR-CD se detalla en la Figura 4-17. Previamente, la geometría del volumen de control se subdividió en bloques y se generó un archivo con el conjunto de coordenadas 3D (x, y, z) de los vértices característicos. Las etapas para la generación del mallado son: 1) Lectura del archivo de vértices, 2) Generación de polilíneas y mallas bidimensionales, 3) Creación del mallado tridimensional por extrusión, 4) Homogeneización del mallado generando los acoplamientos necesarios, 5) Refinamiento de malla asignando a cada componente un espesor y número de capas determinado (membrana: 0.05 mm/4; GDL: 0.25 mm/5; fluido: 0.5 mm/5) y 6) asignación de propiedades a las celdas.

La Figura 4-18 representa un ejemplo de presentación de resultados. Concretamente la distribución de temperatura en la PEMFC (corte por el plano de simetría de la pila) y los perfiles de temperatura en diferentes secciones transversales del canal.

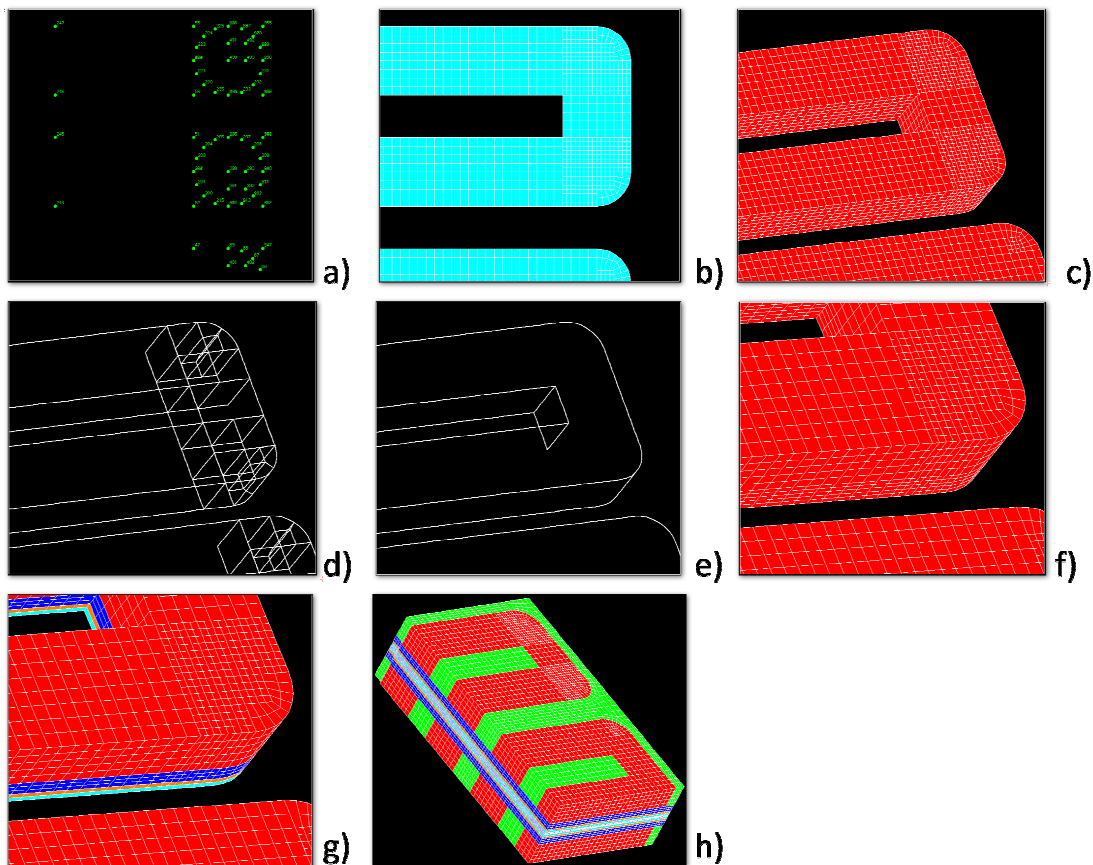


Figura 4-17. Proceso de Mallado de una PEMFC: a) Archivo de vértices; b) Generación de polilíneas y mallas bidimensionales; c) Creación del mallado tridimensional por extrusión; d) y e) Homogeneización del mallado, acoplamientos; f) Refinamiento de malla; g) Asignación de propiedades a las celdas y h) Malla definitiva

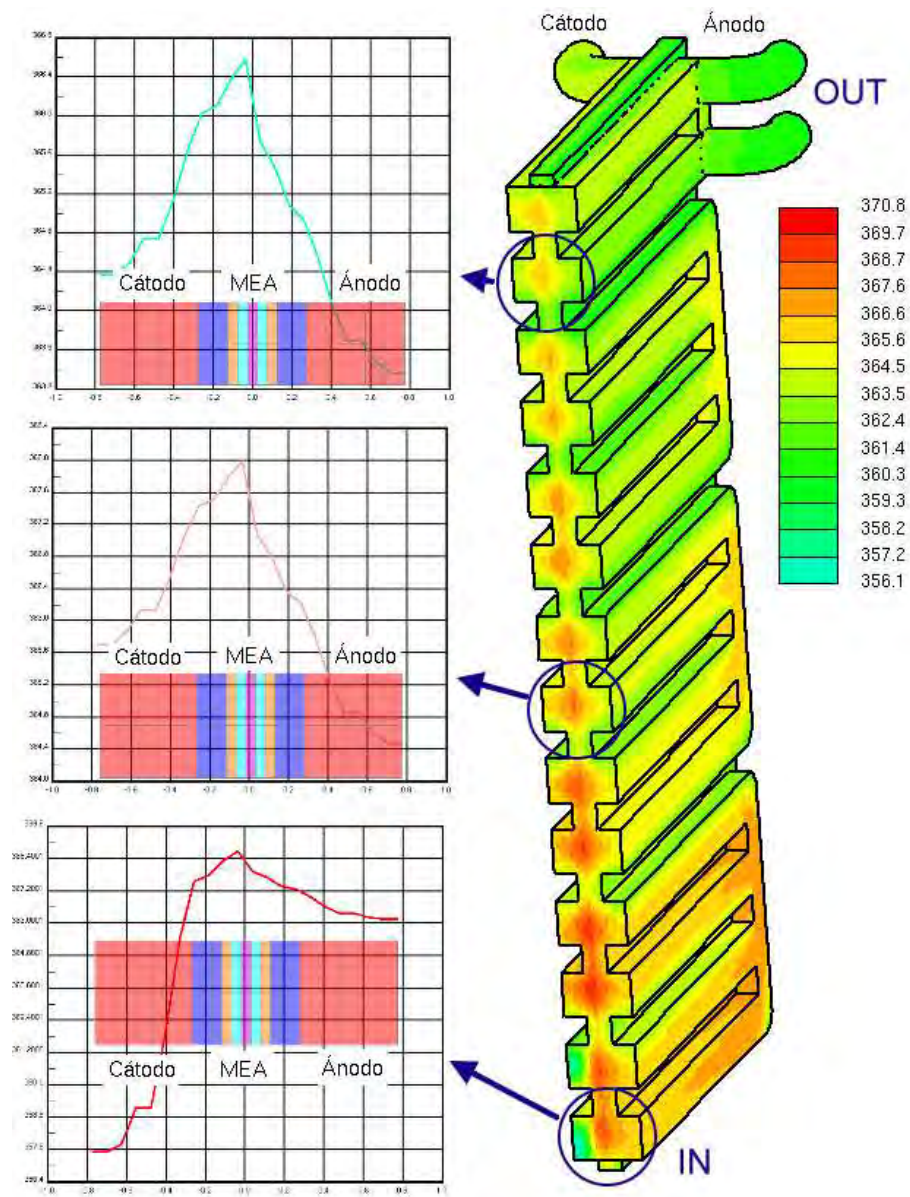


Figura 4-18. Distribución de temperatura en la PEMFC (corte por el plano de simetría de la pila) y perfiles de temperatura en diferentes secciones transversales del canal

En la Figura 4-19 se presentan varios resultados obtenidos en la fase de postprocesado: a) Distribución de temperatura en la membrana, b) Detalle malla, c) Distribución de la densidad de corriente en la membrana y d) Distribución de velocidades en el canal catódico.

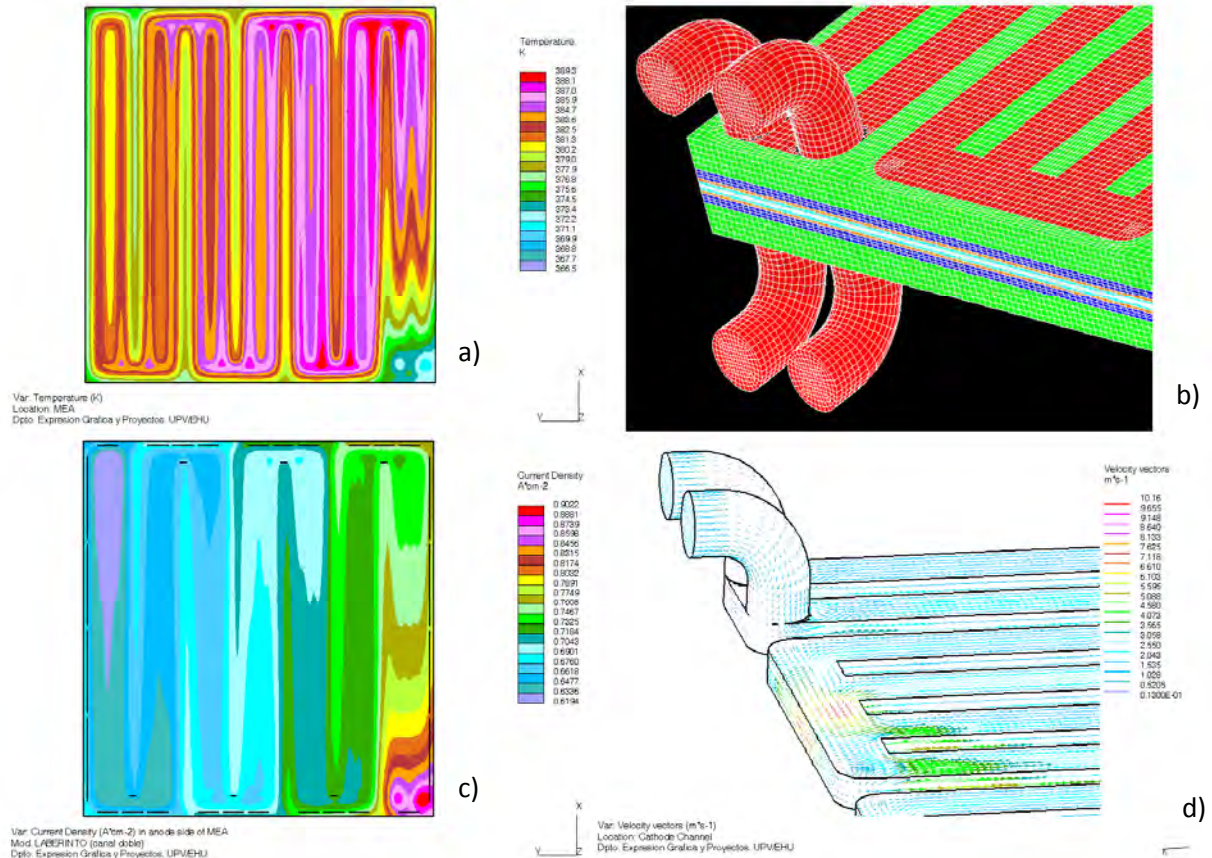


Figura 4-19. a) Distribución de temperatura en la membrana, b) Detalle malla, c) Distribución de la densidad de corriente en la membrana y d) Distribución de velocidades en el canal catódico.

4.5.2. Monocelda comercial Heliocentris

La Figura 4-20 muestra la PEMFC comercial de la marca Heliocentris utilizada en este estudio. El área reactiva es de 10.24 cm^2 . El canal de flujo es una cámara de 4096 mm^3 ($32 \times 32 \times 4$), donde los gases entran en contacto con las capas de difusión a través de una matriz de 23 orificios de 2.8 mm de diámetro dispuestos en una placa de acero inoxidable. Ánodo y cátodo presentan la misma geometría.

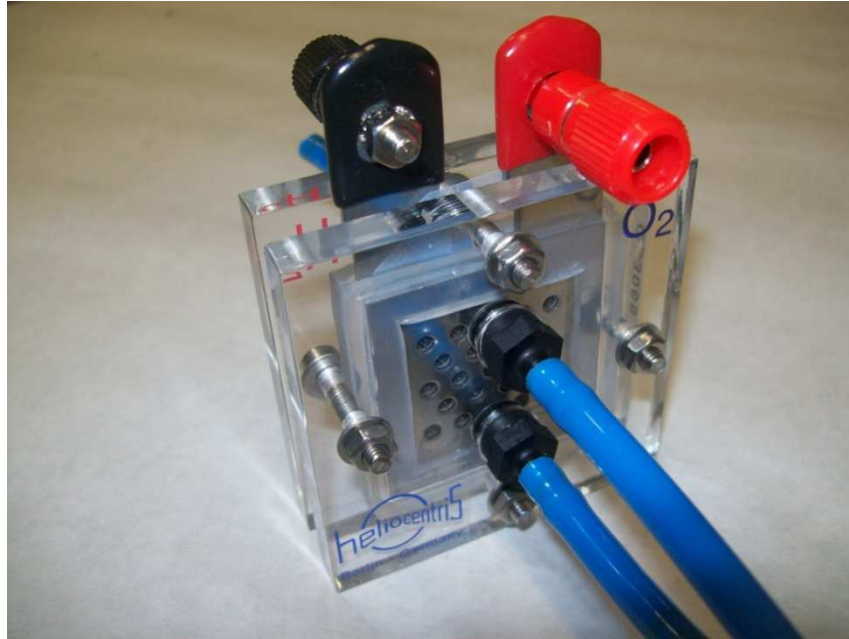


Figura 4-20. PEMFC comercial de la marca Heliocentris de 10.24 cm^2 de área reactiva

En la Figura 4-21 se recogen varios pasos de la etapa de diseño dentro de la fase de preprocesado, en la Figura 4-22 se presentan varios detalles del mallado del volumen de control utilizado en las simulaciones, y en la Figura 4-23 se detallan varios resultados obtenidos en la fase de postprocesado y que se utilizan para el análisis de los resultados obtenidos.

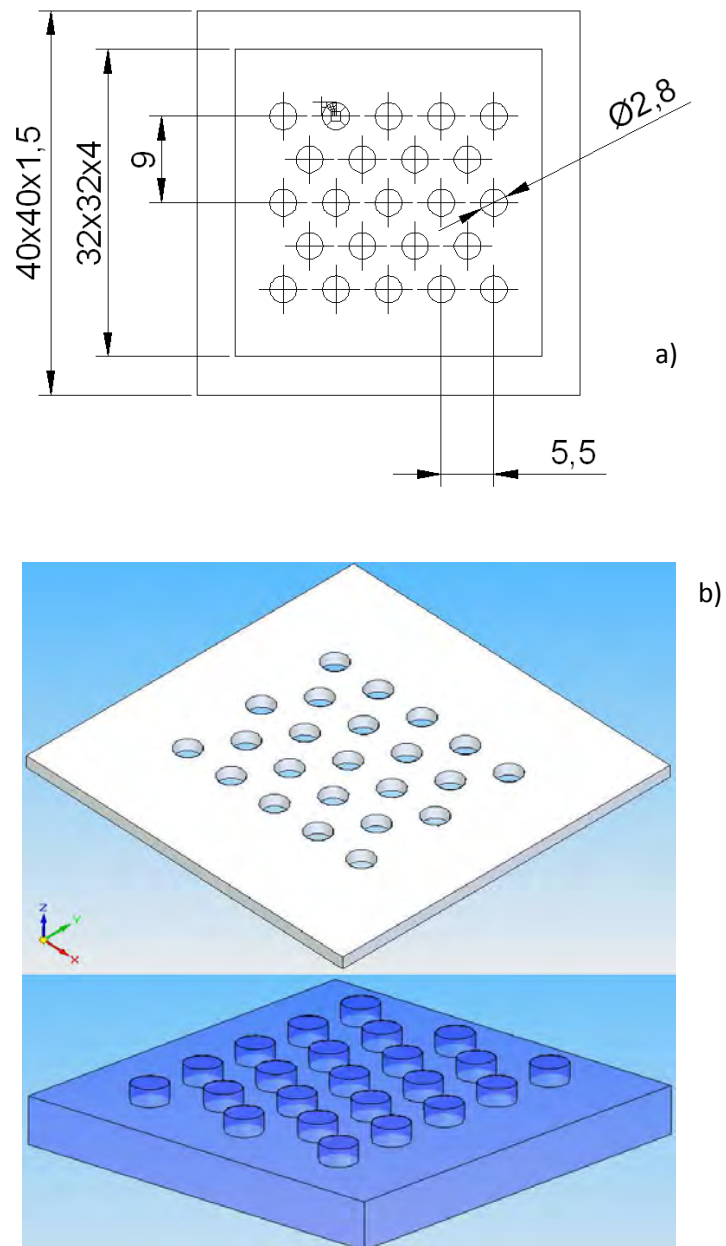


Figura 4-21. Modelado monocelda Heliocentris: a) Plano, b) Modelado de placa y zona fluida

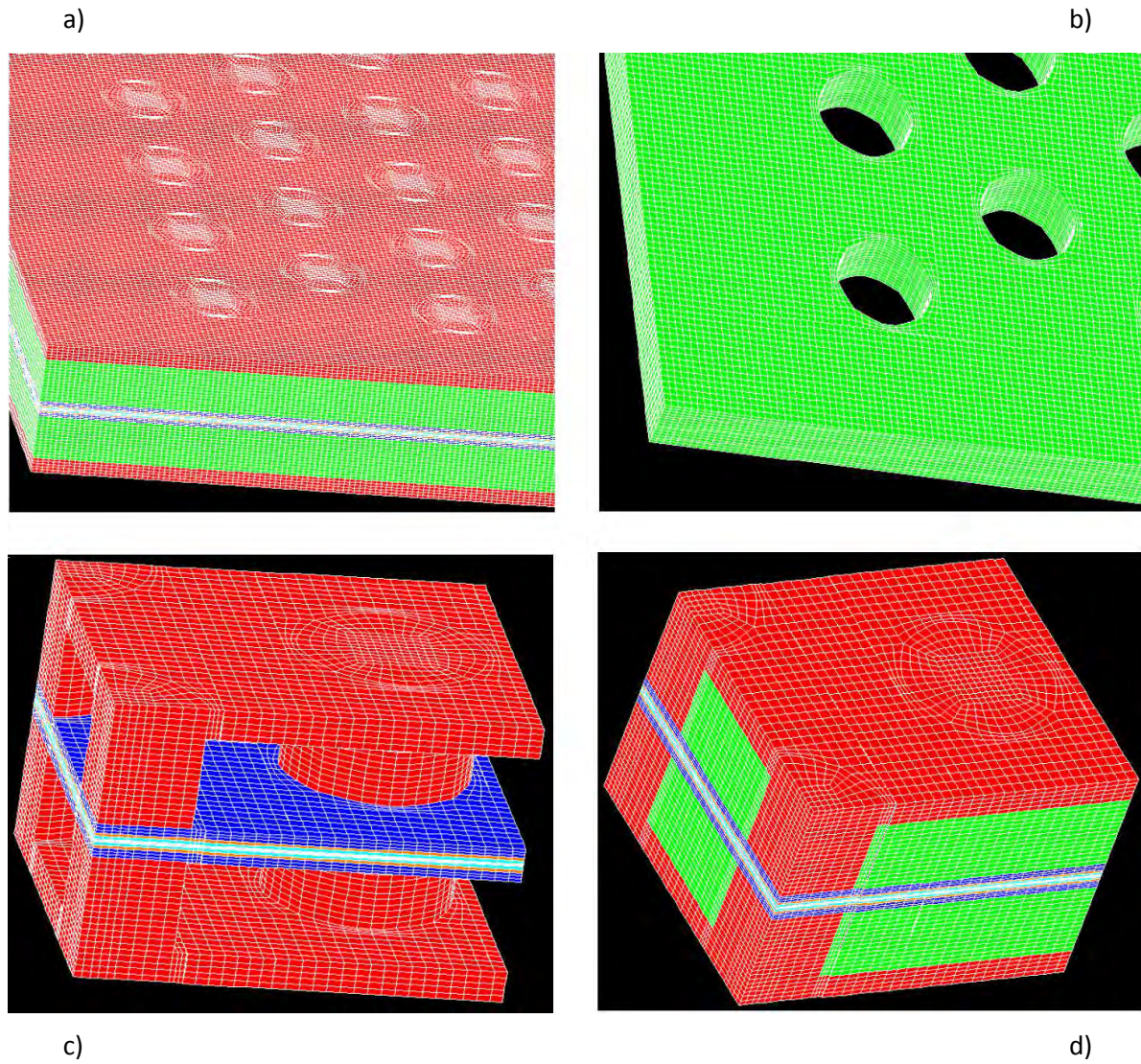


Figura 4-22. Detalles del mallado del volumen de control: a) Malla completa, b) Placa, c) Zona fluida y d) Detalle mallado zonas curvas

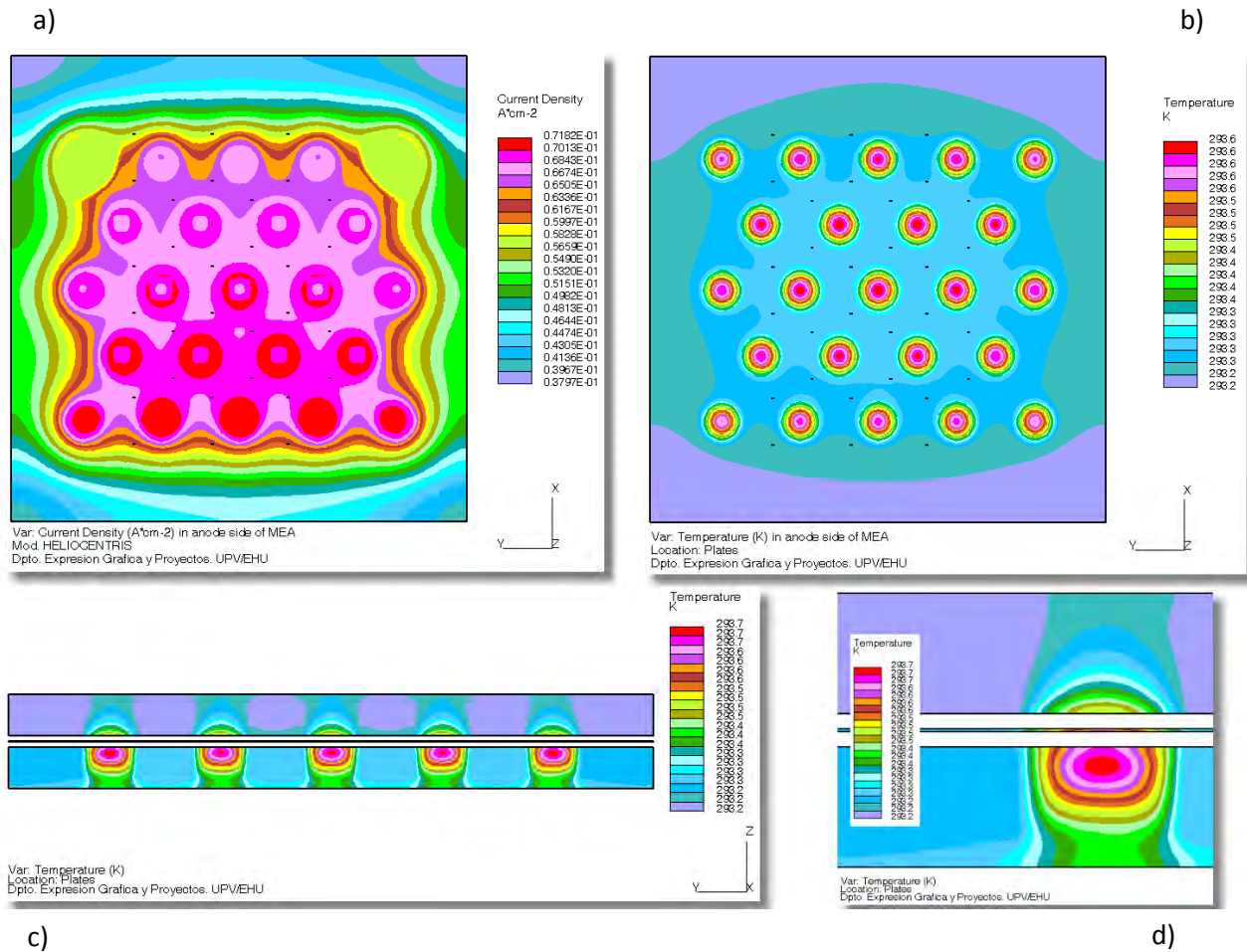


Figura 4-23. a) Distribución de la densidad de corriente en la membrana, b) Distribución de la temperatura en la membrana, c) Distribución de temperatura en la sección transversal y d) Detalle ampliado de la sección anterior

4.6. Referencias

- [1] Anderson, J.D., "Computational Fluid Dynamics", McGraw-Hill, New York (1995).
- [2] «Renault compra un Super Computador para ganar en el 2009 en Noticias24.com». [Online]. Disponible en: <http://www.noticias24.com/deportes/noticia/503/renault-compra-un-super-computador-para-ganar-en-el-2009/>. [Acceso: 15-09-2011].
- [3] Star-CD 3.2 Methodology, CD Adapco Group, <http://www.adapco.com>.
- [4] ES-PEMFC Methodology and Tutorial Manual, CD adapco Group, <http://www.adapco.com>.
- [5] «Palmetto Fuel Cell Analysis & Design». [Online]. Disponible en: <http://www.palmettofuelcellad.com/>. [Acceso: 15-09-2011].
- [6] R. Eymard, T Gallouët, R. Herbin, "The finite volume method", update of the article published in Handbook of Numerical Analysis, 7 (2000), 713-1020.
- [7] D. T. Lee, B. Schachter, "Two Algorithms for Constructing Delaunay Triangulations", International Journal of Computer Information Sciences, 9-3 (1980), 219-242.

A decorative graphic on the right side of the page. It features three blue circles of varying sizes, each composed of concentric circles in different shades of blue. These circles are connected by thin, light blue lines that form a triangular shape pointing downwards. The circles are positioned at the top, middle, and bottom right of the page.

Capítulo 5

Influencia de los parámetros geométricos en el rendimiento de una PEMFC. Revisión

Índice

CAPÍTULO 5: Influencia de los parámetros geométricos en el rendimiento de una PEMFC. Revisión.....	109
5.1. Introducción.....	109
5.2. Campo de flujo.....	109
5.3. Sentido de circulación del flujo	116
5.4. Longitud del canal y número de canales	117
5.5. Uso de deflectores en la dirección del flujo	119
5.6. Parámetros geométricos de la sección transversal del canal de flujo	121
5.6.1. Forma de la sección transversal.....	121
5.6.2. Anchura del canal y del <i>rib</i>	123
5.6.3. Profundidad del canal	124
5.6.4. Relación de aspecto de la sección transversal del canal: alto/ancho.....	127
5.7. Nuevas geometrías	128
5.8. Conclusiones	133
5.9. Referencias	136

CAPÍTULO 5: Influencia de los parámetros geométricos en el rendimiento de una PEMFC. Revisión

5.1. Introducción

Ante la creciente preocupación mundial por la contaminación ambiental y el agotamiento de las reservas de combustibles fósiles, las soluciones para la generación de energía limpia son una demanda urgente. Las pilas de combustible se presentan hoy día como una de las alternativas de generación de energía limpia más adecuadas y, entre ellas, las pilas de combustible de tipo PEM. Algunas de las ventajas que ofrecen con respecto a otros tipos de pilas son su fácil implementación y su vida útil más larga. Además, su baja temperatura de operación, alta densidad de potencia, arranque rápido, solidez del sistema y bajas emisiones han favorecido el interés de diversos sectores de la industria para abrir nuevos campos de aplicación de estas pilas de combustible, incluyendo la industria del automóvil, la generación estacionaria de energía, aplicaciones portátiles, etc. [1]. En la actualidad, muchos de los esfuerzos en investigación se centran en el desarrollo de PEMFC más eficientes que produzcan altas densidades de corriente durante más tiempo [2].

Aunque son muchos los factores que intervienen en el rendimiento de una PEMFC (como las condiciones de operación, los fenómenos de transporte en el interior de la pila, la cinética de la reacción electroquímica o el ensamblaje de la MEA), cada vez más trabajos analizan la influencia de las diferentes variables geométricas relacionadas con los canales de flujo de las placas bipolares. Las conclusiones de algunos de estos estudios permiten establecer configuraciones geométricas óptimas que permiten potenciar la producción de energía en la PEMFC prolongando la vida útil del sistema.

El objetivo de este capítulo es el de recopilar los resultados más importantes de los estudios realizados en los últimos años relacionados con la influencia de los diferentes parámetros geométricos de los canales de flujo en el rendimiento global de una PEMFC.

5.2. Campo de flujo

Como se ha explicado en capítulos anteriores, las placas son uno de los componentes clave de una pila de combustible, ya que realizan diferentes funciones esenciales para el buen funcionamiento del sistema. Además de servir de soporte mecánico, mantener separados los diferentes reactantes, conducir la corriente eléctrica generada o gestionar el agua y el calor producidos en el interior de la pila, también desarrollan la función de distribuir los reactantes a

lo largo de la superficie catalizadora mediante el campo de flujo. Esta última función está íntimamente ligada a la geometría de los canales de flujo.

Además de distribuir los reactivos sobre la superficie catalítica, el campo de flujo tiene por misión la de evacuar de manera óptima los productos de la reacción, por lo que su diseño puede llegar a tener un notable impacto en el rendimiento y la densidad de potencia que se obtengan de una PEMFC. Se han descrito aumentos hasta del 50% en la densidad de potencia producida solamente con un diseño óptimo del campo de flujo de los reactivos [3, 4].

Existen campos de flujo con diferentes configuraciones geométricas. Cada uno de estos diseños tiene sus ventajas y desventajas asociadas que los hacen más o menos aptos para las diferentes aplicaciones [5]. Entre las configuraciones más estudiadas están las representadas en la Figura 5-1 y Figura 5-2:

- Canal tipo serpentin o laberinto (simple o múltiple)
- Canales rectos paralelos o tipo z
- Canales interdigitados
- Tipo pin o malla
- En cascada

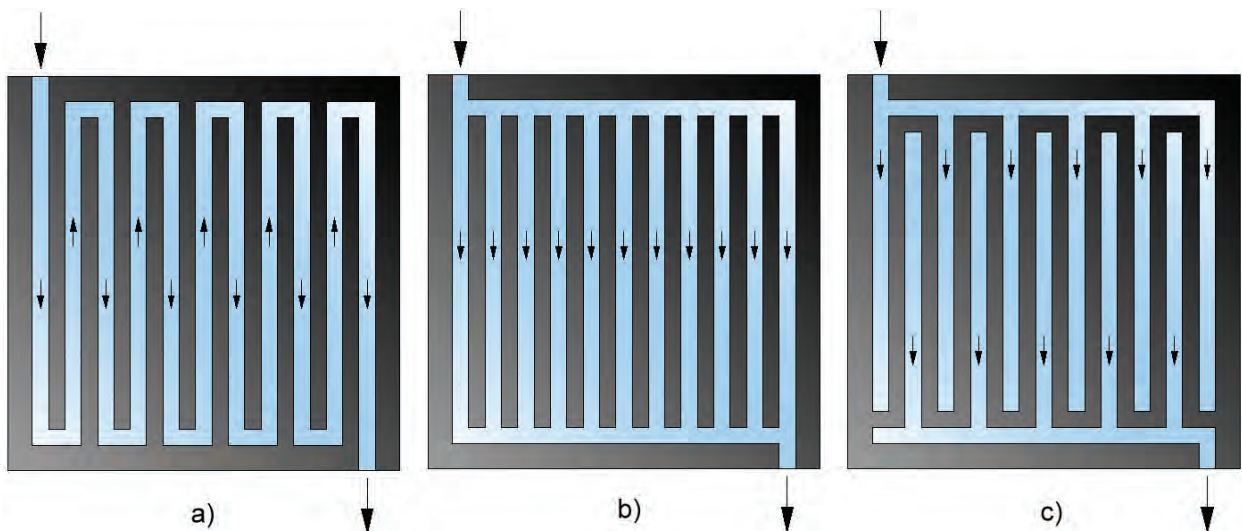


Figura 5-1. Diferentes configuraciones geométricas de los campos de flujo: a) Canal tipo serpentin (simple); b) Canales rectos paralelos o tipo z; c) Canales interdigitados

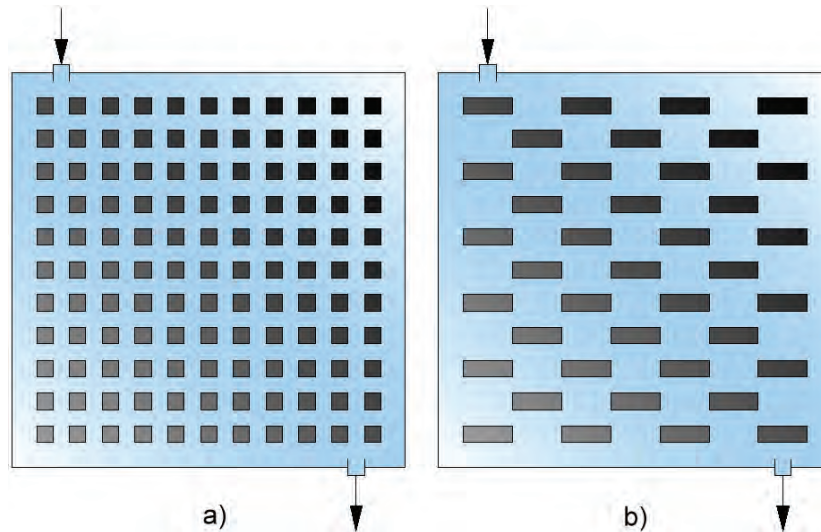


Figura 5-2. Diferentes configuraciones geométricas de los campos de flujo: a) Tipo pin o malla; b) en cascada

En muchos de los trabajos consultados el tipo de campo de flujo es una variable que se mantiene constante para el análisis de otras variables como la temperatura de operación, la humedad relativa, la presión de los reactivos, la dirección del flujo, etc. Hwang [6] analizó la influencia de la temperatura de operación en el rendimiento de la PEMFC utilizando placas de 25 cm^2 de área reactiva, con campos de flujo de tipo serpentín simple, en los que la relación de anchuras de canal y *rib* (espacio entre canales) se mantuvo constante. En Shimpalee et al. [7] se estudió la influencia de la humedad relativa de los reactivos en el rendimiento de una pila de 480 cm^2 de área reactiva, con canales de flujo de tipo serpentín múltiple.

La gestión del agua en la membrana de electrolito polimérico es fundamental para obtener la máxima potencia de una pila de combustible de tipo PEM. Se requiere de una hidratación completa para permitir una buena conducción protónica. A menudo, esta hidratación se consigue mediante la humidificación de las corrientes de los reactivos. Por otro lado, la generación de agua en el cátodo como producto de la reacción electroquímica, es la otra fuente importante de obtención de la humedad necesaria para la buena hidratación de la membrana. Conseguir un equilibrio entre la cantidad de agua producida y la necesaria para obtener una buena conducción protónica, eliminando de forma adecuada el exceso para evitar la inundación del canal de flujo o efecto flooding [8], es el objetivo de muchos estudios.

En Li et al. [9] se propone un diseño de campo de flujo de tipo serpentín (Figura 5-3) basado en la determinación de una caída de presión apropiada a lo largo de todo el canal de flujo, de manera que toda el agua líquida generada en el interior de la pila se evapore o se elimine a través de las corrientes de gas impidiendo un malfuncionamiento por inundación. Al mismo tiempo, la corriente de gas en el canal de flujo se mantiene completamente saturada con el fin de prevenir la deshidratación de la membrana. Se realizaron ensayos con campos de flujo de

50, 100, 200, 300 y 441 cm², concluyendo que una configuración de canales tipo serpiente puede proporcionar un rendimiento excelente de la pila, debido a su capacidad de compensar la eliminación de agua y una caída de presión aceptable.

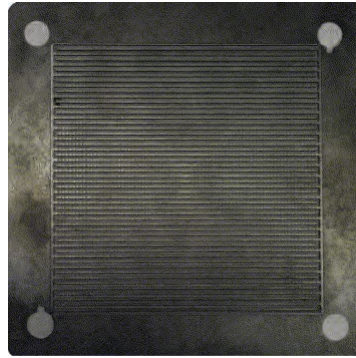


Figura 5-3. Imagen del diseño de los canales de flujo mecanizados en la placa bipolar [9]

Wang y Liu [10] utilizaron un campo de flujo de tipo interdigitado de 50 cm² de área reactiva para el estudio del efecto que sobre el rendimiento tenían la temperatura de operación de la pila, la humidificación de los reactivos, la presión de los gases y la estequiometría. En Hsieh [11] se compararon los efectos de diferentes parámetros sobre tres campos de flujo de 5 cm² con tres geometrías diferentes (Figura 5-4): serpiente, interdigitado y tipo pin o malla, concluyendo que el campo de flujo con canales de tipo interdigitado era el que mejor comportamiento presentaba.

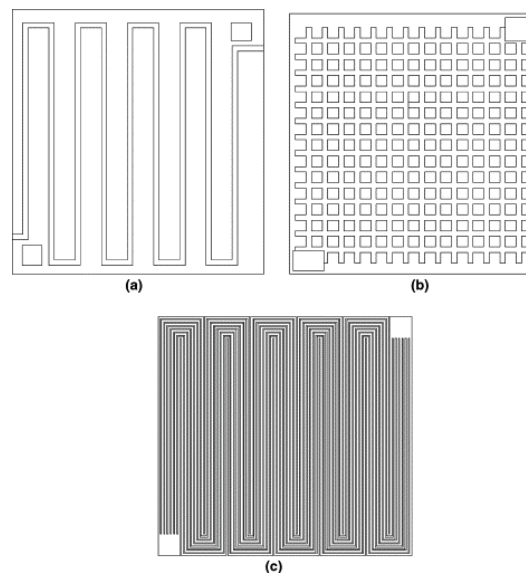


Figura 5-4. Campos de flujo estudiados [11]: a) Interdigitado; b) Tipo pin o malla; c) Serpiente

Varios trabajos se centraron en la comparación del comportamiento de campos de flujo de tipo paralelo e interdigitados [12], proponiendo en algunos casos geometrías diferentes (NINO, acrónimo de *n*-inlet y *n*-outlet) [13] o el uso de materiales porosos como el foam como canales de flujo [14]. En [15] y [16], se utilizaron campos de flujo con un área reactiva de 198 cm² y canales de tipo paralelo, serpentin e interdigitados. El campo de flujo interdigitado mostró mejor rendimiento que el paralelo debido a que se fuerza a los gases reactivos a pasar a través de las capas difusoras (Figura 5-5). Además, una pila con campos de flujo interdigitados puede alcanzar el mismo valor de rendimiento que otra con una geometría de canales paralelos pero con un menor consumo de combustible. Por otra parte, un incremento tanto del número de canales, como de la longitud de canal, como del número de giros de los canales, en un campo de tipo serpentin, favorece la reacción electroquímica, reduciendo el combustible sin reaccionar a la salida y, por lo tanto, aumentando el rendimiento.

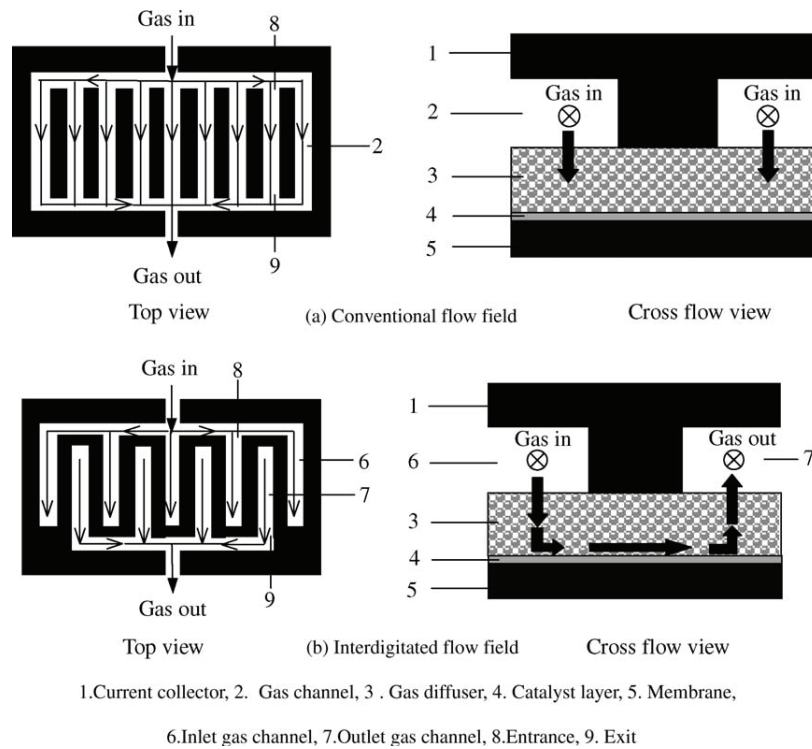


Figura 5-5. Diagrama esquemático del flujo en los diferentes campos de flujo [39]: a) Paralelo; b) Interdigitado

En Kumar y Reddy [17] se analizaron campos de flujo con canales tipo serpentin, paralelos, multiparalelos e interdigitados, estudiando la respuesta en régimen transitorio de la PEMFC con cada una de las geometrías (Figura 5-6). El análisis concluye que con un campo de flujo de canales paralelos el estado estacionario se alcanza antes que con el resto de geometrías, aunque el potencial de salida es menor.

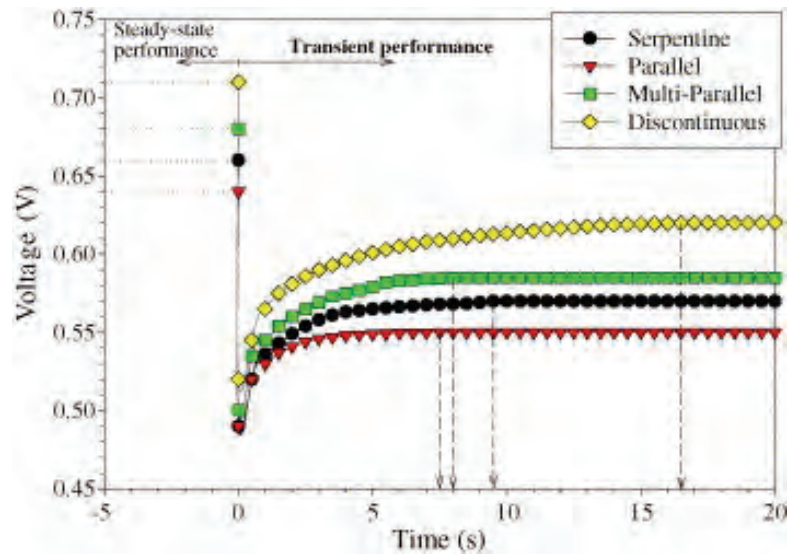


Figura 5-6. Comportamiento en estado estacionario y transitorio de una pila tipo PEM utilizando diferentes geometrías de campo de flujo en las placas bipolares [17]

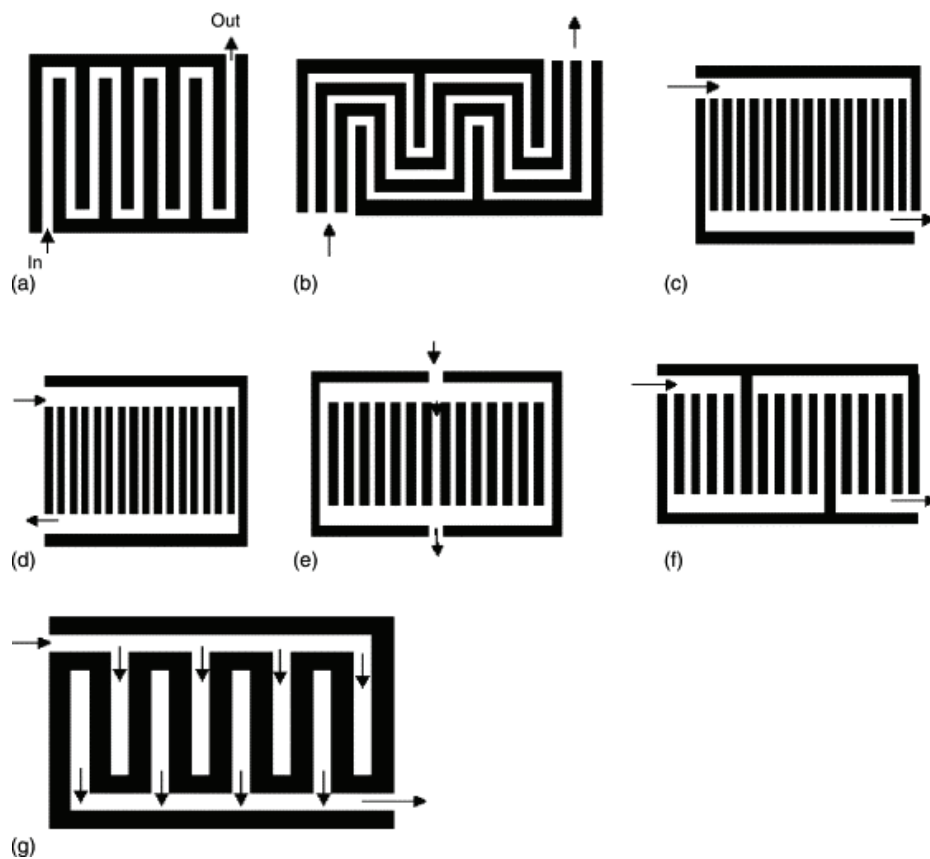


Figura 5-7. Campos de flujo analizados [18]: a) Serpentin; b) Serpentin múltiple; c) Paralelo; d) Paralelo en U; e) Simétrico en U; f) Paralelo en serie; g) Interdigitado

Un estudio comparativo de campos de flujo de tipo serpentín simple, serpentín múltiple, paralelo simple, paralelo en U, simétrico en U, paralelo en serie e interdigitado [18] (Figura 5-7), reflejó que las configuraciones geométricas que producen una menor pérdida de carga al paso de los reactivos presentan un índice de no uniformidad elevado. Es decir, zonas más o menos amplias del área reactiva no reciben suficiente cantidad de reactivos por una mala distribución de los mismos. Por tanto, aunque la pérdida de carga en una pila de combustible es uno de los importantes determinantes de su eficiencia global, una distribución homogénea de los reactivos sobre el área reactiva es imprescindible para obtener un rendimiento óptimo de la pila.

El análisis comparativo de campos de flujo con diferentes configuraciones geométricas se repite en múltiples estudios, tanto en régimen permanente [19-39], como en régimen transitorio [40]. Las conclusiones principales que se pueden extraer son:

- La configuración geométrica del campo de flujo apenas tiene influencia a altos potenciales de operación de la pila. Por el contrario, a bajos potenciales de operación, donde las pérdidas por concentración o transporte de masa son el principal factor que determina el rendimiento de la pila, la configuración geométrica afecta significativamente.
- Los campos de flujo que ofrecen una menor pérdida de carga al paso de los reactivos, en general, permiten el desarrollo de caminos preferentes por los que circula la mayor parte del flujo, provocando una mala distribución de los reactivos sobre el área reactiva de la MEA y, por lo tanto, una baja eficiencia de la reacción y un rendimiento menor.
- Con campos de flujo con configuraciones geométricas de tipo serpentín o canales interdigitados, en general, se consiguen distribuciones más uniformes de los reactivos sobre las capas catalíticas. Esto permite obtener mayores valores de densidad de corriente y un aumento en el rendimiento electroquímico de la pila. Por el contrario, ofrecen una mayor caída de presión al paso del flujo, aumentando la energía necesaria para su impulsión, lo que reduce el rendimiento global del sistema. Sin embargo, este aumento en la caída de presión dentro del campo de flujo potencia el flujo por convección o bajo *rib*, mejorando la eliminación del agua residual en el cátodo, aumentando la eficiencia de la reacción electroquímica y la densidad de corriente obtenida.
- En campos de flujo de tipo serpentín, tramos de canal más largos entre los cambios de dirección y canales más estrechos potencian el flujo por convección, mejorando el rendimiento de la pila. Así mismo, cambios de dirección en esquina producen mayores pérdidas de carga que los cambios de dirección curvilíneos.
- Evitar el efecto flooding en el cátodo es una de las principales preocupaciones de los diseñadores. Por tanto, es conveniente la aplicación de geometrías diferentes en la zona anódica y catódica. En general, se utilizan para el cátodo geometrías con mayor

pérdida de carga que potencien el flujo por convección, porque ayudan a eliminar el excedente de agua producto de la reacción además de mejorar la eficiencia de la reacción electroquímica.

- En general, con el aumento del área reactiva de la pila se obtienen valores menores de densidad de corriente.

5.3. Sentido de circulación del flujo

Durante el funcionamiento de una pila de combustible de tipo PEM, los reactivos circulan por los canales de flujo. En el recorrido entre la entrada y la salida del campo de flujo las condiciones de los reactivos: presión, concentración, temperatura, humedad relativa, etc. varían notablemente. Por tanto, el sentido en el que los reactivos circulen a través de la pila a ambos lados de la MEA determinará las condiciones de los gases en los diferentes puntos del recorrido. Las configuraciones de circulación de los gases reactivos más analizadas son: flujo en concordancia (co-flow), flujo a contracorriente (counter flow) y flujo cruzado (cross flow).

En Ge y Yi [41] se estudió el impacto del sentido del flujo de los reactivos en un modelo de 140 cm² de área reactiva. Los resultados de este trabajo muestran que si los gases circulan por ánodo y cátodo a contracorriente se mejora la humidificación de la membrana, obteniéndose una distribución más homogénea de la densidad de corriente y aumentando el rendimiento de la pila. En Scholta et al. [42] se analizó el comportamiento de una PEMFC para diferentes configuraciones en la dirección de los flujos anódico y catódico: flujo en concordancia, contracorriente y flujo cruzado (Figura 5-8). Las placas bipolares, de 100 cm² de área reactiva, contenían campos de flujo de tipo serpentín simple. En este trabajo, los resultados también muestran un mejor comportamiento para una configuración de flujos a contracorriente, utilizando gas seco en el ánodo y gas húmedo en el cátodo.

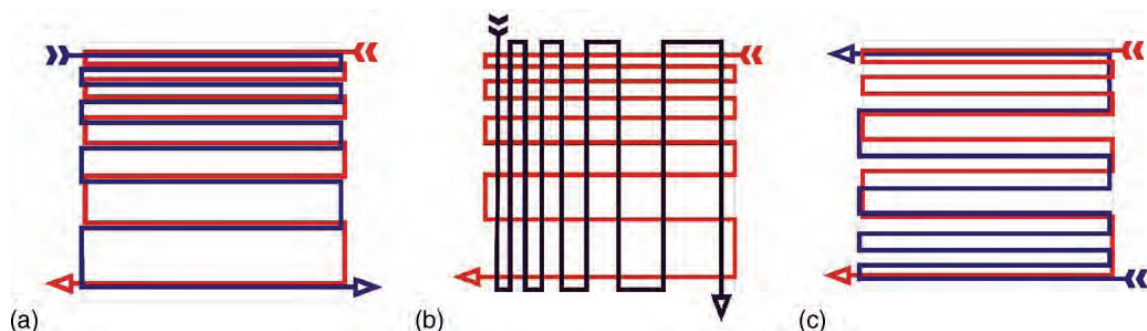


Figura 5-8. Diferentes configuraciones en la dirección de los flujos: a) Flujo en contracorriente; b) Flujo cruzado; c) Flujo en concordancia [42]

Por su parte, Morin et al. [43] investigaron la influencia del sentido de circulación del flujo en la gestión del agua dentro de la pila. Los resultados mostraron que con flujo a contracorriente se obtiene una mejor hidratación de la membrana, aumentando la conducción protónica y, por tanto, el rendimiento de la pila. Además, el efecto de la gravedad permite una retención del agua dentro de la pila que también favorece la hidratación de la membrana.

Por su parte, Valiño et al. [44] analizaron el comportamiento de una pila con campos de flujo en cascada de 100 cm^2 de área reactiva (Figura 5-9). Se estudiaron diferentes configuraciones en la dirección del flujo: concordancia, contracorriente y flujo cruzado. El principal resultado muestra que, para esta geometría, el consumo de los reactivos en las capas catalizadoras, depende esencialmente del flujo del gas en defecto estequiométrico, que suele ser el hidrógeno, y no de la configuración de la dirección del flujo. Así, la distribución de la reacción a lo largo del campo de flujo no es uniforme, concentrándose en todos los casos estudiados en la zona más cercana a la entrada del hidrógeno, por lo que una parte muy significativa del área reactiva está infrautilizada.

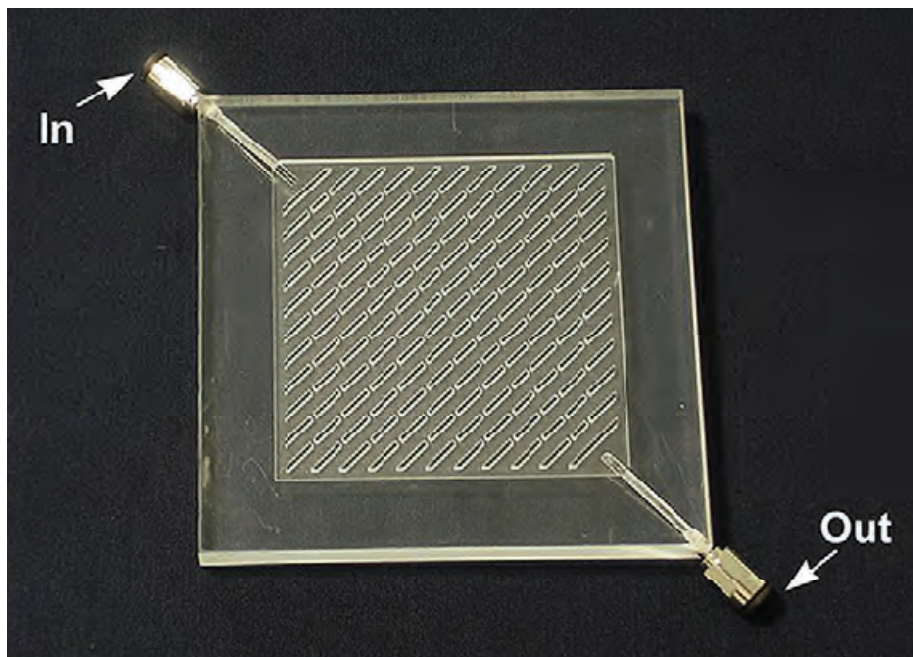


Figura 5-9. Campos de flujo con canales en cascada de 100 cm^2 [44]

5.4. Longitud del canal y número de canales

La longitud del canal es uno de los parámetros geométricos con más influencia, sobre todo en los campos de flujo con canales de tipo serpentin. Varios estudios del comportamiento del campo de flujo de tipo serpentin analizaron el flujo convectivo de los reactivos bajo *rib* [45,

46]. La conclusión principal de estos trabajos es que el flujo por convección (bajo *rib*) es superior, y por ende el rendimiento de la pila, cuanto más largo sea el tramo recto del canal entre cambios de dirección, debido al incremento en la diferencia de presión entre canales adyacentes. Es decir, campos de flujo con forma exterior rectangular permitirán un mejor rendimiento que campos con forma exterior cuadrada.

En Shimpalee et al. [47] se investigó la influencia que sobre el rendimiento y la distribución de los reactivos ejercían la longitud del canal de flujo y el número de canales. El estudio se realizó sobre campos de flujo de 200 cm^2 con canales de tipo serpentin (Figura 5-10). Los resultados muestran cómo la temperatura local, el contenido de agua en la membrana y la distribución de la densidad de corriente son más uniformes en los campos de flujo de tipo serpentin cuyos diseños tienen longitudes de recorrido más corto o un mayor número de canales.

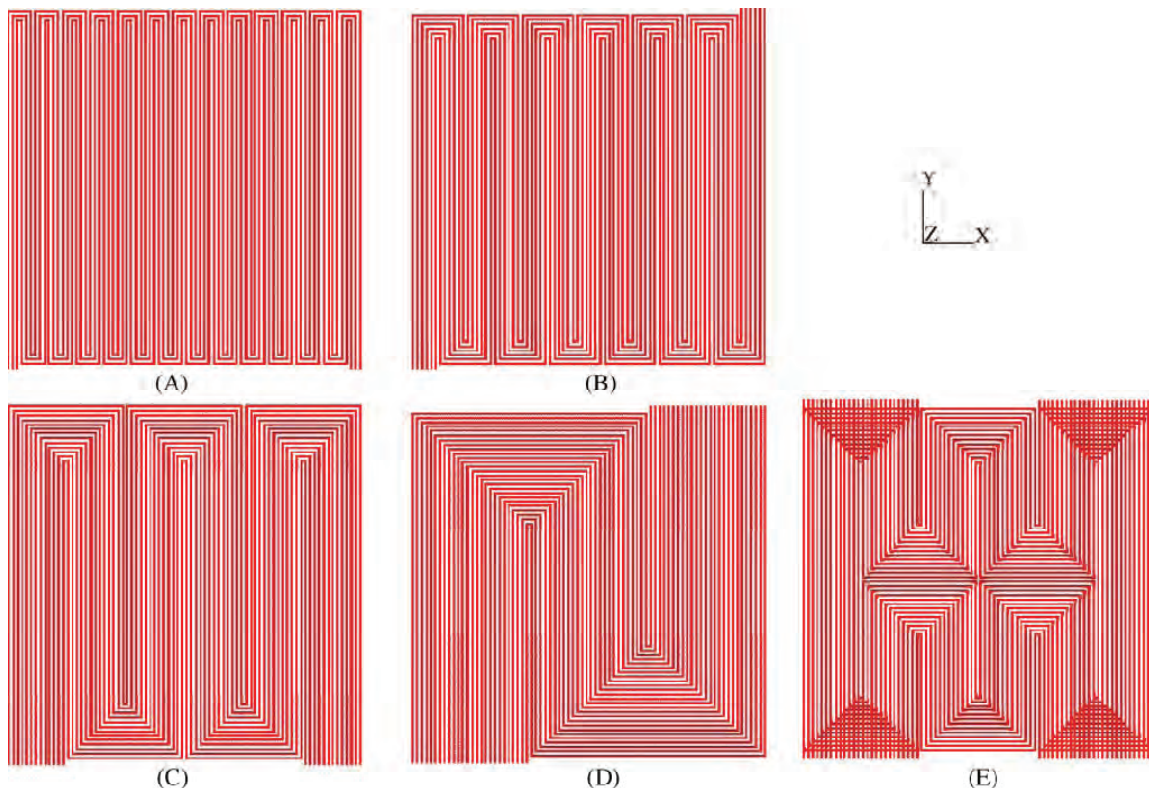


Figura 5-10. Campos de flujo del ánodo y cátodo en una PEMFC de 200 cm^2 [47]: a) Serpentin múltiple de 3 canales; b) Serpentin múltiple de 6 canales; c) Serpentin múltiple de 13 canales; d) Serpentin múltiple de 26 canales; e) Serpentin simétrico múltiple de 26 canales

5.5. Uso de deflectores en la dirección del flujo

Las corrientes de reactivos que circulan a través de los canales de flujo alcanzan las capas difusoras de la MEA a través de la superficie del canal que está en contacto con dichas capas, donde los gases se difunden hasta llegar a las capas catalíticas para reaccionar. Por contra, el volumen de gas que circula alejado de las capas difusoras prácticamente no tiene opción a participar en las reacciones, aumentando las pérdidas por concentración y la cantidad de gas sin reaccionar a la salida de la pila, lo que reduce la eficiencia del sistema.

Dado que la superficie de los canales de flujo que está en contacto con las capas difusoras puede representar menos del 60% de la superficie reactiva total de la pila, resulta evidente la necesidad de forzar a que los reactivos circulen a través de las capas difusoras bajo *rib* que separan los canales de flujo (Figura 5-11), aumentando así la superficie reactiva útil y con ello el rendimiento de la pila. Así mismo, potenciar que la mayor parte del reactivo que circula por los canales lo haga lo más cerca posible de las capas difusoras aumentará la fracción de gas que reacciona y, por tanto, la eficiencia de la pila.

La convección o circulación bajo *rib* se puede potenciar con el incremento de presión entre canales adyacentes en campos de flujo de tipo serpentin [45-47]. Igualmente, el uso de deflectores en los canales de flujo se ha demostrado eficiente en el aumento de la cantidad de gas que alcanza las capas catalíticas y reacciona.

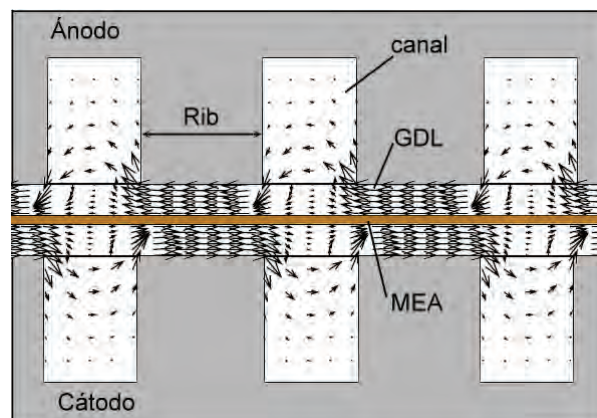


Figura 5-11. Circulación bajo *rib* a través de las capas difusoras

Varios estudios analizan el uso de deflectores [48-50] y la combinación de éstos con otros parámetros como la variación en el número de canales [51]. Los resultados muestran que debido al bloqueo que los deflectores producen a la corriente de gas, una mayor cantidad de gas es forzada a circular a través de las capas difusoras alcanzando la capa catalítica. Por este motivo, la reacción química se favorece debido a que el área reactiva útil aumenta,

reflejándose en un aumento del rendimiento de la pila. Hay que tener en cuenta que el incremento en la densidad de corriente a bajos voltajes decrece cuanto mayor sea el número de deflectores, lo que implica que existe un número óptimo de deflectores, que hace que el rendimiento de la pila aumente.

En Yan et al. [52] se estudió un campo de flujo de 198.81 cm^2 de área reactiva, uno con canales de tipo paralelo y dos con canales de tipo interdigitado. En éstos últimos se utilizaron deflectores para aumentar el flujo convectivo (Figura 5-12). Para cada uno de las tres opciones geométricas propuestas se analizaron tres variantes con diferente relación de área de flujo, *área bajo canal/área bajo rib (ancho canal/ancho rib)*. Los resultados mostraron que el rendimiento era mejor en los casos de canales interdigitados y, entre ellos, los campos de flujo con una relación *área bajo canal/área bajo rib (ancho canal/ancho rib)* de 40.23% (0.8/1.2) y de 50.75% (1/1) presentaban mejor rendimiento que el modelo de con área de flujo de 60.22% (1.2/0.8).

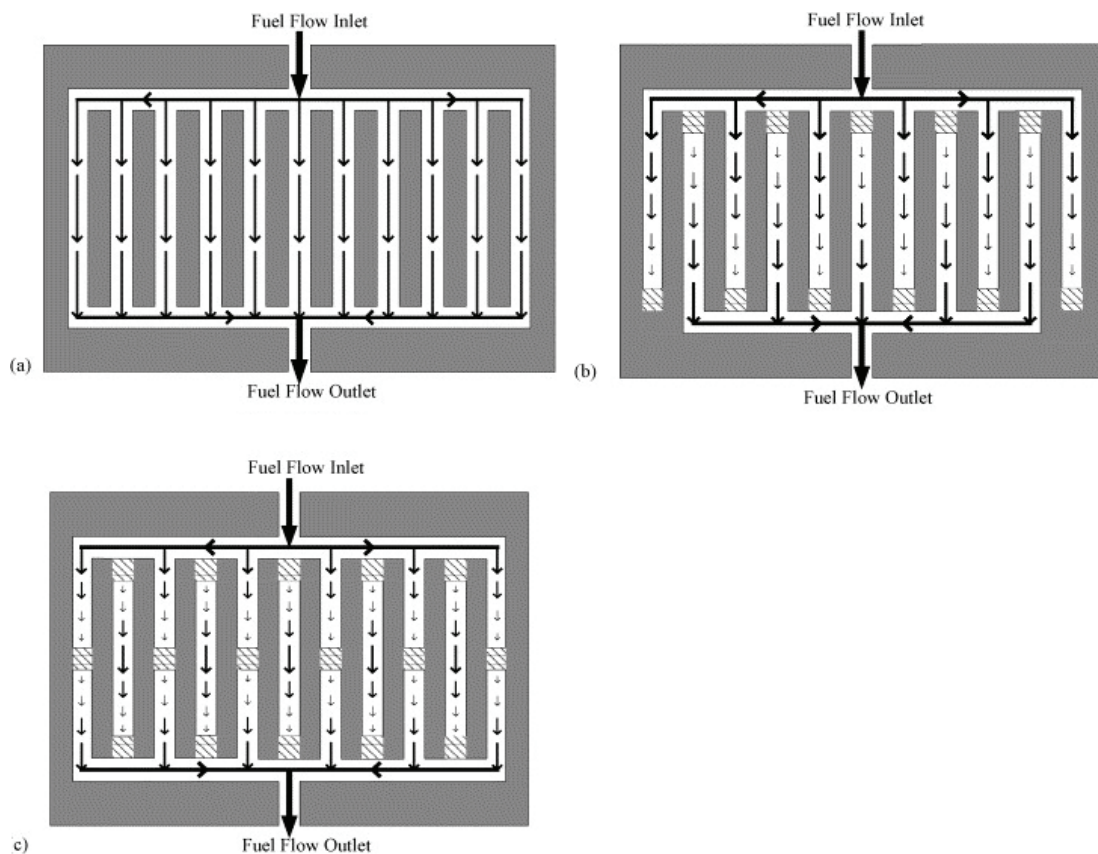


Figura 5-12. Esquema de los modelos de campo de flujo analizados [52]: a) Campo de flujo de canales paralelos; b) Campo de flujo de canales interdigitados I, con un deflector en cada canal al final de éste; c) Campo de flujo de canales interdigitados II, con dos deflectores en cada canal, uno al final y otro en la mitad del canal

En Thitakamol et al. [53] se hizo un estudio comparativo del uso de dos campos de flujo de canales interdigitados de 50.41 cm^2 de área reactiva en el cátodo, uno de los cuales disponía de deflectores en la dirección del flujo en la parte central del campo (Figura 5-13). En ambos casos, en el ánodo se colocó un campo de flujo de canales interdigitados convencional. Cuando se utilizó O_2 como oxidante, ambas geometrías presentaron un comportamiento similar. En cambio, cuando se utilizó aire como oxidante, se observó que la potencia de salida obtenida era entre 1.2 y 1.3 veces superior para la geometría que disponía de deflectores que para la convencional.

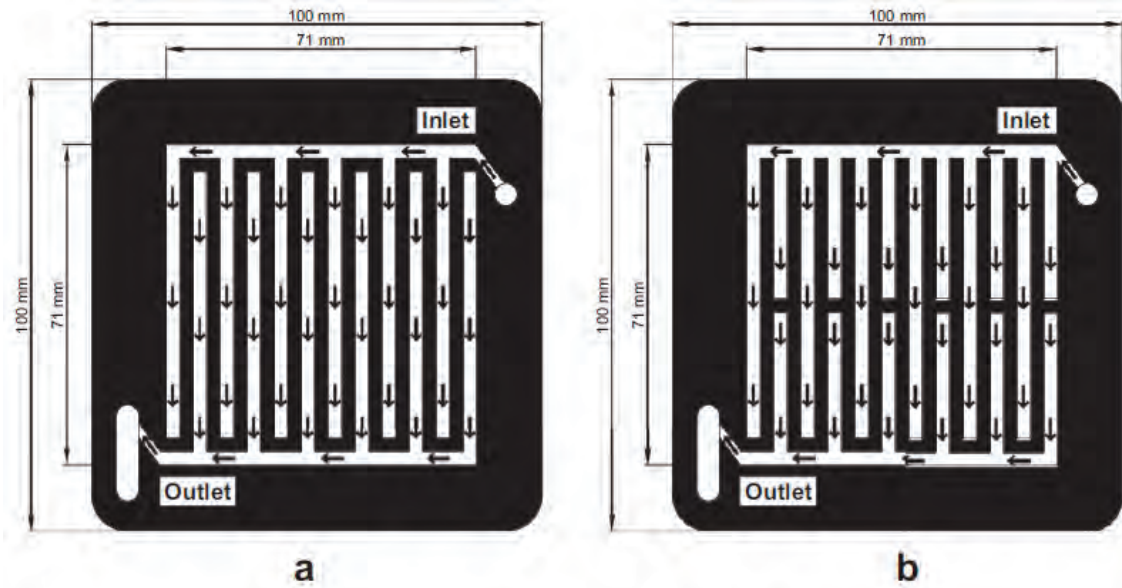


Figura 5-13. Esquema de los modelos de campo de flujo analizados [53]: a) Campo de flujo de canales interdigitados convencional; b) Campo de flujo de canales interdigitados con deflectores centrales

5.6. Parámetros geométricos de la sección transversal del canal de flujo

5.6.1. Forma de la sección transversal

En cuanto a la forma de la sección transversal de los canales, aunque se han estudiado canales de sección semicircular, trapezoidal, triangular, etc., como norma general se diseñan canales con sección transversal rectangular [54]. Kumar y Reddy [55] analizaron la influencia que sobre el consumo de hidrógeno en el ánodo ejercía la forma del canal de flujo estudiando canales rectangulares, triangulares y semiesféricos.

En [56] se investigaron tres secciones transversales diferentes: rectangular, trapezoidal y paralelogramo (Figura 5-14), sobre un canal de flujo recto a altas densidades de corriente de

operación. Los resultados mostraron la importancia de la anchura del *rib*. Un *rib* menos ancho facilita la distribución de los reactivos y ayuda a reducir las pérdidas de concentración.

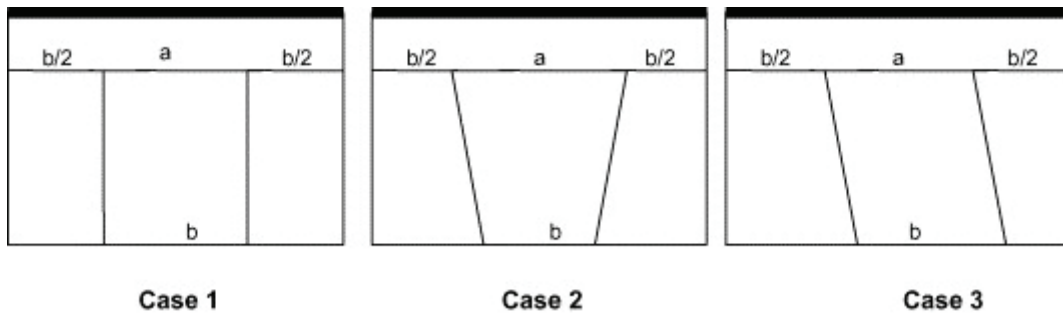


Figura 5-14. Diferentes configuraciones geométricas analizadas de la sección transversal [56]:
Caso 1) Rectangular; Caso 2) Trapezoidal; Caso 3) Paralelogramo

Los resultados de las simulaciones con estas geometrías revelaron que el canal de sección rectangular proporcionó potenciales de pila superiores, mientras que la sección transversal trapezoidal presentaba distribuciones de densidad de corriente más uniformes. Por otra parte, los resultados indicaron que las pérdidas óhmicas son muy sensibles a la anchura del *rib*. En general, el potencial de operación de la pila se mostró insensible a la anchura del *rib* para valores bajos de la densidad de corriente y viceversa.

Owejan et al. [57] estudiaron campos de flujo de tipo serpentin múltiple de 50 cm² de área reactiva con flujo cruzado, con canales de sección transversal rectangular y triangular de 0.52 mm² (Figura 5-15), concluyendo que el canal en forma triangular retiene menos agua que el rectangular y que ésta se acumula en las esquinas del perfil adyacentes a la GDL.

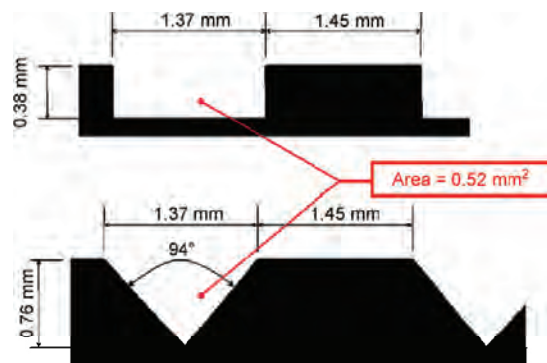


Figura 5-15. Sección transversal de los canales analizados [57]

En general, los campos de flujo que se analizan en el laboratorio han sido mecanizados con herramientas y procesos altamente precisos, por lo que la geometría no difiere apenas de la geometría diseñada originalmente. En cambio, en procesos de fabricación en serie, la

geometría resultante puede presentar ligeras variaciones con respecto al diseño original. La magnitud de dicha variación dependerá del proceso de fabricación utilizado. Shimpalee et al. [58] investigaron la influencia de los “defectos” en el canal de flujo debidos a la utilización de diferentes procesos de fabricación (Figura 5-16).

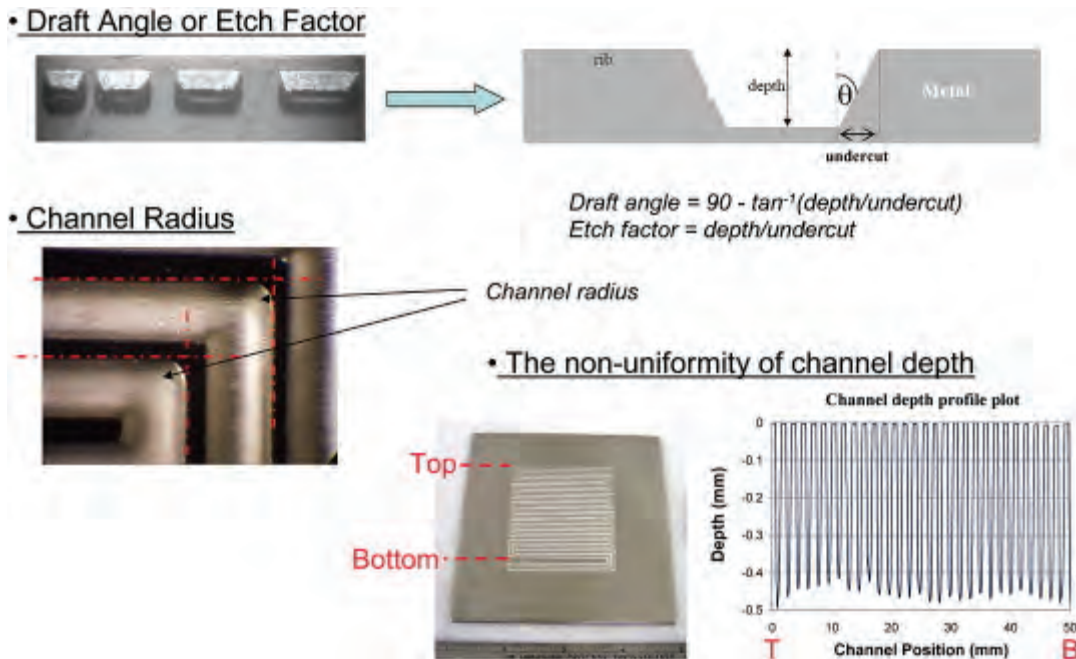


Figura 5-16. Errores más comunes en la geometría debidos al proceso de fabricación [58]

5.6.2. Anchura del canal y del *rib*

Son muchos los investigadores que han analizado la influencia de dos parámetros geométricos esenciales, como son la anchura del canal de flujo y la anchura del *rib* [59-64], demostrando que afectan a muchas de las variables que intervienen en el funcionamiento de una pila de tipo PEM y, por tanto, al rendimiento de ésta. Las conclusiones más repetidas son que la influencia de estos parámetros es más evidente a bajos potenciales de operación y que para cada caso concreto existe una configuración óptima que maximiza el rendimiento de la pila.

Scholta et al. [65] analizaron un modelo de 100 cm² de área reactiva, con una geometría de canales paralelos y flujo en contracorriente. En este estudio, partiendo de un diseño básico, se fueron variando las dimensiones tanto de los canales como de los *rib*, y se estudió su influencia en el rendimiento de la pila. Se identificaron como valores óptimos en las condiciones del estudio dimensiones tanto para el canal como para el *rib* entre 0.7 y 1 mm. En general, dimensiones menores son más adecuadas para altas densidades de corriente, mientras que las dimensiones superiores son mejores para rangos de densidad de corriente más bajos.

Shimpalee y Van Zee [66], investigaron la influencia que sobre el rendimiento de la pila y la distribución de especies tenían de la anchura del canal y la anchura del *rib* en una geometría de tipo serpentin de 25 cm² (Figura 5-17). Los resultados mostraron que el rendimiento era ligeramente mayor en estado estacionario para el canal más estrecho. Así mismo, en una situación estacionaria, el flujo a contracorriente presentaba peor rendimiento que el flujo en concordancia.

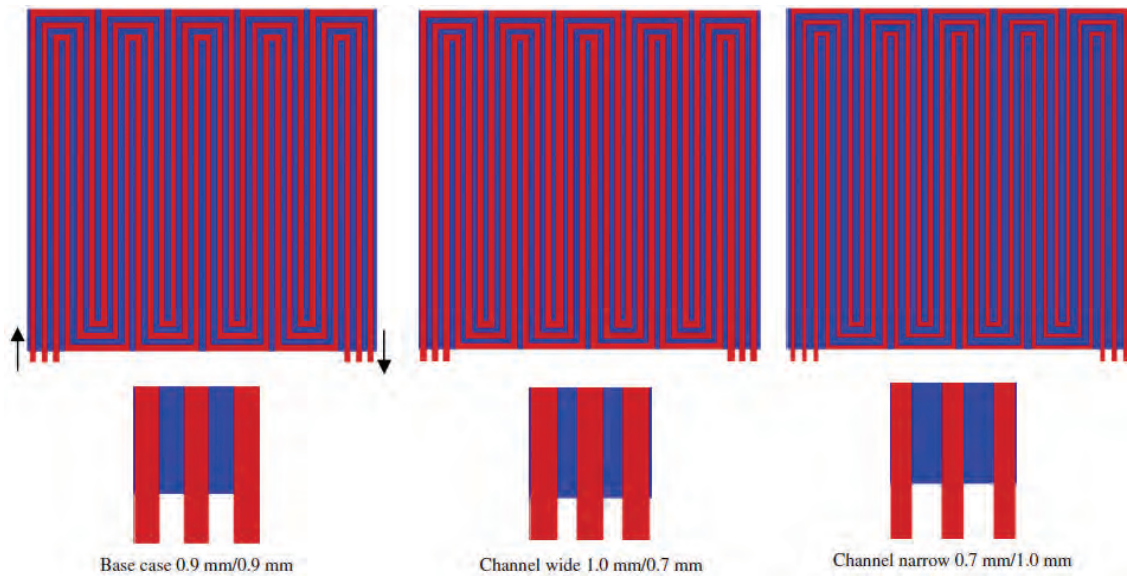


Figura 5-17. Campos de flujo de 25 cm² con diferentes anchuras canal/rib [66]

Wang et al. [67] analizaron campos de flujo de tipo paralelo e interdigitados con cinco variantes diferentes de relación *área bajo canal/área reactiva total* (0.3, 0.4, 0.522, 0.6, y 0.7), variando la anchura del canal y la anchura del *rib*. Los resultados mostraron que para el diseño de canal de flujo paralelo, el transporte de los reactivos hasta la capa catalítica es principalmente por difusión, por lo que, al aumentar el área bajo canal mejora el rendimiento de la pila debido al incremento de la superficie de contacto entre los reactivos y las capas difusoras. En cambio, para el diseño de canales interdigitados, como se promueve el flujo a través de la capa difusora, también se favorece la reacción electroquímica, por lo que la relación de área tiene poco efecto sobre el rendimiento de la pila.

5.6.3. Profundidad del canal

La profundidad del canal de flujo es una variable al que se refiere un menor número de trabajos. Algunos estudios centrados en el análisis de otros parámetros geométricos del canal de flujo, como la anchura del canal, varían la profundidad del canal con motivo de mantener constante el diámetro hidráulico [55], pero sin centrarse en el efecto de dicha variación.

En Yan et al. [68] se estudió un campo de flujo de 198.87 cm^2 de área reactiva, con canales en forma de cuña prismática, variando tanto la altura del canal como la anchura del mismo. Los resultados mostraron que la variación de área de flujo a lo largo del canal tiene una influencia significativa en la velocidad del flujo, el transporte del reactivo, la eliminación del agua en el cátodo y, por lo tanto, en la eficiencia de la reacción y en el rendimiento de la pila. Liu et al. [69] analizaron la influencia de la reducción de la altura del canal a lo largo del campo de flujo del cátodo (Figura 5-18), observando que, para potenciales de operación bajos, dicha reducción aumentaba el flujo hacia las capas difusoras, mejorando la reacción electroquímica, la eliminación del excedente de agua y mejorando el rendimiento global de la pila.

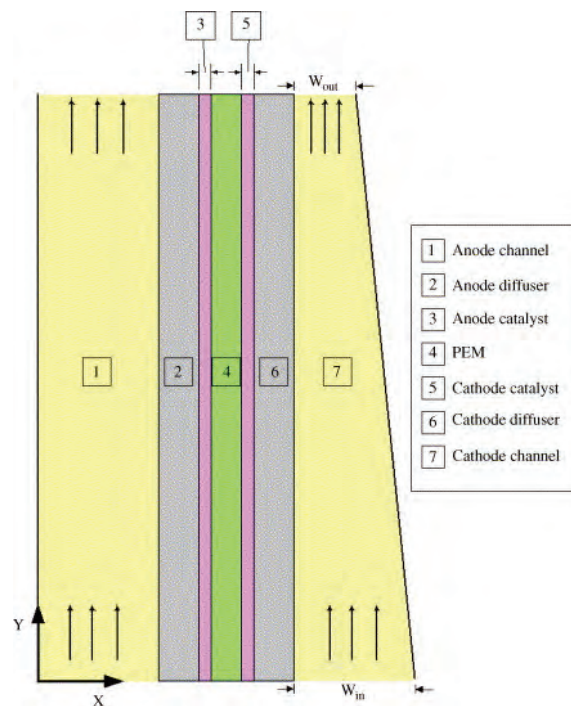


Figura 5-18. Diagrama esquemático del modelo 2D utilizado [69]

Sobre un campo de flujo de tipo serpentín múltiple de 5.29 cm^2 de área reactiva, Yang et al. [70] investigaron la influencia de una reducción de la altura del canal de flujo en la salida (Figura 5-19). Las conclusiones de la investigación indicaron que a medida que la reducción del área de salida y la longitud donde ésta se aplicaba eran mayores, el transporte de los reactivos mejoraba, aumentando la reacción electroquímica y el rendimiento en comparación con un campo de flujo de tipo serpentín convencional. Sin embargo, la pérdida de carga también aumentaba, disminuyendo la efectividad global de la pila. Considerando las pérdidas de presión, el rendimiento óptimo se obtuvo reduciendo el área de salida al 60% en un tramo de canal igual al 40% de la longitud original.

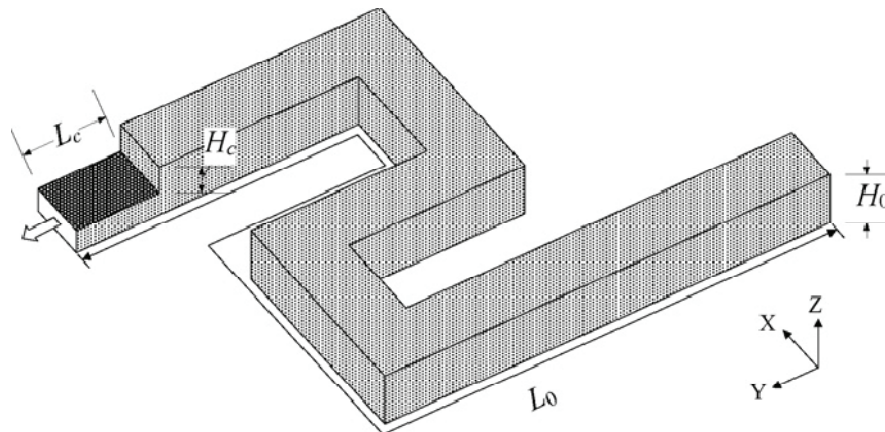


Figura 5-19. Esquema de la reducción en altura a la salida del canal [70]

Dos trabajos similares [71, 72] proponen un método de optimización de un campo de flujo de tipo serpentín simple de cinco tramos, de 85 mm^2 de área reactiva, mediante la variación de la altura del canal de flujo (Figura 5-20). Esta geometría variable solo se aplicó en el cátodo, manteniendo en el ánodo un canal de flujo similar pero de sección constante. Una geometría optimizada permite un aumento del rendimiento de la pila cercano al 12% con respecto a una geometría de canales con altura uniforme. El modelo óptimo se compone de tres canales con altura variable: los canales 2 y 3 con sección convergente y el canal 5 con sección divergente. Según los autores, los canales convergentes mejoran el flujo principal y el flujo convectivo bajo *rib*, aumentando la densidad de corriente obtenida. El canal divergente, en cambio, permite minimizar las fugas de reactivo sin reaccionar a la salida de la pila.

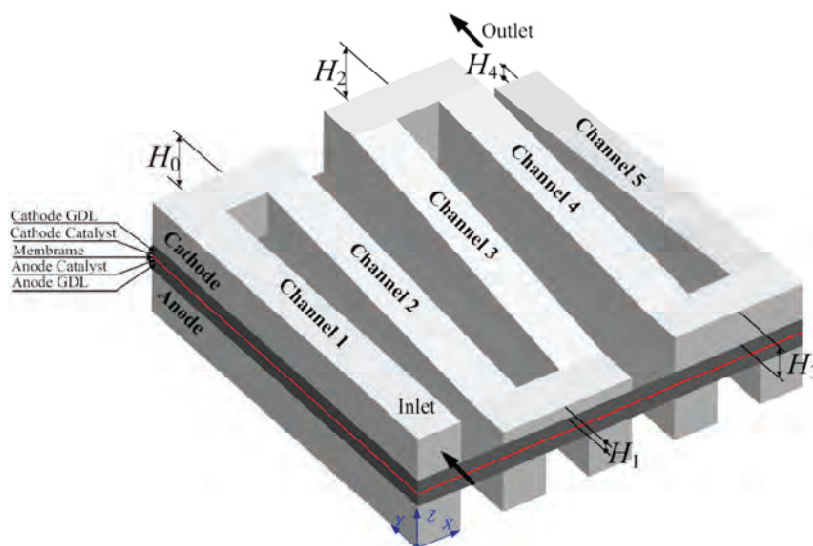


Figura 5-20. Campo de flujo tipo serpentín con diferentes alturas de canal [71]

Fontan et al. [73] analizaron un modelo con idéntica geometría en ánodo y cátodo, compuesta por un canal recto de 1 mm de anchura y 50 mm de longitud, variando la altura de manera progresiva (Figura 5-21). Los resultados mostraron que una inclinación de 0.75° en el canal de flujo puede producir un aumento de casi un 9.5% en la densidad de corriente generada y un aumento de un 8% en la potencia obtenida. Por el contrario, la caída de presión en el canal de flujo se multiplicó por 2 y 3,5 para inclinaciones de 0.5° y 0.75° , respectivamente.

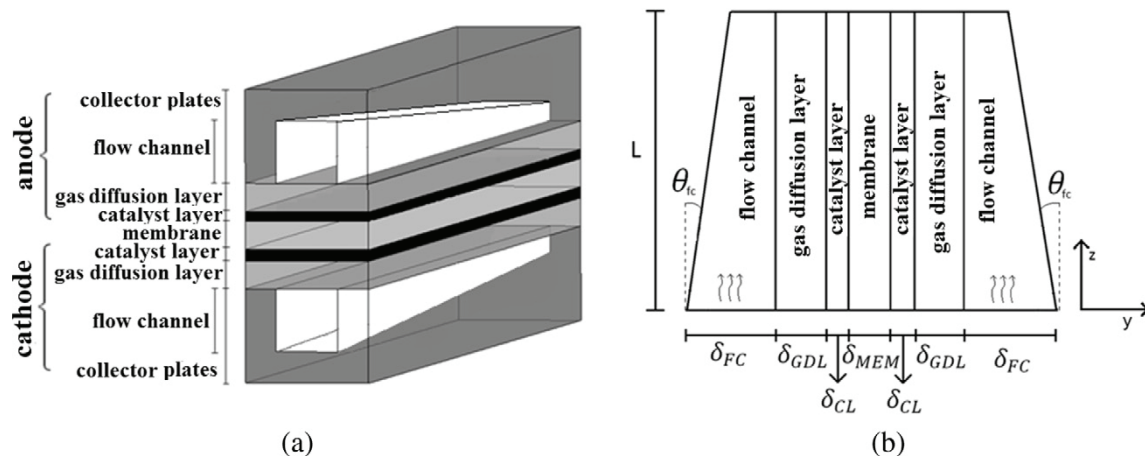


Figura 5-21. Modelo de canal simple recto utilizado: a) en 3D; b) sección transversal [73]

5.6.4. Relación de aspecto de la sección transversal del canal: alto/ancho

En algunos trabajos más recientes se analiza la relación de aspecto de la sección transversal del canal de flujo, tomando como geometría de referencia un campo de flujo con canales de tipo serpentin simple o múltiple.

En Choi et al. [74] se estudió la influencia de la altura y de la anchura del canal sobre un campo de flujo de tipo serpentin de canal múltiple de 25 cm^2 de área reactiva (Figura 5-22). Se hicieron ensayos con alturas de canal diferentes mientras se mantenía constante la anchura del *rib*. Los resultados obtenidos mostraron que con el aumento de la altura del canal, la sección transversal era superior, por lo que la caída de presión disminuía. Este efecto provocó que la fracción de agua líquida a la salida se incrementara, reduciendo ligeramente el rendimiento de la pila. Por el contrario, con el aumento de la anchura del canal la anchura del *rib* era menor. Esto permitió un incremento del flujo convectivo que aumentó el rendimiento de la pila. Para anchuras de canal superiores, la reducida anchura del *rib* potenció una excesiva eliminación del agua en el cátodo y, por tanto, una reducción en el proceso de difusión del agua desde el cátodo al ánodo, lo que provocó una deshidratación de la MEA. En este caso el rendimiento de la pila se vio reducido en una magnitud superior.

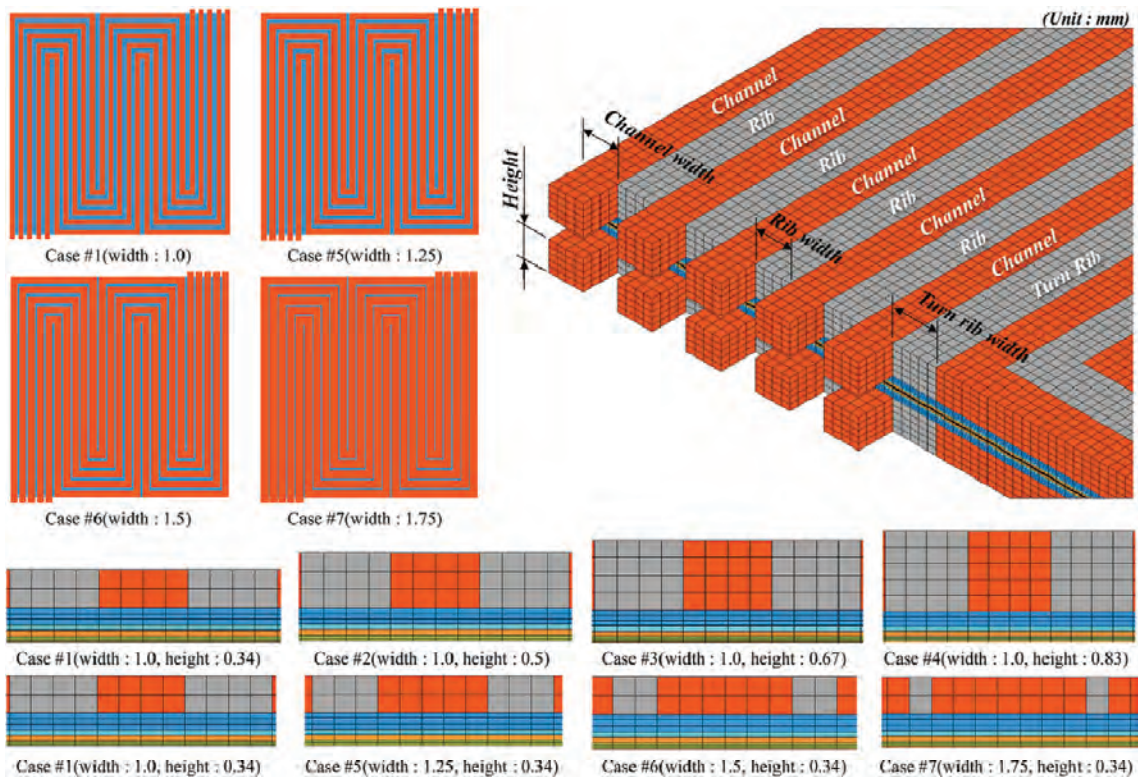


Figura 5-22. Siete campos de flujo de tipo serpentin múltiple (cinco canales) de 25 cm² con diferente anchura y altura de canal [74]

5.7. Nuevas geometrías

Además del análisis de los parámetros geométricos de las geometrías más utilizadas, cada vez son más frecuentes los estudios que investigan sobre variantes geométricas relativas a la forma de los campos de flujo. Estas nuevas geometrías van desde ligeras modificaciones sobre geometrías ya conocidas hasta conceptos completamente diferentes.

En Hu et al. [75] se analizó una geometría básica de campo de flujo con canales de tipo interdigitado al que se le añadieron ranuras que intercomunicaban los diferentes canales (Figura 5-23). Los resultados obtenidos mostraron que esta modificación permitía una distribución del flujo de los reactivos más uniforme.

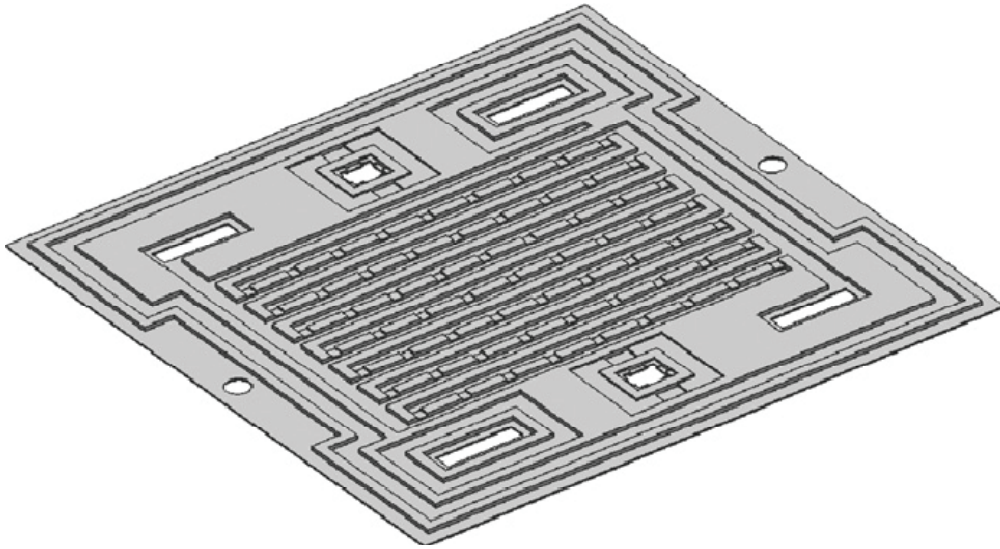


Figura 5-23. Configuración geométrica del modelo con canales interdigitados ranurados [75]

Kuo et al. [76] realizaron un estudio comparativo entre un canal de flujo de paredes rectas y paralelas y otro con una superficie ondulada, tipo wave (Figura 5-24). Los resultados determinaron la aparición de un flujo por convección forzada inducido por la geometría wave. Los resultados de la comparativa mostraron que se mejoró la transferencia de calor y el flujo por convección, obteniendo una distribución de temperatura más uniforme, una reacción catalítica más eficiente, y un aumento de la densidad de corriente y de la potencia obtenida.

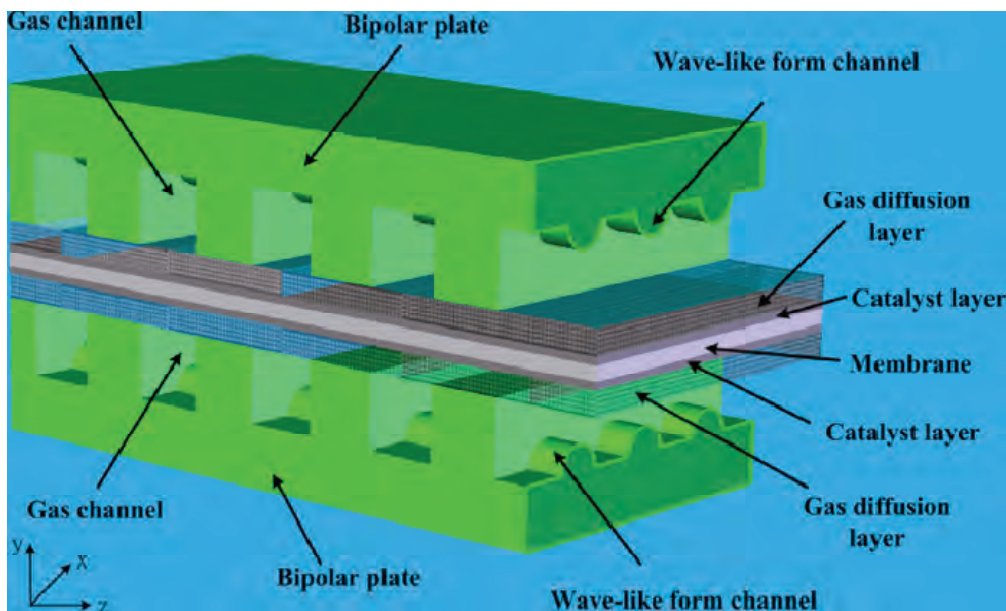


Figura 5-24. Nueva geometría con canales tipo wave [76]

Una variación en la inclinación de los canales de flujo con el objetivo de mejorar la gestión del agua en una pila de tipo PEM se analizó en Bunmark et al. [77]. El diseño utilizado disponía de canales con una inclinación de 20° (Figura 5-25). Se investigaron los efectos de la orientación de los canales inclinados en diferentes direcciones sobre el rendimiento de la pila. Los resultados experimentales mostraron que la modificación del campo de flujo utilizando canales inclinados hacia abajo en el ánodo proporcionaba un mayor rendimiento. La fracción de agua líquida en el ánodo se redujo, permitiendo un aumento de la difusión desde el cátodo hacia el ánodo y, por tanto, una mejora en la hidratación de la membrana y en la conductividad protónica. En cambio, el uso de canales inclinados hacia abajo en el cátodo con el fin de potenciar la eliminación de agua no produjo ninguna mejoría en el rendimiento.

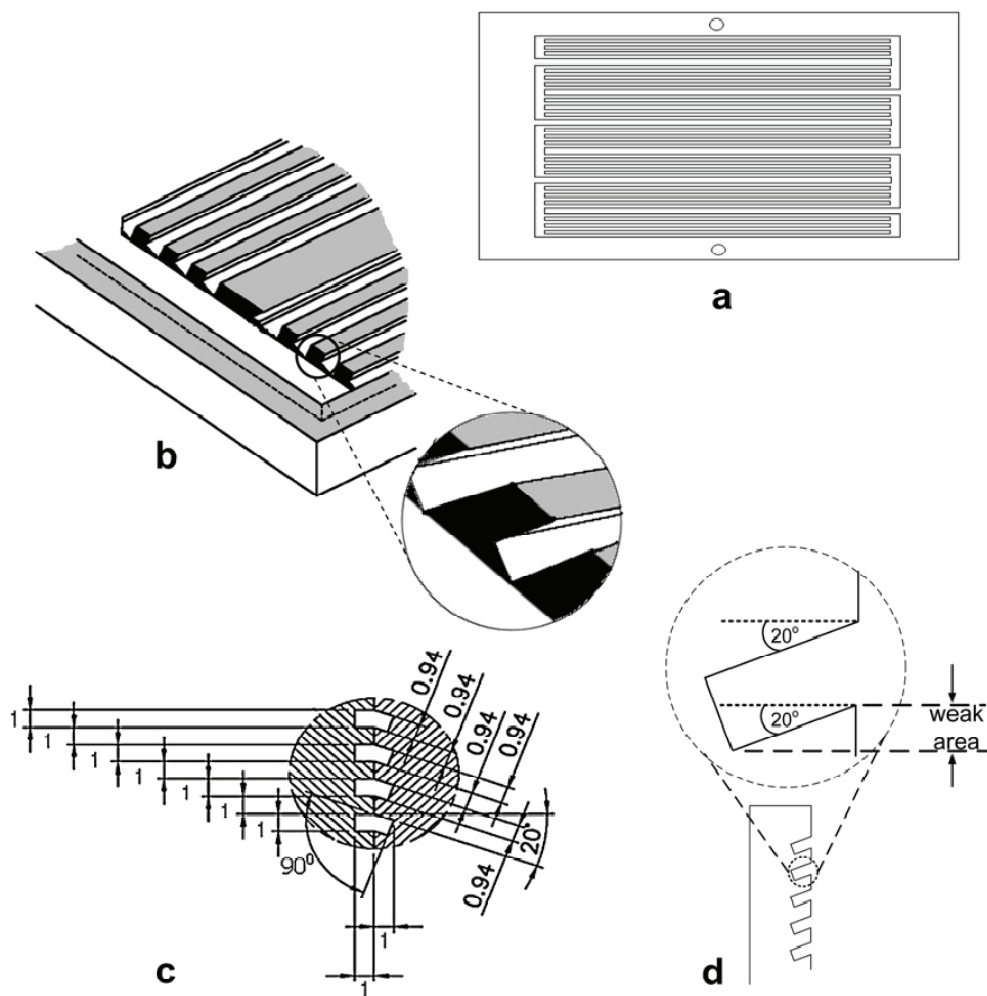


Figura 5-25. Diseño modificado del campo de flujo: (a) Vista frontal de la placa; (b) Detalle de los canales; (c) Sección transversal del montaje de la nueva geometría frente a una geometría estándar; (d) Sección transversal del canal modificado [77]

En Roshandele et al. [78] se realizó un estudio comparativo entre campos de flujo con canales tipo serpentin y paralelos con un nuevo patrón inspirado en distribuciones de flujo existentes en la naturaleza (Figura 5-26 y Figura 5-27). Los resultados indicaron que los campos de flujo inspirados en la naturaleza permiten una distribución de velocidades del flujo más uniforme y un rendimiento mayor. Además, el potencial y la densidad de corriente obtenidos también aumentaron. Con el nuevo diseño, la densidad de potencia obtenida fue superior a la obtenida con los canales de tipo serpentin y paralelos, hasta un 26% y un 56% respectivamente.

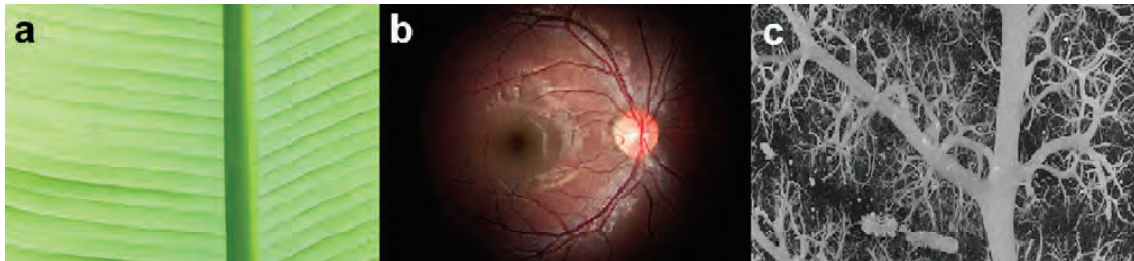


Figura 5-26. Ejemplos de patrones de distribución de flujo en la naturaleza: a) Hoja de banana; b) Distribución de la sangre en la superficie del ojo humano; c) Estructura vascular de los pulmones [78]

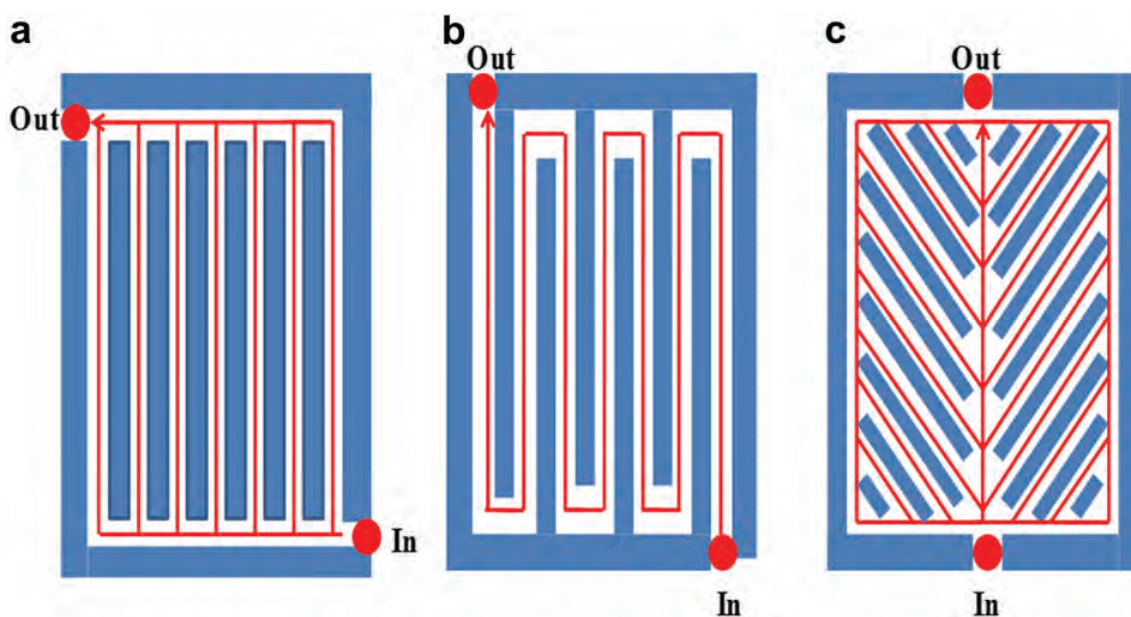


Figura 5-27. Comparación de diferentes campos de flujo: a) Canales paralelos; b) Serpentin; c) Canales de flujo inspirados en la naturaleza [78]

Recientes estudios analizan geometrías completamente diferentes a las tradicionales placas bipolares planas. Khazaei et al. [79, 80] estudiaron el comportamiento de pilas de tipo PEM con sección transversal anular (Figura 5-28). En estos trabajos se analizan, entre otros datos, la influencia del número de conexiones entre las capas difusoras y las placas bipolares. Los resultados muestran que al aumentar dicho número de conexión el rendimiento de la pila de combustible aumenta. En Cano-Andrade et al. [81] se estudiaron campos de flujo con 4, 8 y 12 canales radiales, como se muestran en la Figura 5-29. Otros estudios [82, 83] se dedicaron al análisis de la influencia del número de canales en el rendimiento de pilas de tipo PEM con campos de flujo con canales en espiral (Figura 5-30).

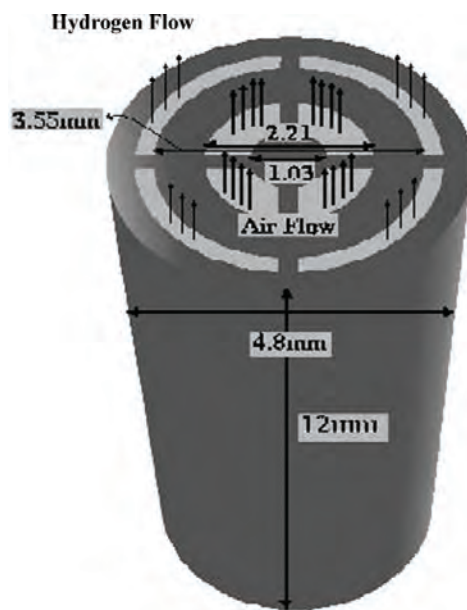


Figura 5-28. Esquema de una pila tipo PEM anular [79, 80]

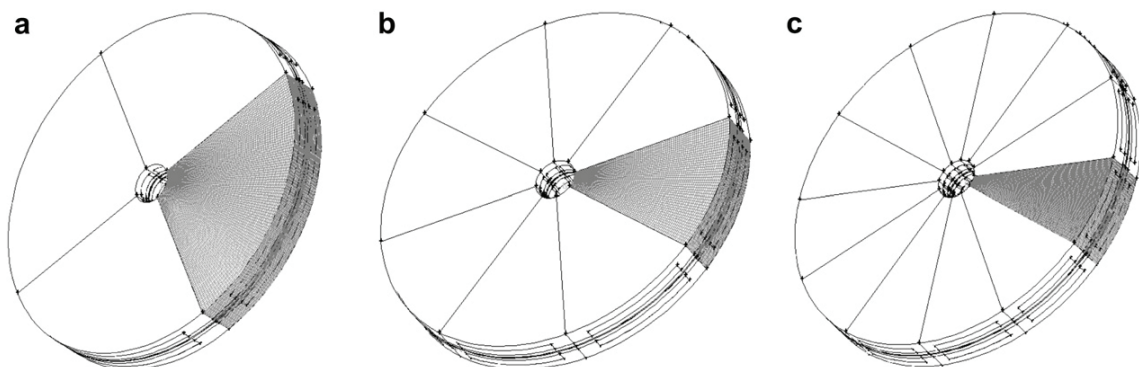


Figura 5-29. Esquema de una pila tipo PEM radial [81]: a) 4 canales; b) 8 canales; c) 12 canales

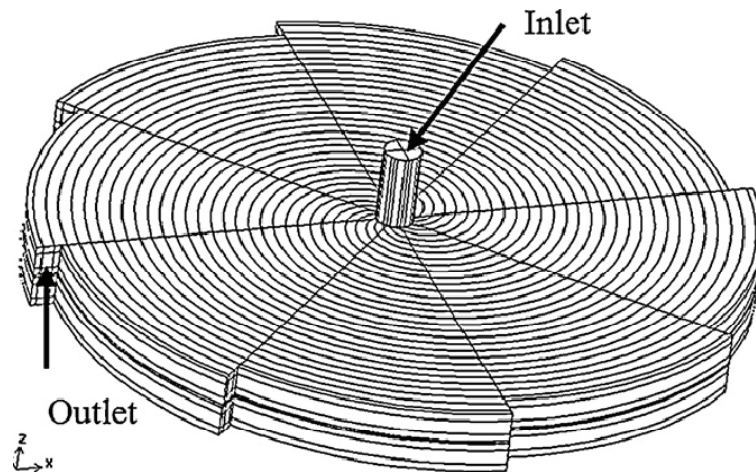


Figura 5-30. Esquema de una pila tipo PEM con 8 canales en espiral [83]

5.8. Conclusiones

Campo de flujo

- La configuración geométrica del campo de flujo apenas tiene influencia a altos potenciales de operación de la pila. Por el contrario, a bajos potenciales de operación, donde las pérdidas por concentración o transporte de masa son el principal factor que determina el rendimiento de la pila, la configuración geométrica afecta significativamente.
- Los campos de flujo que ofrecen una menor pérdida de carga al paso de los reactivos, en general, permiten el desarrollo de caminos preferentes por los que circula la mayor parte del flujo, provocando una mala distribución de los reactivos sobre el área reactiva de la MEA y, por lo tanto, una baja eficiencia de la reacción y un rendimiento menor.
- Con campos de flujo con configuraciones geométricas de tipo serpentin o canales interdigitados, en general, se consiguen distribuciones más uniformes de los reactivos sobre las capas catalíticas. Esto permite obtener mayores valores de densidad de corriente y un aumento en el rendimiento electroquímico de la pila. Por el contrario, ofrecen una mayor caída de presión al paso del flujo, aumentando la energía necesaria para su impulsión, lo que reduce el rendimiento global del sistema. Sin embargo, este aumento en la caída de presión dentro del campo de flujo potencia el flujo por convección o bajo *rib*, mejorando la eliminación del agua residual en el cátodo, aumentando la eficiencia de la reacción electroquímica y la densidad de corriente obtenida.

- En campos de flujo de tipo serpentín tramos de canal más largos entre los cambios de dirección y canales más estrechos potencian el flujo por convección, mejorando el rendimiento de la pila. Así mismo, cambios de dirección en esquina producen mayores pérdidas de carga que los cambios de dirección curvilíneos.
- Evitar el efecto flooding en el cátodo es una de las principales preocupaciones de los diseñadores. Por tanto, es conveniente la aplicación de geometrías diferentes en la zona anódica y catódica. En general, se utilizan para el cátodo geometrías con mayor pérdida de carga que potencien el flujo por convección, porque ayudan a eliminar el excedente de agua producto de la reacción además de mejorar la eficiencia de la reacción electroquímica.
- En general, dado que con el aumento del área reactiva de la pila se obtienen valores menores de densidad de corriente, parece ventajoso trabajar con áreas reactivas reducidas.

Sentido de circulación del flujo

Las configuraciones de circulación de los gases reactivos más analizadas son: flujo en concordancia (co-flow), flujo a contracorriente (counter flow) y flujo cruzado (cross flow). En general, en sistemas con flujo a contracorriente se obtiene una mejor hidratación de la membrana, aumentando la conducción protónica y, por tanto, el rendimiento de la pila.

Longitud del canal y número de canales

En geometrías de tipo serpentín, tramos rectos de canal más largos entre cambios de dirección producen mayores incrementos de presión entre canales adyacentes, lo que potencia el flujo bajo *rib*, la reacción electroquímica y el rendimiento. En general, en este tipo de geometrías, campos con forma rectangular se comportan mejor que los cuadrados. Además, campos de flujo con longitud total del canal menor y con más canales en paralelo ofrecen mejores distribuciones de los reactivos que campos con canales más largos y menor número de canales.

Uso de deflectores en la dirección del flujo

La mayoría de los resultados muestran que debido al bloqueo que los deflectores producen a la corriente de gas, una mayor cantidad de gas es forzada a circular a través de las capas difusoras alcanzando la capa catalítica. Por este motivo, la reacción electroquímica se favorece debido a que el área reactiva útil aumenta, reflejándose en un aumento del rendimiento de la pila. Por otra parte, un excesivo número de deflectores reduce el incremento en la densidad de corriente a bajos voltajes, lo que indica que existe un número óptimo de deflectores, que hace que el rendimiento de la pila aumente. Además, con el número de deflectores se incrementa la pérdida de carga, reduciendo el rendimiento global del sistema.

Forma de la sección transversal

La sección más utilizada sigue siendo la rectangular. Otras formas en la sección transversal pueden presentar mejoras en algunos aspectos concretos del funcionamiento de la pila.

Anchura del canal y del rib

En general, los canales con anchura menor producen mejores resultados. La anchura del *rib* óptima depende en gran medida de la aplicación de la pila de combustible y de las condiciones de funcionamiento. Pilas de combustible que funcionan a altos potenciales de operación, como las utilizadas en aplicaciones espaciales, presentan mejor rendimiento con una anchura de *rib* superior. Por otra parte, en pilas de combustible que funcionen con aire como comburente, la anchura del *rib* debe ser menor que en pilas que operan con oxígeno puro.

Profundidad del canal

En campos de flujo con canales de tipo serpentín, reducciones en la altura del canal de flujo, sobre todo a la salida del canal y en el cátodo principalmente, mejoran la transferencia de masa hacia las capas difusoras, favorecen la eliminación del agua generada, potencian la reacción electroquímica y aumentan la eficiencia de uso de los reactivos, permitiendo obtener mejores resultados en el rendimiento.

Las variaciones en la altura del canal solo tienen efecto apreciable a potenciales de operación bajos, aumentando el valor de la densidad de corriente obtenida. El inconveniente principal es el aumento de la pérdida de carga generado, que reduce la eficiencia global del sistema.

Relación de aspecto de la sección transversal del canal: alto/ancho

En el caso de campos de flujo con canales de tipo serpentín y para unas determinadas condiciones de sección transversal de canal y anchura de *rib* constantes, la relación de aspecto óptima para dicha sección transversal es de 10/6 (altura/anchura).

En efecto, parece evidente que la geometría de los canales de flujo en una PEMFC juega un papel a veces determinante en el rendimiento de la pila. Por lo que, un diseño apropiado de los canales de flujo de una PEMFC puede potenciar las velocidades de transporte de reactivo en el propio canal así como en la GDL (Gas Diffusion Layer) antes de alcanzar la capa catalítica, donde tiene lugar la reacción. También puede ser beneficioso en la gestión de agua del cátodo, con el fin de que se elimine de forma adecuada. Por otra parte, una distribución homogénea del gas en el canal de flujo, puede proporcionar a su vez, una densidad de corriente homogénea en toda el área reactiva y, por tanto, una distribución uniforme de la temperatura, ocasionando menos tensiones mecánicas en la MEA y prolongando la vida útil de la PEMFC.

5.9. Referencias

- [1] A. R. Maher, Sadiq Al-Baghdadi, *CFD Models for Analysis and Design of PEM Fuel Cells*, Nova Science Publisher, Inc., (2008)
- [2] F. Barbir, *PEM fuel cells: theory and practice*, Elsevier Academic Press (2005).
- [3] Watkins DS, Dircks KW, Epp DG. US Patent No. 5.108.849, 1992.
- [4] Watkins DS, Dircks KW, Epp DG. US Patent No. 4.988.583, 1991.
- [5] Xianguo Li, Imran Sabir, *International Journal of Hydrogen Energy*, 30 (2005), 359-371.
- [6] Hwang J.J., Hwang H.S., Parametric studies of a double-cell stack of PEMFC using Grafoil™ flow-field plates, *Journal of Power Sources*, 104 (2002), 24-32
- [7] S. Shimpalee, S. Greenway, D. Spuckler, J. W. Van Zee, Predicting water and current distributions in a commercial-size PEMFC, *Journal of Power Sources*, 135 (2004), 79-87
- [8] Dongryul Lee, Joongmyeon Bae, Visualization of flooding in a single cell and stacks by using a newly-designed transparent PEMFC, *International Journal of Hydrogen Energy* (2011), doi:10.1016/j.ijhydene.2011.09.073
- [9] Xianguo Li, Imran Sabir, Jaewan Park, A flow channel design procedure for PEM fuel cells with effective water removal, *Journal of Power Sources*, 163 (2007), 933-942
- [10] Lin Wang, Hongtan Liu, Performance studies of PEM fuel cells with interdigitated flow fields, *J Power Sources*, 134 (2004), 185–196
- [11] Shou-Shing Hsieh, Sheng-Huang Yang, Jenn-Kun Kuo, Chin-Feng Huang, Huang-Hsiu Tsai, Study of operational parameters on the performance of micro PEMFCs with different flow fields, *Energy Conversion and Management*, 47 (2006), 1868–1878
- [12] Guilin Hu, Jianren Fan, Song Chen, Yongjiang Liu, Kefa Cen, Three-dimensional numerical analysis of proton exchange membrane fuel cells (PEMFCs) with conventional and interdigitated flow fields, *Journal of Power Sources*, 136 (2004), 1–9
- [13] Xiaochun Zhou, Wenzhe Ouyang, Changpeng Liu, Tianhong Lu, Wei Xing, Lijia An, A new flow field and its two-dimension model for polymer electrolyte membrane fuel cells (PEMFCs), *Journal of Power Sources*, 158 (2006), 1209–1221

- [14] E. Birgersson, M. Vynnycky, A quantitative study of the effect of flow-distributor geometry in the cathode of a PEM fuel cell, *Journal of Power Sources*, 153 (2006), 76–88
- [15] Wei-Mon Yan, Ching-Hung Yang, Chyi-Yeou Soong, Falin Chen, Sheng-Chin Mei, Experimental studies on optimal operating conditions for different flow field designs of PEM fuel cells, *Journal of Power Sources*, 160 (2006), 284–292
- [16] Wei-Mon Yan, Chi-Yen Chen, Sheng-Chin Mei, Chyi-Yeou Soong, Falin Chen, Effects of operating conditions on cell performance of PEM fuel cells with conventional or interdigitated flow field, *Journal of Power Sources*, 162 (2006), 1157–1164
- [17] Atul Kumar, Ramana G. Reddy, Effect of gas flow-field design in the bipolar/end plates on the steady and transient state performance of polymer electrolyte membrane fuel cells, *Journal of Power Sources*, 155 (2006), 264–271
- [18] S. Maharudrayya, S. Jayanti, A.P. Deshpande, Pressure drop and flow distribution in multiple parallel-channel configurations used in proton-exchange membrane fuel cell stacks, *Journal of Power Sources*, 157 (2006), 358–367
- [19] Yuh Ming Ferng, Ay Su, A three-dimensional full-cell CFD model used to investigate the effects of different flow channel designs on PEMFC performance, *International Journal of Hydrogen Energy*, 32 (2007), 4466 – 4476
- [20] D.H. Jeon, S. Greenway, S. Shimpalee, J.W. Van Zee, The effect of serpentine flow-field designs on PEM fuel cell performance, *International Journal of Hydrogen Energy*, 33 (2008), 1052-1066
- [21] Xiao-Dong Wang, Yuan-Yuan Duan, Wei-Mon Yan, Xiao-Feng Peng, Local transport phenomena and cell performance of PEM fuel cells with various serpentine flow field designs, *Journal of Power Sources*, 175 (2008), 397–407
- [22] Junye Wang, Pressure drop and flow distribution in parallel-channel configurations of fuel cells: U-type arrangement, *International Journal of Hydrogen Energy*, 33 (2008), 6339-6350
- [23] Jer-Huan Jang, Wei-Mon Yan, Hung-Yi Li, Wei-Che Tsai, Three-dimensional numerical study on cell performance and transport phenomena of PEM fuel cells with conventional flow fields, *International Journal of Hydrogen Energy*, 33 (2008), 156 – 164

- [24] Weigang Zhang, Peng Hu, Xinmin Lai, Linfa Peng, Analysis and optimization of flow distribution in parallel-channel configurations for proton exchange membrane fuel cells, *Journal of Power Sources*, 194 (2009), 931–940
- [25] Guangsheng Zhang, Liejin Guo, Bin Ma, Hongtan Liu, Comparison of current distributions in proton exchange membrane fuel cells with interdigitated and serpentine flow fields, *Journal of Power Sources*, 188 (2009), 213–219
- [26] Ana M. López, Félix Barreras, Antonio Lozano, Juan A. García, Luis Valiño, Radu Mustata, Comparison of water management between two bipolar plate flow-field geometries in proton exchange membrane fuel cells at low-density current range, *Journal of Power Sources*, 192 (2009), 94–99
- [27] Xiao-Dong Wang, Xin-Xin Zhang, Wei-Mon Yan, Duu-Jong Lee, Ay Su, Determination of the optimal active area for proton exchange membrane fuel cells with parallel, interdigitated or serpentine designs, *International Journal of Hydrogen Energy*, 34 (2009), 3823 – 3832
- [28] Rajesh Boddu, Uday Kumar Marupakula, Benjamin Summers, Pradip Majumdar, Development of bipolar plates with different flow channel configurations for fuel cells, *Journal of Power Sources*, 189 (2009), 1083–1092
- [29] Andrew Higier, Hongtan Liu, Direct measurement of current density under the land and channel in a PEM fuel cell with serpentine flow fields, *Journal of Power Sources*, 193 (2009), 639–648
- [30] Yuhao Lu, Ramana G. Reddy, Performance of micro-PEM fuel cells with different flow fields, *Journal of Power Sources*, 195 (2010), 503–508
- [31] Justo Lobato, Pablo Cañizares, Manuel A. Rodrigo, F. Javier Pinar, Esperanza Mena, Diego Úbeda, Three-dimensional model of a 50 cm² high temperatura PEM fuel cell. Study of the flow channel geometry influence, *International Journal of Hydrogen Energy*, 35 (2010), 5510 – 5520
- [32] Seungjae Lee, Taeyoung Kim, Heekyung Park, Comparison of multi-inlet and serpentine channel design on water production of PEMFCs. *Chemical Engineering Science* (2011), doi:10.1016/j.ces.2011.01.007
- [33] Shou-Shing Hsieh, Bing-Shyan Her, Yi-Ji Huang, Effect of pressure drop in different flow fields on water accumulation and current distribution for a micro PEM fuel cell, *Energy Conversion and Management*, 52 (2011), 975–982

- [34] Rodolfo Taccani, Nicola Zuliani, Effect of flow field design on performances of high temperature PEM fuel cells: Experimental analysis, *International Journal of Hydrogen Energy*, 36 (2011), 10282 – 10287
- [35] Bladimir Ramos-Alvarado, Abel Hernandez-Guerrero, Daniel Juarez-Robles, Peiwen Li, Numerical investigation of the performance of symmetric flow distributors as flow channels for PEM fuel cells, *International Journal of Hydrogen Energy* (2011), doi:10.1016/j.ijhydene.2011.09.080
- [36] Justo Lobato, Pablo Cañizares, Manuel A. Rodrigo, F. Javier Pinar, Diego Úbeda, Study of flow channel geometry using current distribution measurement in a high temperature polymer electrolyte membrane fuel cell, *Journal of Power Sources*, 196 (2011), 4209–4217
- [37] S.W. Cha, R. O'Hayre, Y. Saito, F.B. Prinz, The scaling behavior of flow patterns: a model investigation, *Journal of Power Sources*, 134 (2004), 57–71
- [38] Mingruo Hu, Anzhong Gu, Minghua Wang, Xinjian Zhu, Lijun Yu, Three dimensional, two phase flow mathematical model for PEM fuel cell: Part I. Model development, *Energy Conversion and Management*, 45 (2004), 1861–1882
- [39] Mingruo Hu, Xinjian Zhu, Minghua Wang, Anzhong Gu, Lijun Yu, Three dimensional, two phase flow mathematical model for PEM fuel cell: Part II. Analysis and discussion of the internal transport mechanisms, *Energy Conversion and Management*, 45 (2004), 1883–1916
- [40] Xiao-Dong Wang, Jin-Liang Xu, Wei-Mon Yan, Duu-Jong Lee, Ay Su, Transient response of PEM fuel cells with parallel and interdigitated flow field designs, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 54 (2011), 2375–2386
- [41] Shan-Hai Ge, Bao-Lian Yi, A mathematical model for PEMFC in different flow modes, *Journal of Power Sources*, 124 (2003), 1-11
- [42] J. Scholta, F. Häussler, W. Zhang, L. Küppers, L. Jörissen, W. Lehnert, Development of a stack having an optimized flow field structure with low cross transport effects, *Journal of Power Sources*, 155 (2006), 60–65
- [43] Arnaud Morin, Feina Xu, Gérard Gebel, Olivier Diat, Influence of PEMFC gas flow configuration on performance and water distribution studied by SANS: Evidence of the effect of gravity, *International Journal of Hydrogen Energy*, 36 (2011), 3096 – 3109

- [44] Luis Valiño, Radu Mustata, María Isabel Gil, Jesús Martín, Effect of the relative position of oxygen-hydrogen plate channels and inlets on a PEMFC, *International Journal of Hydrogen Energy*, 35 (2010), 11425 – 11436
- [45] Feser J.P., Prasad A.K., Advani S.G., On the relative influence of convection in serpentine flow fields of PEM fuel cells, *Journal of Power Sources*, 161 (2006), 404–412
- [46] Lin Wang, et al., A parametric study of PEM fuel cell performances, *International Journal of Hydrogen Energy*, 28 (2003), 1263 – 1272
- [47] S. Shimpalee, S. Greenway, J.W. Van Zee, The impact of channel path length on PEMFC flow-field design, *Journal of Power Sources*, 160 (2006), 398–406
- [48] C.Y. Soong, W.M. Yanb, C.Y. Tsengb, H.C. Liub, Falin Chenc, H.S. Chud, Analysis of reactant gas transport in a PEM fuel cell with partially blocked fuel flow channels, *Journal of Power Sources*, 143 (2005), 36–47
- [49] Hui-Chung Liu, Wei-Mon Yan, Chyi-Yeou Soong, Falin Chen, Effects of baffle-blocked flow channel on reactant transport and cell performance of a proton exchange membrane fuel cell, *Journal of Power Sources*, 142 (2005), 125–133
- [50] Wang Xiao-Dong, Duan Yuan-Yuan, Yan Wei-Mon, Novel serpentine-baffle flow field design for proton exchange membrane fuel cells, *Journal of Power Sources*, 173 (2007), 210–221
- [51] Jer-Huan Jang, Wei-Mon Yan, Hung-Yi Li, Yeh-Chi Chou, Humidity of reactant fuel on the cell performance of PEM fuel cell with baffle-blocked flow field designs, *Journal of Power Sources*, 159 (2006), 468–477
- [52] Wei-Mon Yan, Sheng-Chin Mei, Chyi-Yeou Soong, Zhong-Sheng Liu, Datong Song, Experimental study on the performance of PEM fuel cells with interdigitated flow channels, *Journal of Power Sources*, 160 (2006), 116–122
- [53] Vilasinee Thitakamol, Apichai Therdthianwong, Supaporn Therdthianwong, Mid-baffle interdigitated flow fields for proton exchange membrane fuel cells, *International Journal of Hydrogen Energy*, 36 (2011), 3614 – 3622
- [54] Hontanon E. et al., Optimisation of flow field in PEM fuel cell using CFD techniques, *J Power Sources*, 86 (2000), 363–8.

- [55] Atul Kumar, Ramana G. Reddy, Effect of channel dimensions and shape in the flow-field distributor on the performance of polymer electrolyte membrane fuel cells, *Journal of Power Sources*, 113 (2003), 11-18
- [56] Dewan Hasan Ahmed, Hyung Jin Sung, Effects of channel geometrical configuration and shoulder width on PEMFC performance at high current density, *Journal of Power Sources*, 162 (2006), 327–339
- [57] J.P. Owejan, T.A. Trabold, D.L. Jacobson, M. Arif, S.G. Kandlikar, Effects of flowfield and diffusion layer properties on water accumulation in a PEM fuel cell, *International Journal of Hydrogen Energy*, 32 (2007), 4489 – 4502
- [58] S. Shimpalee, V. Lilavivat, J.W. Van Zee, H. McCrabb, A. Lozano-Morales, Understanding the effect of channel tolerances on performance of PEMFCs, *International Journal of Hydrogen Energy*, 36 (2011), 12512 – 12523
- [59] Young-Gi Yoon, Won-Yong Lee, Gu-Gon Park, Tae-Hyun Yang, Chang-Soo Kim, Effects of channel and rib widths of flow field plates on the performance of a PEMFC, *International Journal of Hydrogen Energy*, 30 (2005), 1363 – 1366
- [60] Young-Gi Yoon, Won-Yong Lee, Gu-Gon Park, Tae-Hyun Yang, Chang-Soo Kim, Effects of channel and rib widths of flow field plates on the performance of a PEMFC, *International Journal of Hydrogen Energy*, 30 (2005), 1363 – 1366
- [61] Wei Sun, Brant A. Peppley, Kunal Karan, Modeling the influence of GDL and flow-field plate parameters on the reaction distribution in the PEMFC cathode catalyst layer, *Journal of Power Sources*, 144 (2005), 42–53
- [62] Wang Ying, Tae-Hyun Yang, Won-Yong Lee, J. Ke, Chang-Soo Kim, Three-dimensional analysis for effect of channel configuration on the performance of a small air-breathing proton exchange membrane fuel cell (PEMFC), *Journal of Power Sources*, 145 (2005), 572–581
- [63] Sungho Lee, Heeseok Jeong, Byungki Ahn, Taewon Lim, Youngjin Son, Parametric study of the channel design at the bipolar plate in PEMFC performances, *International Journal of Hydrogen Energy*, 33 (2008), 5691 – 5696
- [64] Andrew Higier, Hongtan Liu, Optimization of PEM fuel cell flow field via local current density measurement, *International Journal of Hydrogen Energy*, 35 (2010), 2144 – 2150

- [65] J. Scholta, G. Escher, W. Zhang, L. Küppers, L. Jörissen, W. Lehnert, Investigation on the influence of channel geometries on PEMFC performance, *Journal of Power Sources*, 155 (2006), 66–71
- [66] S. Shimpalee, J.W. Van Zee, Numerical studies on rib & channel dimension of flow-field on PEMFC performance, *International Journal of Hydrogen Energy*, 32 (2007), 842 – 856
- [67] Xiao-Dong Wang, Yuan-Yuan Duan, Wei-Mon Yan, Numerical study of cell performance and local transport phenomena in PEM fuel cells with various flow channel area ratios, *Journal of Power Sources*, 172 (2007), 265–277
- [68] Wei-Mon Yan, Hui-Chung Liu, Chyi-Yeou Soong, Falin Chen, C.H. Cheng, Numerical study on cell performance and local transport phenomena of PEM fuel cells with novel flow field designs, *Journal of Power Sources*, 161 (2006), 907-919
- [69] H.C. Liu, W.M. Yan, C.Y. Soong, Falin Chen, H.S. Chu, Reactant gas transport and cell performance of proton exchange membrane fuel cells with tapered flow field design, *Journal of Power Sources*, 158 (2006), 78–87
- [70] Wei-Mon Yan, Hung-Yi Li, Po-Chiao Chiu, Xiao-Dong Wang, Effects of serpentine flow field with outlet channel contraction on cell performance of proton exchange membrane fuel cells, *Journal of Power Sources*, 178 (2008), 174–180
- [71] Xiao-Dong Wang, Yu-Xian Huang, Chin-Hsiang Cheng, Jiin-Yuh Jang, Duu-Jong Lee, Wei-Mon Yan, Ay Su, An inverse geometry design problem for optimization of single serpentine flow field of PEM fuel cell, *International Journal of Hydrogen Energy*, 35 (2010), 4247–4257
- [72] Lin Lin, Xin Xin Zhang, Hu Ting Feng, Xiao-Dong Wang, Optimization of a serpentine flow field with variable channel heights and widths for PEM fuel cells. *Science China Technological Sciences*, 53 (2010), 453-460
- [73] Éliton Fontana, Erasmo Mancusi, Adriano da Silva et al., Study of the effects of flow channel with non-uniform cross-sectional area on PEMFC species and heat transfer, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 54 (2011), 4462–4472
- [74] Kap-Seung Choi, Hyung-Man Kim, Sung-Mo Moon, Numerical studies on the geometrical characterization of serpentine flow-field for efficient PEMFC, *International Journal of Hydrogen Energy*, 36 (2011), 1613–1627

- [75] Peng Hu, Linfa Peng, Weigang Zhang, Xinmin Lai, Optimization design of slotted-interdigitated channel for stamped thin metal bipolar plate in proton exchange membrane fuel cell, *Journal of Power Sources*, 187 (2009), 407–414
- [76] Jenn-Kun Kuo, Tzu-Hsiang Yen, Cha’o-Kuang Chen, Three-dimensional numerical analysis of PEM fuel cells with straight and wave-like gas flow fields channels, *Journal of Power Sources*, 177 (2008), 96–103
- [77] Natthawoot Bunmark, Sunun Limtrakul, Michael W. Fowler, Terdthai Vatanatham, Jeff Gostick, Assisted water management in a PEMFC with a modified flow field and its effect on performance, *International Journal of Hydrogen Energy*, 35 (2010), 6887–6896
- [78] R. Roshandel, F. Arbabi, G. Karimi Moghaddam, Simulation of an innovative flow-field design based on a bio inspired pattern for PEM fuel cells, *Renewable Energy*, 41 (2012), 86-95
- [79] I. Khazaei, M. Ghazikhani, Performance improvement of proton exchange membrane fuel cell by using annular shaped geometry, *Journal of Power Sources*, 196 (2011), 2661–2668
- [80] I. Khazaei, M. Ghazikhani, M. NasrEsfahani, Effect of gas diffusion layer and membrane properties in an annular proton exchange membrane fuel cell, *Appl. Surf. Sci.* (2011), doi:10.1016/j.apsusc.2011.03.062
- [81] S. Cano-Andrade, A. Hernandez-Guerrero, M.R. von Spakovsky, C.E. Damian-Ascencio, J.C. Rubio-Arana, Current density and polarization curves for radial flow field patterns applied to PEMFCs (Proton Exchange Membrane Fuel Cells), *Energy*, 35 (2010), 920–927
- [82] V.H. Rangel-Hernandez, C. Damian-Ascencio, D. Juarez-Robles, A. Gallegos-Muñoz, A. Zaleta-Aguilar, H. Plascencia-Mora, Entropy generation analysis of a proton exchange membrane fuel cell (PEMFC) with a fermat spiral as a flow distributor, *Energy*, 36 (2011), 4864-4870
- [83] Daniel Juarez-Robles, Abel Hernandez-Guerrero, Bladimir Ramos-Alvarado, Francisco Elizalde-Blancas, Cesar E. Damian-Ascencio, Multiple concentric spirals for the flow field of a proton exchange membrane fuel cell, *Journal of Power Sources*, 196 (2011), 8019– 8030



Capítulo 6

Análisis numérico de la influencia de los parámetros geométricos de la sección transversal del canal de flujo en una PEMFC

Índice

CAPÍTULO 6: Análisis numérico de la influencia de los parámetros geométricos de la sección transversal del canal de flujo en una PEMFC	151
6.1. Introducción.....	151
6.2. Modelo matemático	152
6.2.1. Geometría y operación	153
6.3. Resultados y discusión	157
6.4. Conclusiones	179
6.5. Referencias	180

CAPÍTULO 6: Análisis numérico de la influencia de los parámetros geométricos de la sección transversal del canal de flujo en una PEMFC

6.1. Introducción

El rendimiento de una pila de combustible de tipo PEM depende de múltiples factores, entre los que se incluyen las condiciones de operación, los fenómenos de transporte en el interior de la pila, la cinética de la reacción electroquímica, el ensamblaje de la MEA y la geometría de los canales de flujo [1].

Los canales de flujo en una PEMFC, que se utilizan para aportar el combustible (hidrógeno) al ánodo y el oxígeno al cátodo, están integrados en las placas bipolares. Éstas son uno de los componentes clave de una pila de combustible, ya que realiza diferentes funciones esenciales para el buen funcionamiento del sistema: servir de soporte mecánico al stack, mantener separados los diferentes reactantes, distribuir los reactantes a lo largo de la superficie catalizadora, conducir la corriente eléctrica generada o gestionar el agua y el calor producidos en el interior de la pila. Algunas de estas funciones están más asociadas a las propiedades fisicoquímicas del material. Otras, en cambio, están íntimamente ligadas a la geometría de los canales de flujo [2].

Un diseño apropiado de los canales de flujo de una PEMFC permitirá potenciar las velocidades de transporte de reactivo en el propio canal así como en la GDL antes de alcanzar la capa catalítica, donde tiene lugar la reacción. También será beneficioso en la gestión de agua del cátodo, con el fin de que se elimine de forma adecuada. Además, una distribución homogénea del gas en el canal de flujo, proporcionará a su vez, una densidad de corriente homogénea en toda el área reactiva y, por tanto, una distribución uniforme de la temperatura, que ocasionará menos tensiones mecánicas en la MEA, prolongando la vida útil de la PEMFC.

Se han realizado múltiples estudios sobre el impacto que tienen las diferentes variables geométricas de los canales de flujo en distintos aspectos del funcionamiento de una PEMFC. En el capítulo anterior se presenta una recopilación de los resultados más importantes.

Yoon et al. analizaron el efecto de diferentes configuraciones de canal/rib (espacio entre canales) en el rendimiento de una PEMFC [3]. Ferng et al. analizaron el efecto de diferentes configuraciones de canales de flujo en una monocelda de 25 cm² [4]. Shimpalee et al. analizaron un modelo 3D con canales de flujo en forma de serpentin de 480 cm² [5] y otro

modelo de 200 cm² con diferente número de canales y longitudes [6]. Shimpalee y Van Zee [7] estudiaron numéricamente cómo los canales de flujo con diferentes secciones transversales de canal/rib afectan al rendimiento y distribución de especies en diferentes regímenes de funcionamiento de la PEMFC. D.H. Jean et al. [8] analizaron diferentes configuraciones de canales de flujo (canal simple, canal doble, canal simple cíclico y canales simples simétricos) y su influencia en el funcionamiento de la PEMFC. Sungho Lee et al. [9] estudiaron el efecto de diferentes configuraciones de parámetros geométricos en el funcionamiento de una PEMFC con una configuración de canal simple derecho. Recientes estudios analizan la influencia de la configuración de la sección transversal del canal de flujo [10] y el efecto de la posición relativa de los flujos en el ánodo y cátodo [11,12].

Con la innovación en el diseño de nuevos canales de flujo se está consiguiendo también incrementar el flujo de gas por convección bajo *rib* de la pila (***cross-leakage flow***) [13,14,15], facilitando así tanto el transporte de masa al electrodo como la eliminación del agua, evitando problemas de acceso de los reactivos a las capas catalíticas por acumulación de agua (flooding). Por lo tanto, potenciar los procesos convectivos de gases a través de las capas de difusión GDL mediante la optimización del canal de flujo es una manera efectiva también de reducir el flooding en el cátodo, incrementar el transporte de masa, y por lo tanto mejorar el rendimiento y la estabilidad de operación de las PEMFC.

El objetivo de este estudio es investigar la influencia de la configuración de la sección transversal del canal de flujo en el funcionamiento de una PEMFC con canales de flujo de tipo serpentin simple. Para ello, se han analizado diez modelos con canales de flujo de tipo serpentin simple con relaciones de altura/anchura del canal diferentes, manteniendo constantes el área de la sección transversal del canal de flujo, el área reactiva, la anchura de *rib* y las condiciones de operación (presión, temperatura y humedad relativa de los reactivos).

6.2. Modelo matemático

El modelo tridimensional de CFD utilizado resuelve un modelo representativo de la PEMFC que incluye las ecuaciones de conservación de la 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 y validadas en los trabajos de S. Shimpalee et al. [5,7,16,17]. 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 una película 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.

Se ha utilizado una técnica de volumen de control basada en el programa comercial, STAR-CD (versión 3.26) [18] junto con el módulo experto para PEMFC (es-pemf versión 2.2) [19] para resolver el modelo matemático basado en el acoplamiento de las ecuaciones fluidodinámicas y las ecuaciones representativas de los procesos específicos de transporte y reacciones electroquímicas de la PEMFC. Este software requiere especificar los términos fuente para las ecuaciones de transporte de especies y de generación de calor originadas por pérdidas eléctricas [7,16,19]. Se dispone también de subrutinas adicionales en el módulo estándar de es-pemfc para calcular el sobrepotencial, permeabilidad y difusividad efectiva de gas.

6.2.1. Geometría y operación

En este estudio se han analizado 10 variantes del modelo correspondiente a una pila de combustible con un área reactiva de 256 mm^2 , con placas con canales de flujo de tipo serpentin simple. En todos los casos se ha mantenido constante la sección transversal del canal de flujo (1.06 mm^2), la anchura del *rib* o separación entre canales (1.33 mm), el área reactiva (256 mm^2) y las condiciones de operación. La longitud del canal de flujo es diferente en cada modelo para mantener la sección reactiva constante, por lo que el volumen contenido en el canal de flujo es diferente para cada modelo.

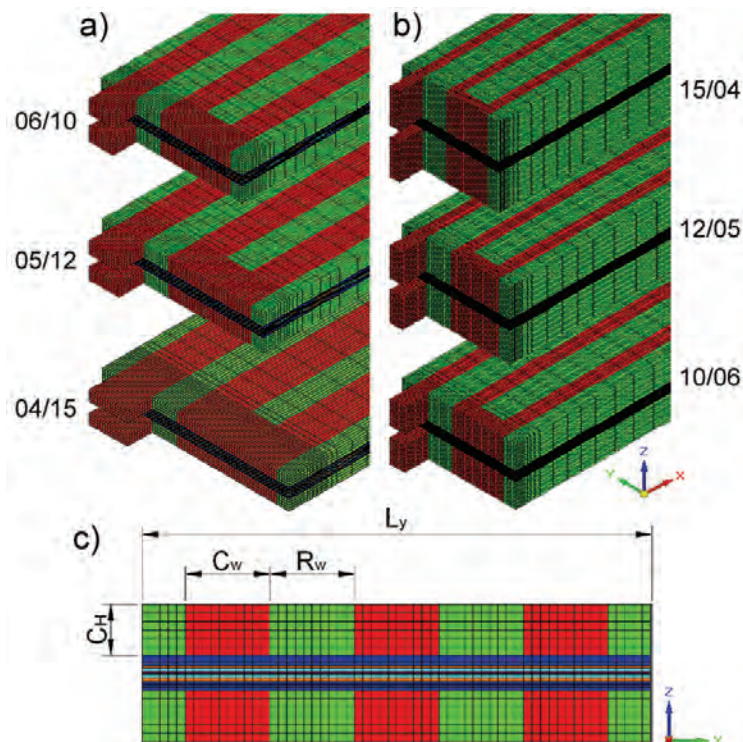


Figura 6-1. Configuración geométrica de los modelos analizados: a) Modelos con sección transversal en posición horizontal, MPH; b) Modelos con sección transversal en posición vertical, MPV; c) Esquema de la sección transversal y parámetros: C_H : Altura del canal, C_w : Anchura del canal, R_w : Anchura del *rib*, L_y : Anchura del área reactiva

En la Tabla 6-1 se muestran los parámetros de diseño de los diferentes modelos analizados, donde se incluye el tiempo de residencia. Los primeros cinco modelos tienen dispuesta la sección transversal del canal en posición horizontal ($C_H < C_W$; modelo tipo MPH). El resto tienen dispuesta la sección transversal del canal en posición vertical ($C_H > C_W$; modelo tipo MPV). De todos los modelos sometidos al análisis preliminar de las curvas de polarización, los destacados en negrita en la Tabla 6-1 se han seleccionado para un análisis en profundidad de las diferentes variables que intervienen en el funcionamiento de la pila de combustible. En la Figura 6-1 c) se muestra un esquema de la sección transversal de los modelos analizados y los parámetros considerados.

Tabla 6-1. Parámetros de diseño de los canales de flujo C_H : Altura del canal, C_W : Anchura del canal, C_L : Longitud del canal, L_y : Anchura del área reactiva (MEA), L_x : Longitud del área reactiva (MEA)

Sección transversal	Modelo	Canal de flujo			MEA		Tiempo de residencia (s)
		C_H (mm)	C_W (mm)	C_L (mm)	L_y (mm)	L_x (mm)	
Pos. Horizontal ($C_H < C_W$) MPH	02/30	0.27	4	45.3	16	16	0.11
	03/20	0.40	2.66	61.3	12	21.33	0.15
	04/15	0.53	2	74.1	10	25.6	0.17
	05/12	0.67	1.60	84.6	8.8	29.1	0.19
	06/10	0.80	1.33	93.3	8	32	0.21
Pos. Vertical ($C_H > C_W$) MPV	10/06	1.33	0.80	117.3	6.4	40	0.26
	12/05	1.60	0.67	125.3	6	42.67	0.28
	15/04	2	0.53	134.5	5.6	45.72	0.30
	20/03	2.66	0.40	145	5.2	49.23	0.32
	30/02	4	0.27	157.3	4.8	53.33	0.34

Partiendo de un modelo de tipo MPH con canal de 0.80 mm de alto y 1.33 mm de ancho se derivan otros cuatro modelos en los que, manteniendo constante la sección del canal de flujo,

se aumenta el ancho del canal a la vez que se disminuye la altura del mismo. En la Figura 6-1 a) se muestran tres de ellos.

Partiendo de un modelo de tipo MPV con canal de 1.33 mm de alto y 0.8 mm de ancho se derivan otros cuatro modelos en los que, manteniendo constante la sección del canal de flujo, se disminuye el ancho del canal a la vez que se aumenta la altura del mismo. En la Figura 6-1 b) se muestran tres de ellos.

Las propiedades de los materiales utilizados en la simulación de los diferentes modelos se detallan en la Tabla 6-2. En la Tabla 6-3 se recogen las condiciones de operación de ánodo y cátodo para una intensidad de corriente media (I_{avg}) de 0.6 A cm^{-2} .

Tabla 6-2. Detalles geométricos y propiedades de los materiales: GDL (Gas Diffusion Layer) y MEA (Membrane Electrode Assembly)

Propiedades	Valor
Densidad de las placas (g cm^{-3})	0.2
Conductividad de las placas ($\text{W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$)	5.7
Calor específico de las placas ($\text{J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$)	500
Espesor de la MEA (incluidas las capas catalíticas; μm)	50
Densidad de la membrana seca (g cm^{-3})	2
Conductividad térmica de la MEA ($\text{W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$)	0.15
Calor específico de la MEA ($\text{J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$)	500
Peso equivalente de la membrana seca (g mol^{-1})	1100
Espesor de la GDL (μm)	250
Porosidad de la GDL	0.7
Conductividad térmica de la GDL ($\text{W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$)	0.25

Tabla 6-3. Condiciones de operación; $i_{avg} = 0.6 \text{ A cm}^{-2}$

Condiciones de operación	Ánodo	Cátodo
Flujo másico de H_2 (kg s^{-1})	1.769E-08	---
Flujo másico de aire (kg s^{-1})	---	1.002E-06
Velocidad a la entrada (m s^{-1})	4.424E-01	1.316
Fracción másica de O_2 (%)	11.5	18.3
Fracción másica de H_2O (%)	88.5	21.5
Fracción másica de N_2 (%)	---	60.2
Coefficiente estequiométrico	1.2	2
Temperatura a la entrada ($^{\circ}\text{C}$)	80	70
Punto de rocío ($^{\circ}\text{C}$)	80	70
Humedad relativa (%)	100	100
Condiciones de operación de la pila		
Presión de operación (kPa)		101
Temperatura de operación ($^{\circ}\text{C}$)		70
Voltaje de circuito abierto (V)		0.96
Densidad de corriente de intercambio del H_2 (A cm^{-2})		0.2
Densidad de corriente de intercambio del O_2 (A cm^{-2})		0.02

6.3. Resultados y discusión

Se han estudiado 10 variantes del modelo correspondiente a una pila de combustible con un área reactiva de 256 mm^2 . Los resultados obtenidos se analizan a continuación.

En la Figura 6-2 se muestran las curvas de polarización correspondientes a los modelos de tipo MPH ($C_H < C_W$). Para voltajes de operación superiores a 0.7 V , la geometría de los canales de flujo no tiene influencia significativa, ya que a estos potenciales la velocidad de reacción electroquímica es baja con poco consumo de reactivos y poca producción de agua.

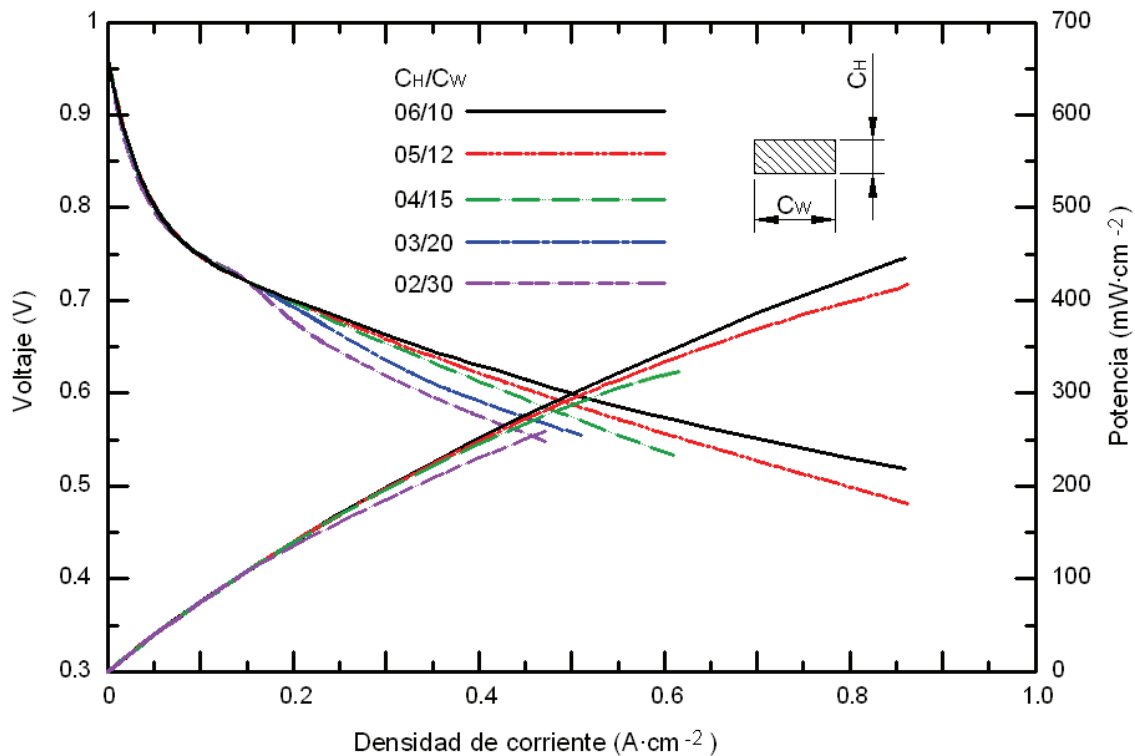


Figura 6-2. Curvas de polarización para los modelos de tipo MPH (06/10, 05/12, 04/15, 03/20 y 02/30)

Sin embargo, por debajo de 0.7 V se aprecian diferencias significativas entre las curvas de polarización. Los valores de potencial en la zona de control óhmico para una misma densidad de corriente decrecen a la vez que la anchura del canal aumenta. Cuando el ancho del canal de flujo varía, el parámetro más afectado es la densidad de corriente límite en forma de resistencia de contacto y/o limitación del transporte de masa. Como las zonas de reacción en todos los modelos permanecen invariables manteniendo constante el ancho de los *rib*, no se puede esperar que el ancho de los canales tenga ningún efecto sobre la resistencia de contacto. Además, la caída de presión puede jugar un papel importante. Pero al contrario de lo

que cabía esperar, la caída de presión aumenta con la anchura de los canales, Figura 6-4, por lo que el transporte de masa a lo largo de los canales de flujo aumenta a medida que la anchura del canal disminuye, dando lugar a un incremento en el voltaje obtenido y en la densidad de corriente límite. Estos resultados podrían explicarse comprobando el tiempo de residencia de los gases, Tabla 6-1. Esta tabla muestra que el tiempo de residencia se incrementa a la vez que aumenta la longitud del canal de flujo (a medida que la anchura del canal disminuye), lo que se traduce en una mayor difusión de los reactivos hacia la capa catalítica, mejorando el rendimiento de la PEMFC. Se observa que el modelo 06/10 es el que presenta mejor comportamiento, mostrando menores problemas de transporte de masa y presentando la mayor densidad de corriente límite.

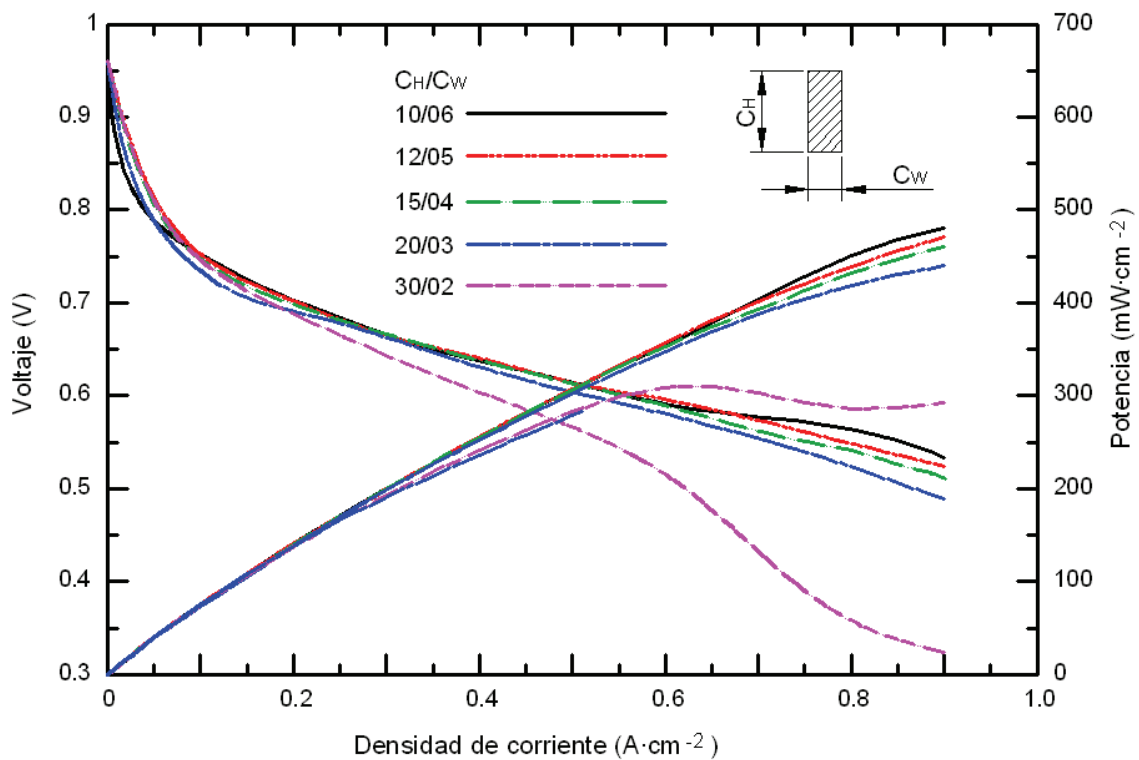


Figura 6-3. Curvas de polarización para los modelos de tipo MPV (10/06, 12/05, 15/04, 20/03 y 30/02)

En la Figura 6-3 se muestran las curvas obtenidas para los modelos de tipo MPV ($C_H > C_W$). Se observa que en la zona de control cinético, para potenciales de operación superiores a 0.75 V, existen ligeras diferencias entre los diferentes modelos, siendo el modelo 10/06 el que presenta un peor comportamiento a potenciales muy altos. Entre 0.75 V y 0.7 V el comportamiento del modelo 10/06 se invierte. En la zona de control óhmico, a medida que desciende el potencial de operación el comportamiento de los diferentes modelos es similar,

salvo el modelo 30/02 que presenta diferencias muy significativas. En la zona limitada por la transferencia de masa, para potenciales inferiores a 0.6 V, las diferencias entre las curvas de polarización son mayores, siendo el modelo 10/06 el que mejor comportamiento presenta. Estos modelos presentan los canales más estrechos y más altos. Por lo tanto, es de suponer que la caída de presión junto con el contenido de agua podría tener una seria influencia en el comportamiento de la PEMFC.

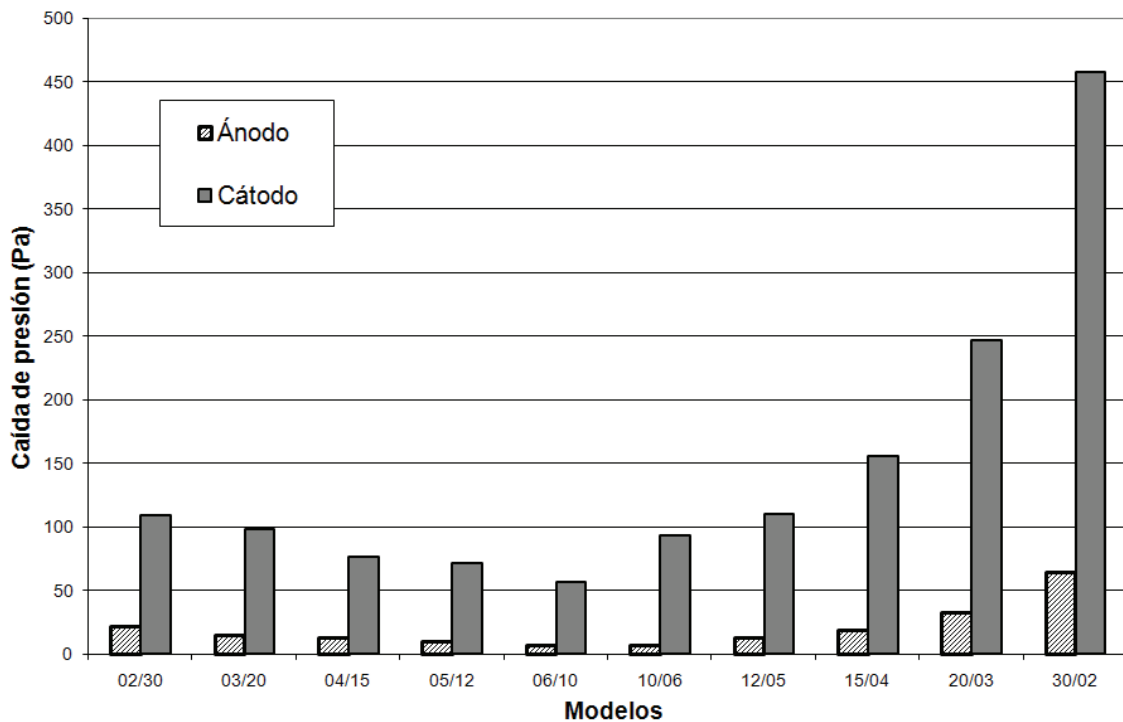


Figura 6-4. Caída de presión en ánodo y cátodo para los diferentes modelos analizados en el estudio: ΔP (Pa). $I_{avg} = 0.6 \text{ A cm}^{-2}$

En la Figura 6-4 se ha representado la caída de presión en los canales anódicos y catódicos para todos los modelos analizados. La Figura 6-5 y la Figura 6-6 presentan el contenido neto de agua en la membrana a una densidad de corriente media de 0.6 A cm^{-2} para los modelos de tipo MPH (04/15, 05/12, 06/10) y de tipo MPV (10/06, 12/05 y 15/04) respectivamente. En la Figura 6-4 y Figura 6-6 se muestra que la caída de presión y el contenido de agua en la membrana se incrementan a la vez que aumenta la longitud del canal de flujo. Aunque en la Figura 6-6 sólo se muestran las distribuciones para los modelos 10/06, 12/05 y 15/04, los resultados obtenidos para los modelos 20/03 y 30/02 mostraron distribuciones de contenido de agua en la membrana (λ) con valores superiores a 14. La membrana en estos casos estaría completamente humidificada con agua líquida en estado de equilibrio, lo que indicaría que en estos canales de flujo habría una fracción significativa de agua líquida [20].

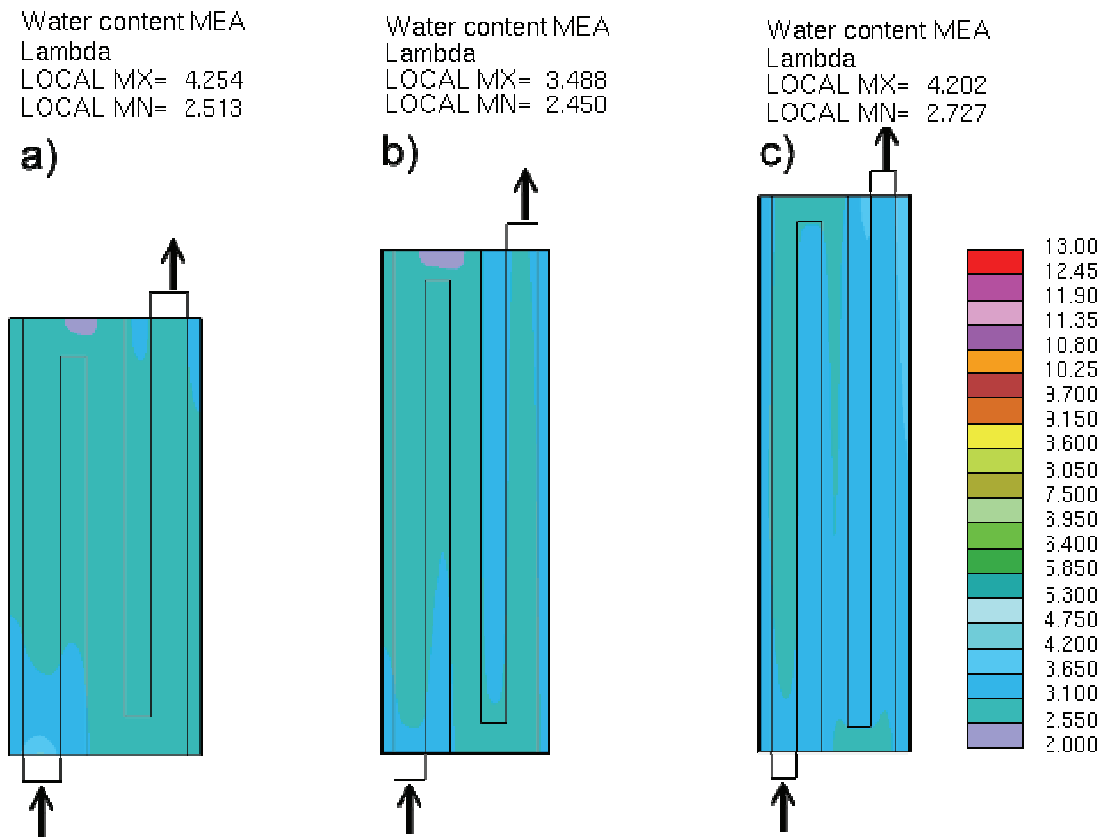


Figura 6-5. Distribución del contenido neto de agua en la membrana y valores máximos y mínimos, λ (lambda): **a)** Modelo 04/15, ($V_{avg}=0.53$ V); **b)** Modelo 05/12, ($V_{avg}=0.55$ V); **c)** Modelo 06/10, ($V_{avg}=0.57$ V). $I_{avg} = 0.6$ A cm^{-2}

El contenido de agua en la membrana está directamente relacionado con la conductividad protónica de la membrana. Por lo tanto, un mayor contenido de agua en la membrana permite una conductividad protónica mayor y, en consecuencia, un mayor rendimiento de la pila de combustible. Sin embargo, como se puede observar en la Figura 6-3, a medida que la relación altura/anchura aumenta, el rendimiento de la pila es peor. Esto podría ser debido al impacto que tendría el efecto “flooding” sobre el transporte de masa hacia la membrana.

De la Figura 6-4 se puede deducir que a medida que aumenta la altura del canal, la caída de presión entre los canales adyacentes es superior, dándose un gradiente de presión entre canales adyacentes mayor que en la dirección del flujo, lo que podría favorecer un aumento del flujo bajo *rib* [10]. Este flujo induciría un transporte por convección en los electrodos que permitiría a los reactivos llegar más fácilmente a las capas de catalizador, aumentando el área reactiva útil de la membrana. Además, en el cátodo, esta corriente convectiva podría tener un efecto de arrastre del agua producida como resultado de la reacción favoreciendo su eliminación y evitando el “flooding”.

No obstante, con el aumento de la altura del canal de flujo disminuye el área de canal en contacto con la membrana, reduciendo la superficie a través de la cual se realiza el transporte de reactivos a las capas de catalizador y dificultando así mismo el flujo bajo *rib* tanto en el ánodo como en el cátodo. En el ánodo, este efecto reduciría el área reactiva útil de la membrana a las zonas del canal que están en contacto directo con la misma, disminuyendo el rendimiento de la pila. En el cátodo, por su parte, dificultaría la eliminación del agua producida por la reacción, pudiendo aparecer algunas zonas con “flooding” provocando una caída aún mayor del rendimiento.

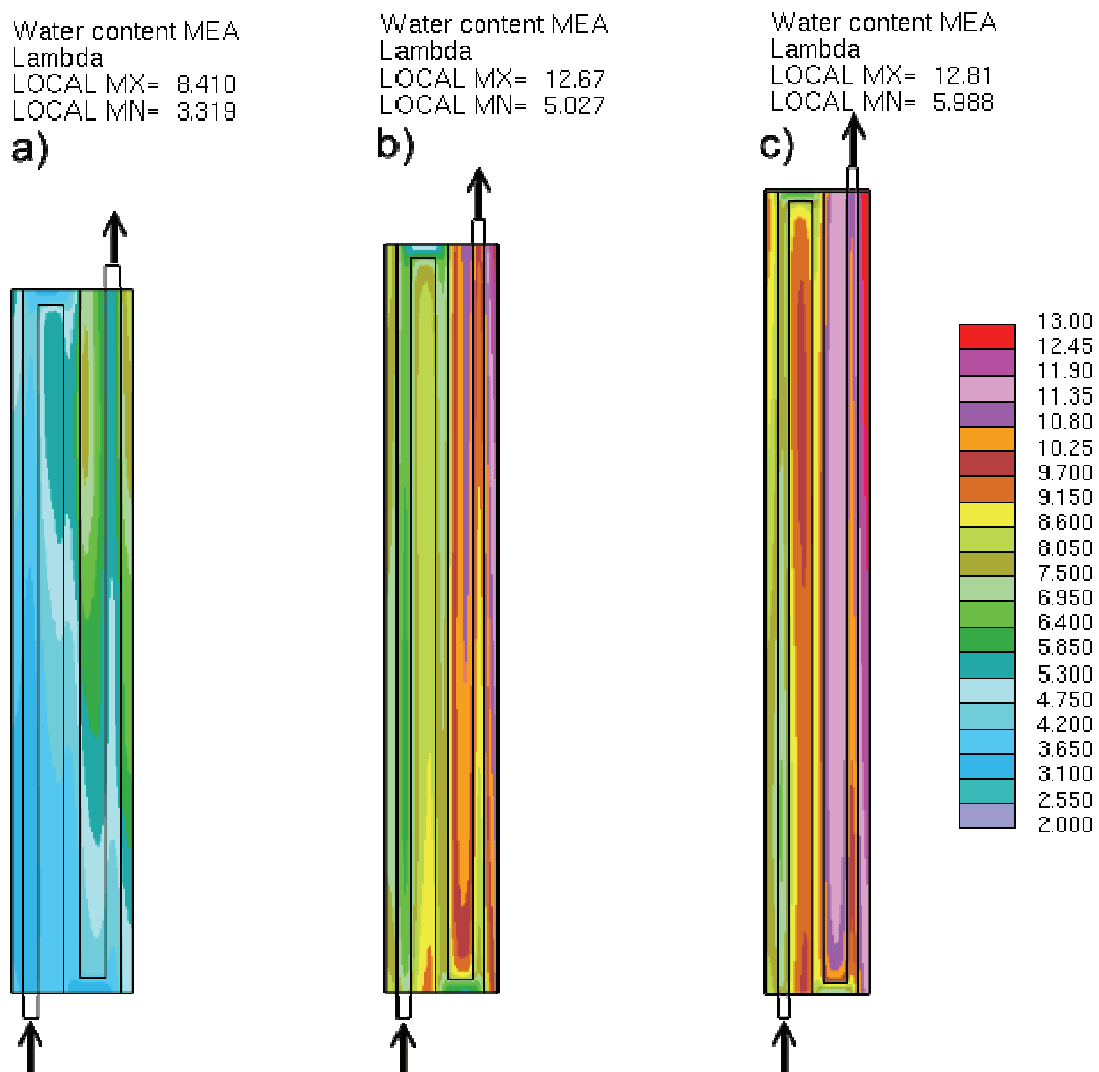


Figura 6-6. Distribución del contenido neto de agua en la membrana y valores máximos y mínimos, λ (lambda): **a)** Modelo 10/06, ($V_{avg}=0.59$ V); **b)** Modelo 12/05, ($V_{avg}=0.59$ V); **c)** Modelo 15/04, ($V_{avg}=0.59$ V). $I_{avg} = 0.6$ A cm⁻²

En el modelo 30/02, una reducción del flujo bajo *rib* podría ser la causa del aumento de la fracción de agua líquida en el ánodo debido al efecto de difusión desde el cátodo. Aunque no se muestra en la Figura 6-22, el parámetro alfa muestra valores negativos en algunas áreas del modelo 30/02. El parámetro alfa representa el flujo neto de agua por protón a través de la membrana. Valores positivos indican que el arrastre electroosmótico es superior al transporte por difusión desde el cátodo, por lo que el flujo va desde el ánodo hacia el cátodo. Valores negativos, en cambio, indican que el transporte por difusión predomina sobre el arrastre electroosmótico, por lo que la dirección del flujo es desde el cátodo hacia el ánodo [21].

Dado que el rendimiento de los modelos más extremos (02/30, 03/20, 20/03 y 30/02) es muy bajo comparándolos con el resto, el análisis y comparativa de las diferentes variables que intervienen en el funcionamiento de la pila de combustible y que se detalla a continuación, se ha reducido al estudio de los modelos 04/15, 05/12, 06/10, 10/06, 12/05 y 15/04.

En las figuras: Figura 6-7, Figura 6-8, Figura 6-9, Figura 6-10 y Figura 6-11 se muestran las curvas de polarización por pares, comparando las secciones con ratio similar pero con posición diferente. En todos los casos se comprueba que las curvas de polarización presentan mejor comportamiento si la sección transversal del canal de flujo se coloca en posición vertical; es decir, siempre que $C_H > C_W$. Esto puede ser debido a que la caída de presión es superior en todos los modelos tipo MPV ($C_H > C_W$) y, por tanto, los valores de diferencia de presiones entre canales adyacentes es también superior. Esto aumentaría los flujos bajo *rib* y, como resultado, mejoraría el rendimiento de la pila de combustible. La Figura 6-4 muestra como los modelos con sección transversal idéntica tienen una caída de presión tanto en el ánodo como en el cátodo superior cuando la sección está colocada en posición vertical. Esto podría explicarse por la combinación de dos efectos diferentes: el tiempo de residencia de los flujos, Tabla 6-1, y el contenido de agua en la membrana, Figura 6-5 y Figura 6-6. La Tabla 6-1 muestra cómo el tiempo de residencia del gas en los canales de flujo aumenta a medida que aumenta la altura del canal. Dado que las condiciones del flujo y el área de la sección transversal son las mismas, el caudal es el mismo en todos los casos. Por lo tanto, el tiempo de residencia, definido como el cociente entre el volumen y el caudal, es diferente. Los valores del tiempo de residencia para los modelos 04/15, 05/12, 06/10, 10/06, 12/05 y 15/04 recogidos en la Tabla 6-1 aumentan a medida que la longitud del canal aumenta, lo que mejora la difusión de los gases hacia la capa catalítica aumentando el rendimiento de la PEMFC. Por otra parte, la Figura 6-5 y la Figura 6-6 muestran que el contenido de agua en la membrana es mayor cuando se utilizan canales con la sección transversal en posición vertical.

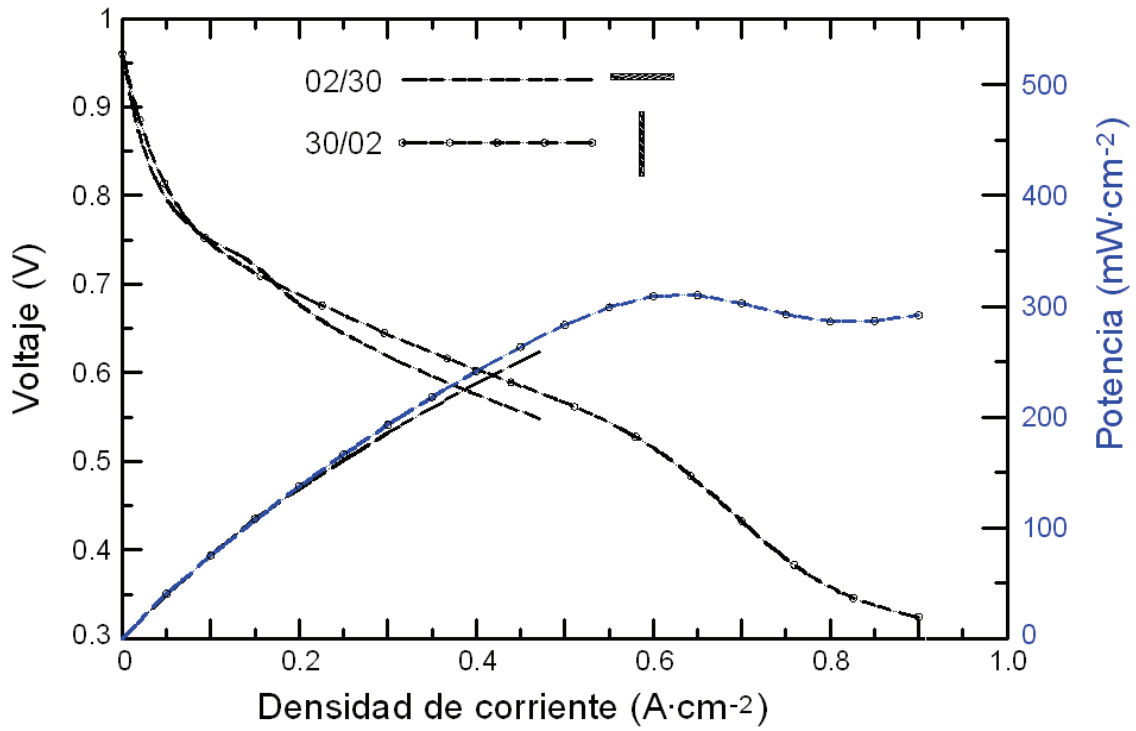


Figura 6-7. Curvas de polarización por pares para los modelos 02/30 y 30/02

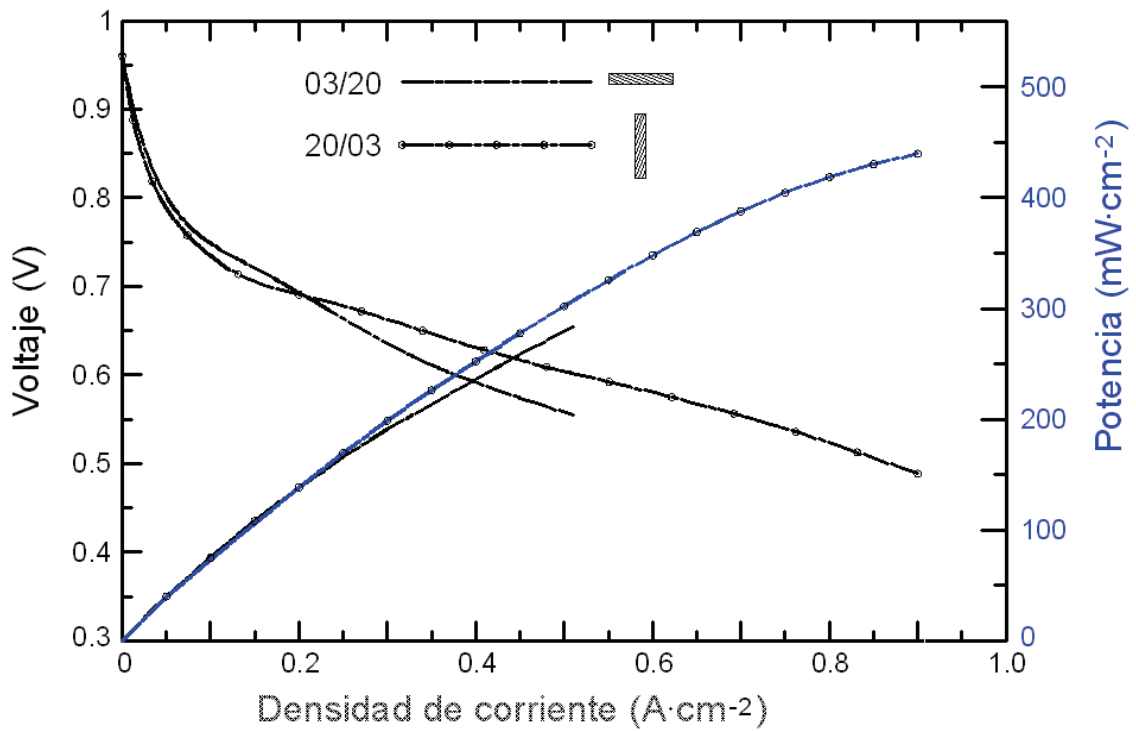


Figura 6-8. Curvas de polarización por pares para los modelos 03/20 y 20/03

Influencia del diseño de los canales de flujo en el rendimiento de una pila de combustible de membrana de intercambio protónico (PEMFC)

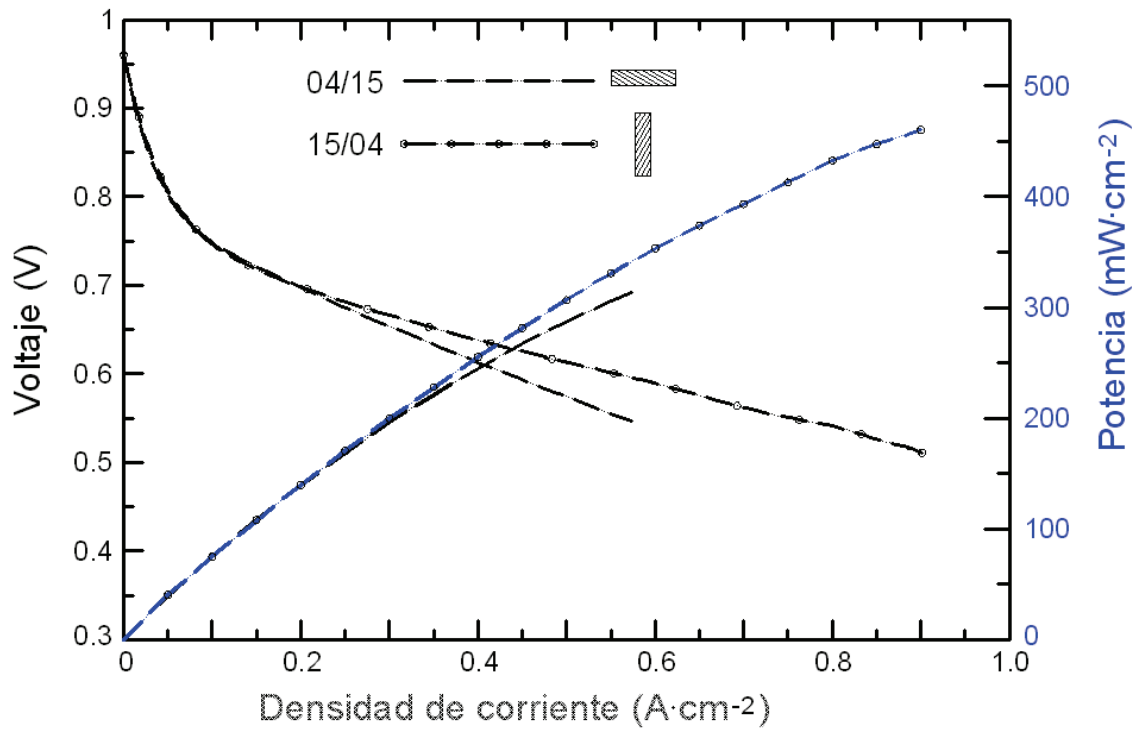


Figura 6-9. Curvas de polarización por pares para los modelos 04/15 y 15/04

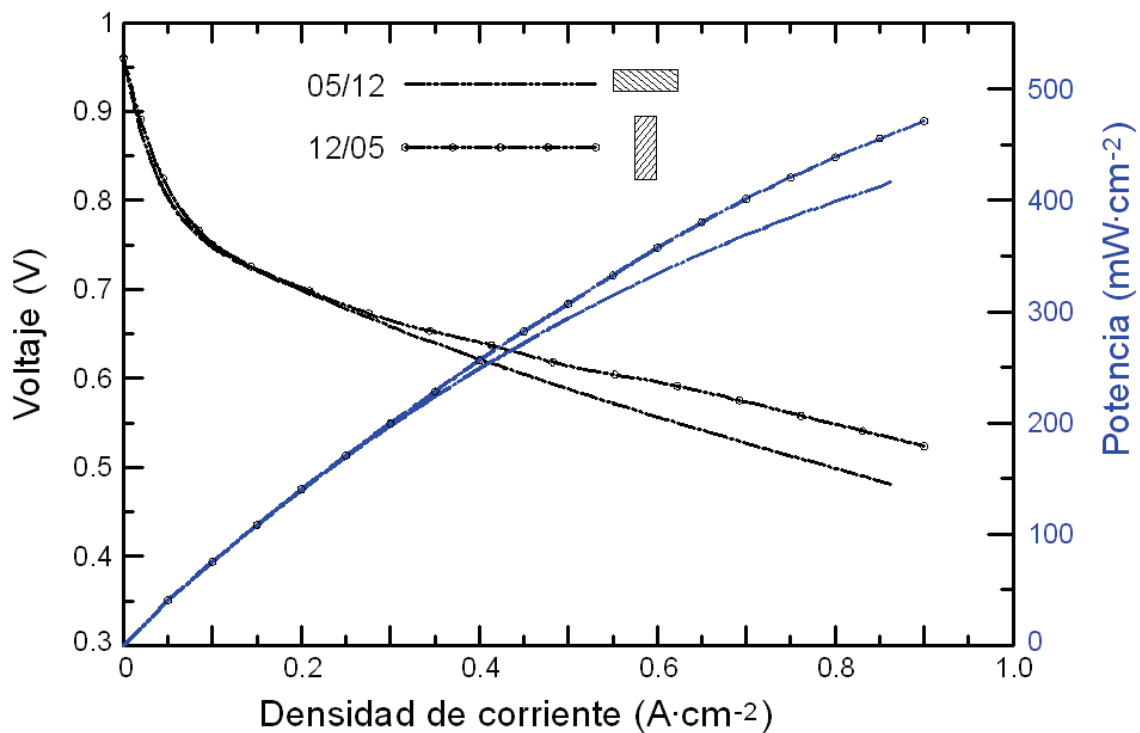


Figura 6-10. Curvas de polarización por pares para los modelos 05/12 y 12/05

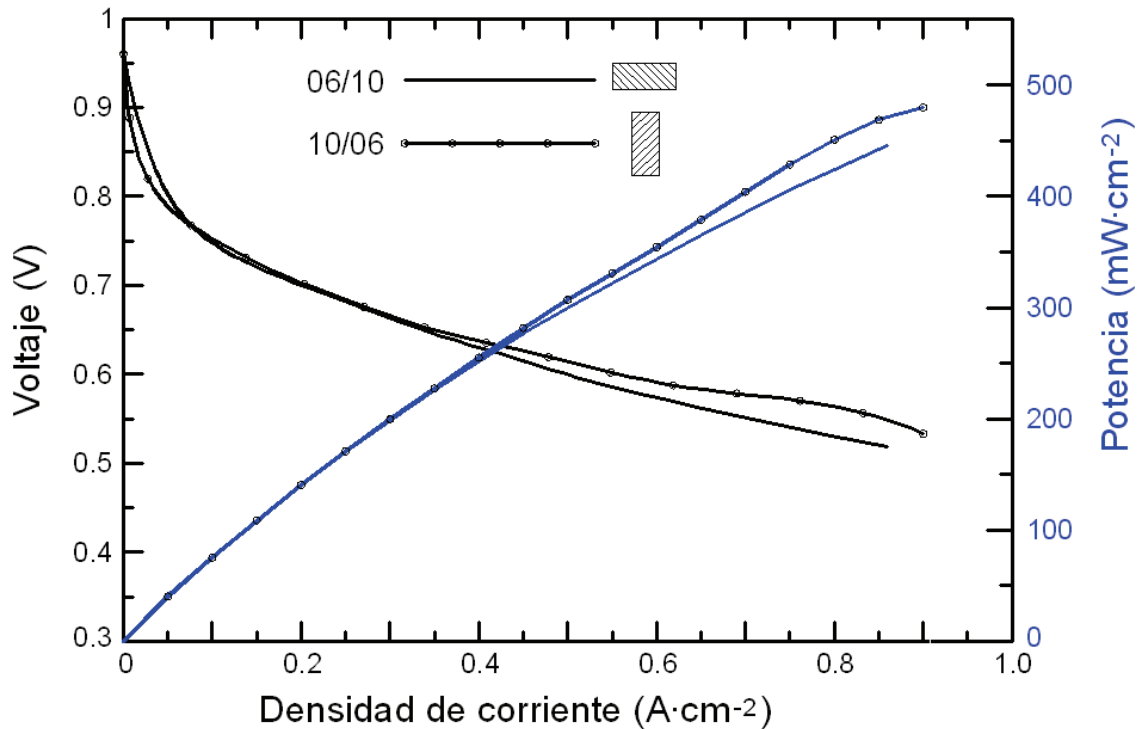


Figura 6-11. Curvas de polarización por pares para los modelos 06/10 y 10/06

La distribución del contenido neto de agua en la membrana (λ) en los diferentes modelos ($C_H < C_W$ vs. $C_H > C_W$) es también coherente con el aumento de la temperatura en la membrana, Figura 6-12 y Figura 6-13. El bajo contenido de agua en la membrana en los modelos 04/15, 05/12 y 06/10 (Figura 6-5) provocaría la formación de puntos calientes (*hot spots*). La Figura 6-12 muestra la distribución de temperatura sobre la membrana en los modelos 04/15, 05/12 y 06/10 que en algunos puntos sobrepasa los 114 °C llegando hasta los 125 °C. Este comportamiento conduciría al fallo de la membrana, reduciendo seriamente el rendimiento de la pila de combustible. Por el contrario, los modelos 10/06, 12/05 y 15/04 (Figura 6-6) mantienen una distribución uniforme del contenido neto de agua en la membrana (λ), alcanzando valores desde 9 hasta 13 a medida que los canales se estrechan. Este comportamiento favorecería la conductividad protónica y una distribución homogénea de la densidad de corriente, que a su vez conllevaría una distribución homogénea de la temperatura sobre la membrana. Los valores de temperatura para estos últimos modelos están en entre 92 °C y 97 °C, Figura 6-13.

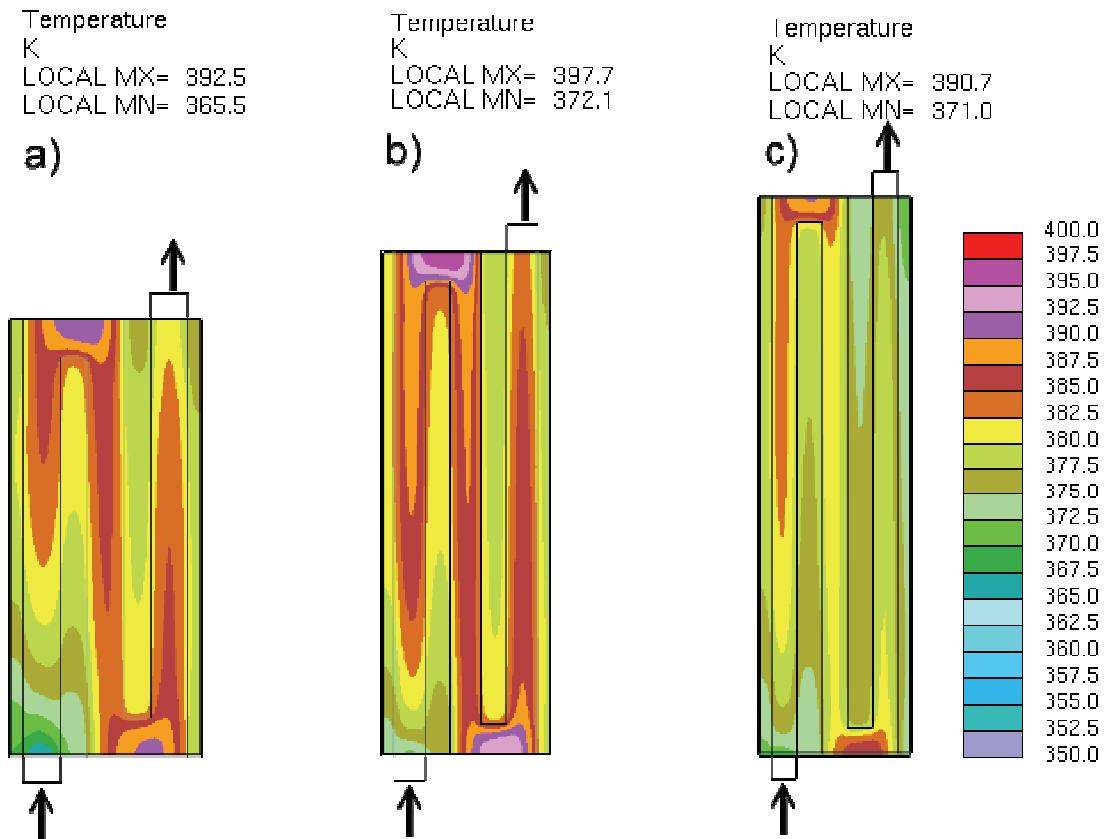


Figura 6-12. Distribución de temperatura en la membrana y valores máximos y mínimos, (K): **a)** Modelo 04/15, ($V_{avg}=0.53$ V); **b)** Modelo 05/12, ($V_{avg}=0.55$ V); **c)** Modelo 06/10, ($V_{avg}=0.57$ V).
 $I_{avg} = 0.6 \text{ A cm}^{-2}$

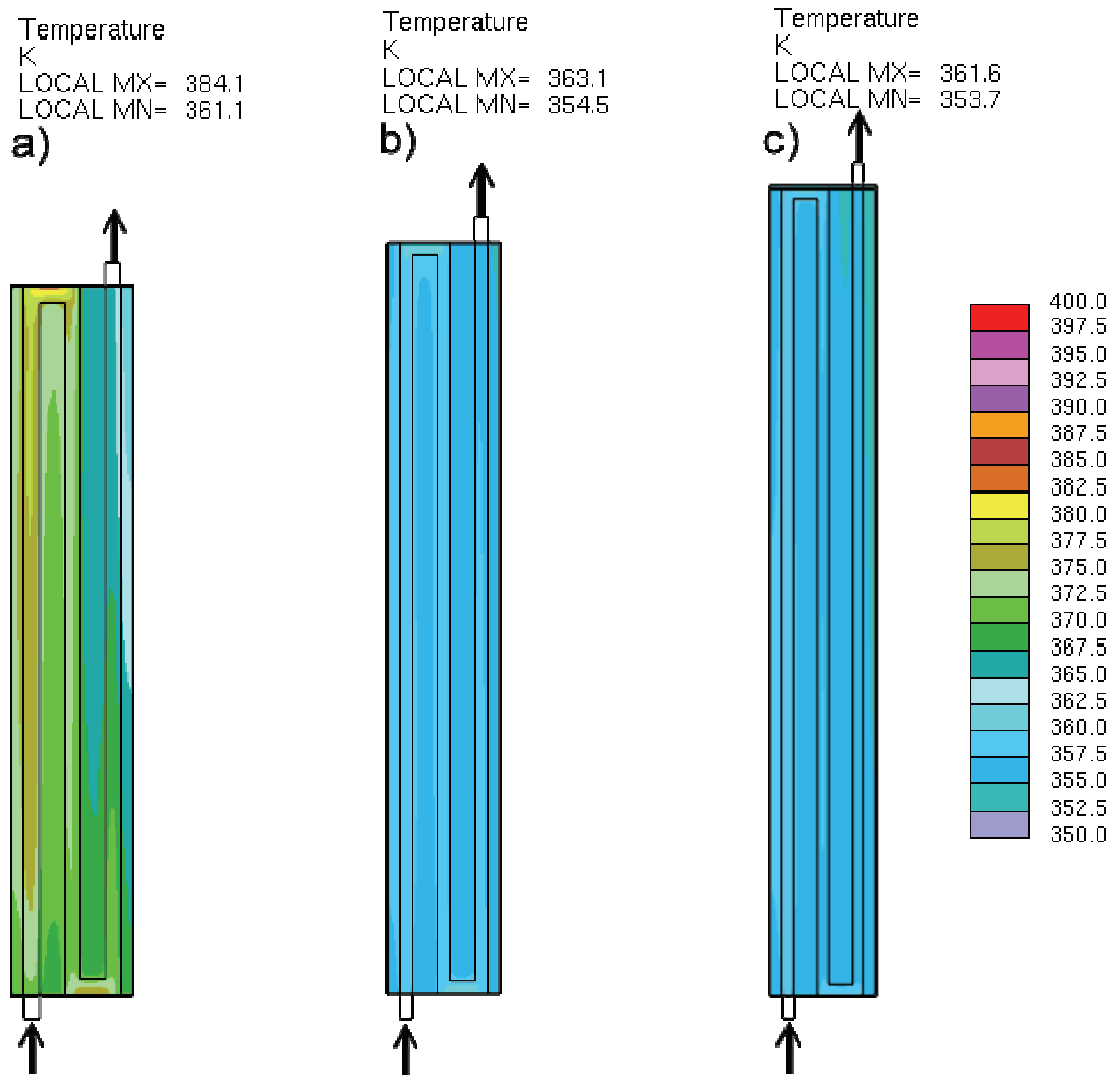


Figura 6-13. Distribución de temperatura en la membrana y valores máximos y mínimos, (K): **a)** Modelo 10/06, ($V_{avg}=0.59$ V); **b)** Modelo 12/05, ($V_{avg}=0.59$ V); **c)** Modelo 15/04, ($V_{avg}=0.59$ V).
 $I_{avg} = 0.6$ A cm^{-2}

La Figura 6-14 representa el voltaje de los diferentes modelos para densidades de corriente de 0.3, 0.5 y 0.7 A cm^{-2} y la longitud del canal de flujo para cada modelo analizado. Se observa que a medida que la altura del canal (C_H) aumenta y la anchura (C_W) disminuye, se obtienen mejores resultados en los modelos tipo MPH ($C_H < C_W$). Los modelos tipo MPV ($C_H > C_W$) 10/06, 12/05 y 15/04 presentan un comportamiento similar entre sí, mientras que los modelos 20/03 y 30/02 muestran un peor comportamiento.

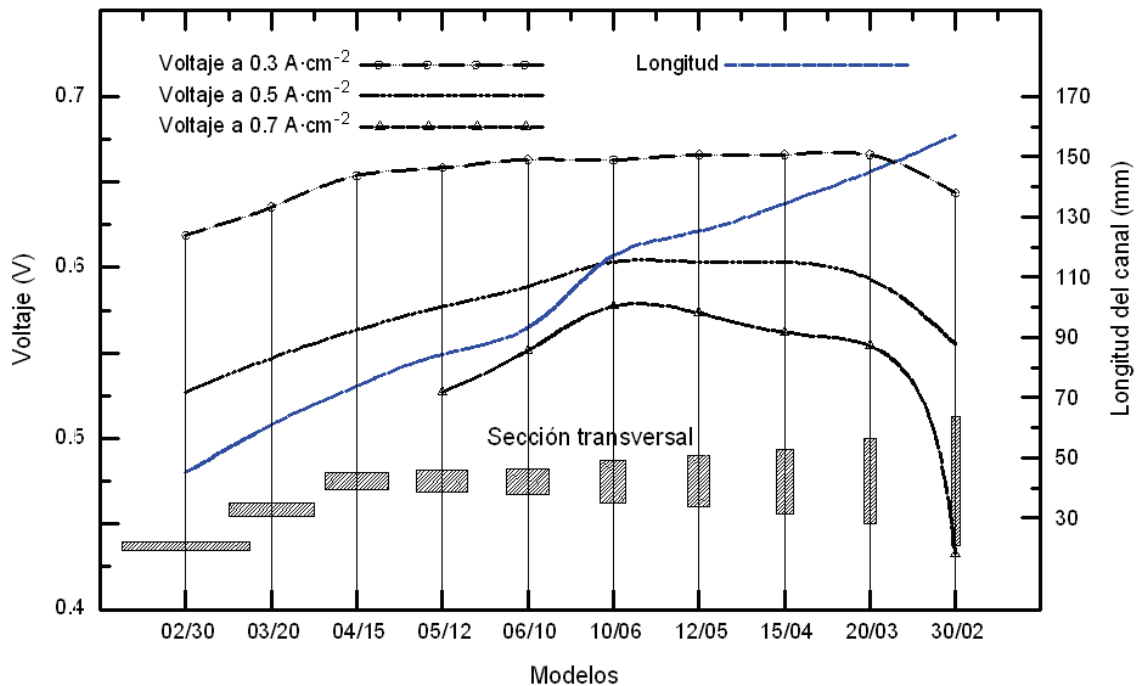


Figura 6-14. Influencia de la geometría de la sección transversal del canal de flujo en el voltaje de la PEMFC para densidades de corriente de 0.3 A cm^{-2} , 0.5 A cm^{-2} y 0.7 A cm^{-2}

En la Figura 6-15 se muestran las distribuciones de corriente para los modelos 04/15, 05/12 y 06/10. En la Figura 6-16 se muestran las distribuciones de corriente para los modelos 10/06, 12/05 y 15/04. Se observa que los modelos tipo MPV ($C_H > C_W$), Figura 6-16, presentan una distribución más uniforme. El modelo 10/06 tiene los valores máximos y mínimos más altos. Para los modelos 12/05 y 15/04, a pesar de presentar distribuciones homogéneas, los valores máximos de la densidad de corriente descienden. Los modelos tipo MPV muestran el efecto que el flujo bajo *rib* tiene sobre el incremento del área de reacción útil de la membrana. Como se ha mencionado anteriormente, este efecto se debe a la caída de presión que crea mayores diferencias de presión entre canales adyacentes, aumentando así el flujo bajo *rib*.

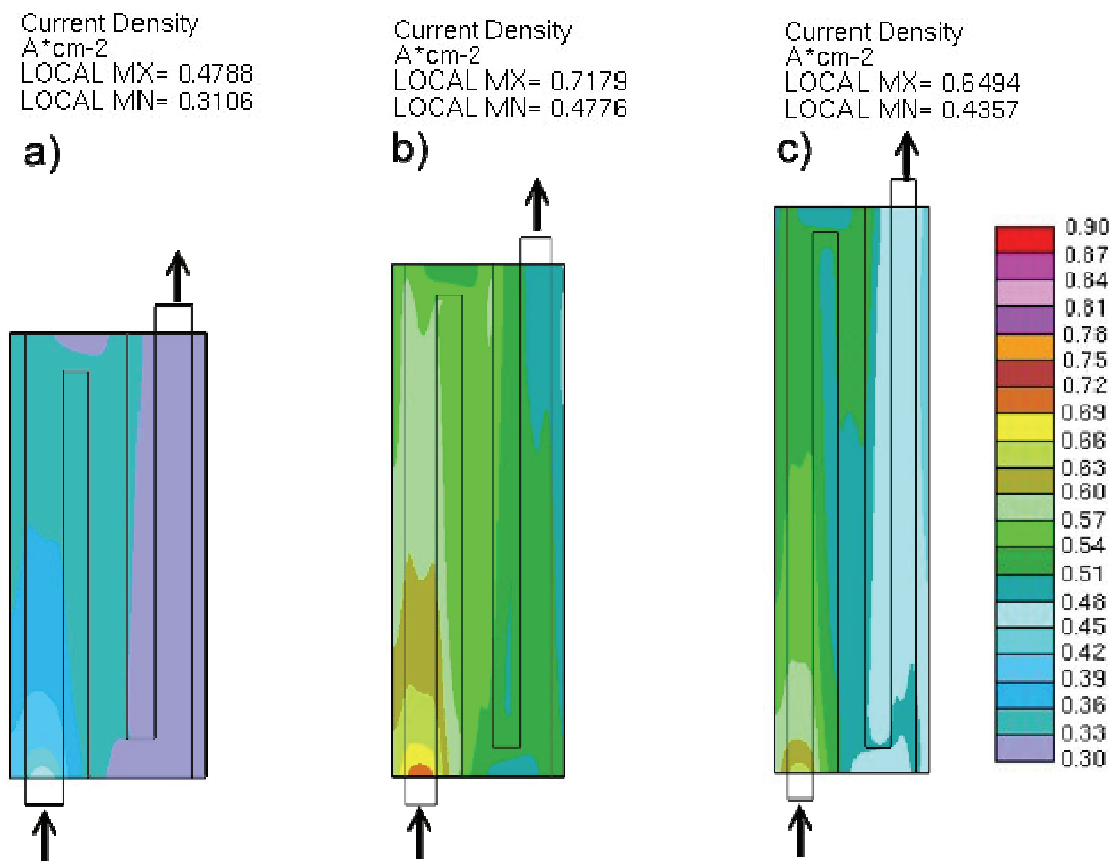


Figura 6-15. Distribución de densidad de corriente en la membrana y valores máximos y mínimos, ($A\text{ cm}^{-2}$): **a)** Modelo 04/15, ($V_{\text{avg}}=0.53\text{ V}$); **b)** Modelo 05/12, ($V_{\text{avg}}=0.55\text{ V}$); **c)** Modelo 06/10, ($V_{\text{avg}}=0.57\text{ V}$). $I_{\text{avg}} = 0.6\text{ A cm}^{-2}$

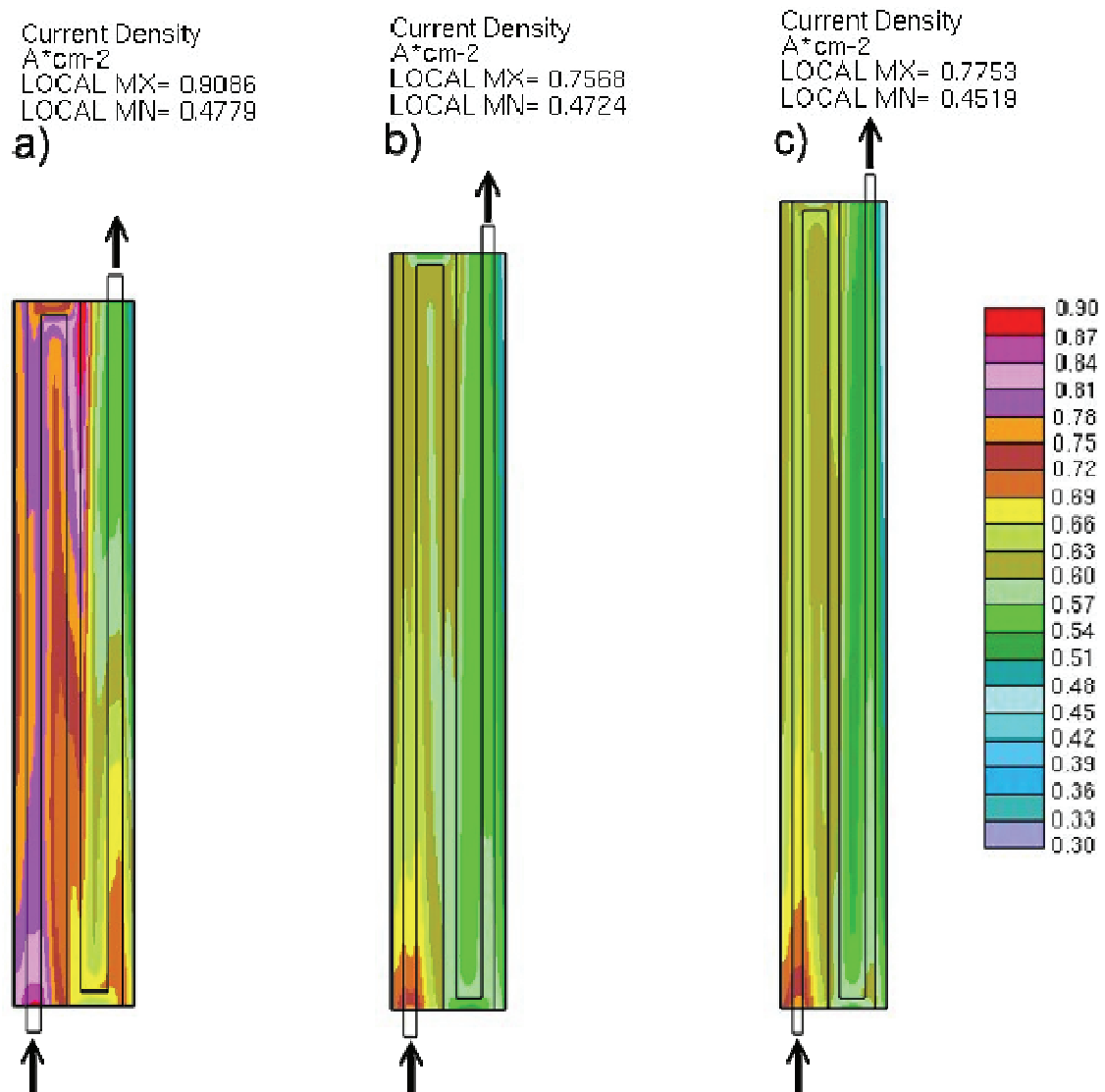


Figura 6-16. Distribución de densidad de corriente en la membrana y valores máximos y mínimos, ($A\text{ cm}^{-2}$): **a)** Modelo 10/06, ($V_{\text{avg}}=0.59\text{ V}$); **b)** Modelo 12/05, ($V_{\text{avg}}=0.59\text{ V}$); **c)** Modelo 15/04, ($V_{\text{avg}}=0.59\text{ V}$). $I_{\text{avg}} = 0.6\text{ A cm}^{-2}$

En resumen, y teniendo en cuenta las distribuciones de la velocidad en los canales anódico y catódico, la distribución de la densidad de corriente en la membrana (Figura 6-15 y Figura 6-16), las distribuciones de las fracciones másica de hidrógeno y oxígeno en las capas de difusión (GDL) anódica y catódica respectivamente (Figura 6-17, Figura 6-18, Figura 6-19 y Figura 6-20), la distribución de la temperatura en la membrana (Figura 6-12 y Figura 6-13), el contenido neto de agua en la membrana λ (lambda) (Figura 6-5 y Figura 6-6) y la distribución del flujo neto de agua por protón α (alfa) (Figura 6-21 y Figura 6-22) para los modelos 04/15, 05/12, 06/10, 10/06, 12/05 y 15/04, se puede observar que en los modelos con secciones más anchas que altas ($C_H < C_W$) la distribución de corriente es menos uniforme y con valores máximos y mínimos menores (Figura 6-15), la distribución de temperatura presenta mayores gradientes y valores más altos (Figura 6-12), y el contenido de agua en la membrana se mantiene en valores bajos ($2.4 < \lambda < 4.2$), Figura 6-5. Esto podría ser consecuencia de que los reactivos húmedos a la entrada llegan perfectamente a las zonas de reacción, provocando un aumento de la densidad de corriente en esa zona. En consecuencia, el arrastre electro-osmótico es mayor que el flujo difusional del cátodo hacia el ánodo (Figura 6-21), haciendo disminuir el contenido neto de agua de la membrana (λ) y generando un descenso de la densidad de corriente a lo largo del canal [6,22,23]. En estos casos, aunque la concentración de hidrógeno y oxígeno es muy homogénea en toda la superficie reactiva (Figura 6-17 y Figura 6-19), la falta de una adecuada hidratación de la membrana impide el flujo protónico. En los tres casos, 04/15, 05/12 y 06/10, a lo largo del canal de flujo, en los cambios de dirección aparecen zonas “muertas” con perfil de velocidades reducido. Esto provocaría que en esas zonas la evacuación del calor producido fuera más complicada, produciéndose aumentos de temperatura local (valores entre 110 °C y 125 °C) (Figura 6-12) que crearían pequeñas áreas de deshidratación en la membrana ($\lambda < 2.6$), Figura 6-5. En estas zonas la conductividad protónica podría ser muy reducida, aumentando la resistencia óhmica y, como consecuencia, reduciendo el rendimiento de la pila. También se observa que la concentración de hidrógeno y oxígeno en esas zonas no disminuye (Figura 6-17 y Figura 6-19), ya que no se genera apenas corriente (Figura 6-15). Además de la caída del rendimiento global de la pila, la aparición de estos puntos calientes podría dar lugar a tensiones en la membrana y reducir el tiempo de vida de la misma. A medida que la sección del canal es más estrecha y más alta, el efecto descrito anteriormente es menor.

En cuanto a los modelos tipo MPV ($C_H > C_W$), en general la distribuciones de corriente son más uniformes y con valores máximos y mínimos mayores (Figura 6-16), las distribuciones de temperatura presentan menores gradientes y valores máximos y mínimos menores (entre un 3% y un 8%) (Figura 6-13), y las distribuciones del contenido de agua en las membranas se mantienen en valores superiores ($3.3 < \lambda < 12.8$) (Figura 6-6) en comparación con los modelos 04/15, 05/12 y 06/10.

De los tres modelos analizados: 10/06, 12/05 y 15/04, el modelo 10/06 es el que presenta valores de intensidad de corriente mayores (Figura 6-16), aunque el valor disminuye a lo largo

del canal conforme se reduce la concentración de reactivos (Figura 6-18 y Figura 6-20). Las temperaturas sobre la membrana son más altas, alcanzándose los 110 °C en los puntos más calientes (cambios de dirección), Figura 6-13. El contenido neto de agua en la membrana se mantiene en valores: $3.3 < \lambda < 8.4$ (Figura 6-6).

Los modelos 12/05 y 15/04 presentan comportamientos muy similares entre sí, con distribuciones de corriente más homogéneas pero con valores entre un 15% y un 20% inferiores al modelo 10/06 (Figura 6-16); la temperatura en la membrana se mantiene por debajo de 90 °C (Figura 6-13) y el contenido de agua en la membrana ($5 < \lambda < 12.8$) es mayor y presenta distribuciones más homogéneas (Figura 6-6). Estos dos modelos presentan concentraciones de reactivos a la salida de la pila superiores a las del modelo 10/06, lo que indica una pérdida de eficiencia en la utilización del oxígeno. Esto puede ser debido a que los modelos 12/05 y 15/04, por la geometría de sus canales más altos y estrechos, presentan una mayor dificultad al transporte de reactivos hasta la capa catalítica, reduciendo la reacción electroquímica y, por consiguiente, la densidad de corriente y el rendimiento global de la pila. Por el contrario, esta reducción de la reacción electroquímica favorece una adecuada hidratación de la membrana y un gradiente de temperatura menor, lo que ayudaría a prolongar la vida útil de la misma.

Por último, la caída de presión es un factor más a tener en cuenta para lograr un eficiente diseño de una PEMFC, ya que cuánto más energía se necesite para impulsar con eficacia los reactivos, menor será el rendimiento neto obtenido de la PEMFC [24]. Como se muestra en la Figura 6-4, el modelo 06/10 posee la geometría que provoca la menor caída de presión, mientras que entre los modelos con mejor rendimiento global, es el modelo 10/06.

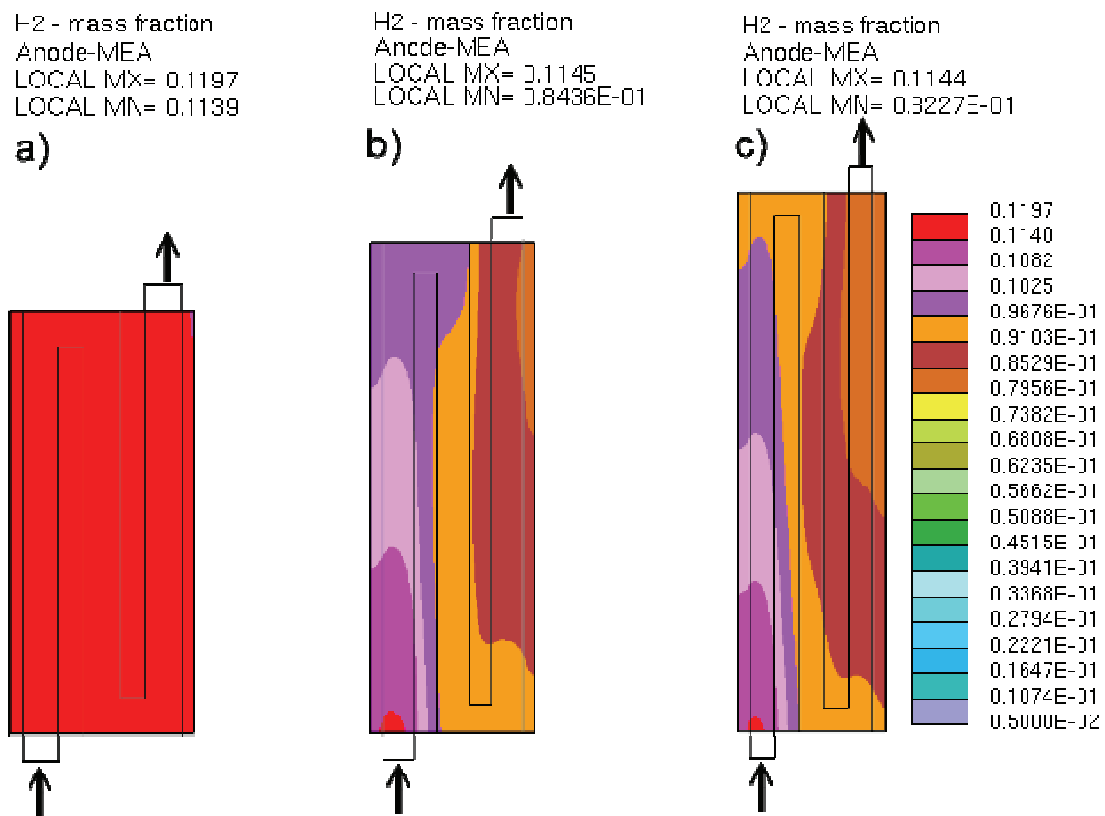


Figura 6-17. Distribución de la fracción másica de hidrógeno en la GDL anódica y valores máximos y mínimos: **a)** Modelo 04/15, ($V_{avg}=0.53$ V); **b)** Modelo 05/12, ($V_{avg}=0.55$ V); **c)** Modelo 06/10, ($V_{avg}=0.57$ V). $I_{avg} = 0.6$ A cm^{-2}

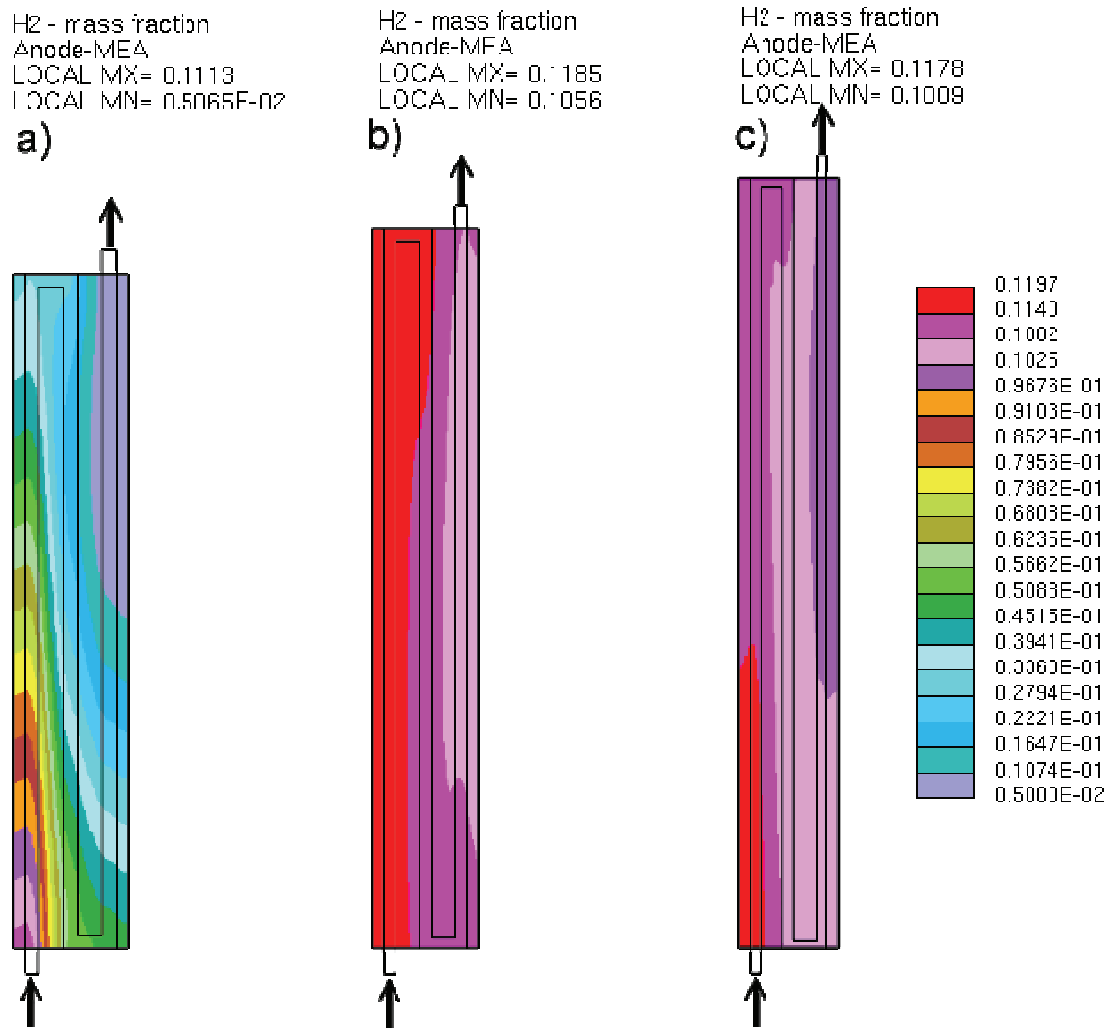


Figura 6-18. Distribución de la fracción másica de hidrógeno en la GDL anódica y valores máximos y mínimos: **a)** Modelo 10/06, ($V_{avg}=0.59$ V); **b)** Modelo 12/05, ($V_{avg}=0.59$ V); **c)** Modelo 15/04, ($V_{avg}=0.59$ V). $I_{avg} = 0.6$ A cm⁻²

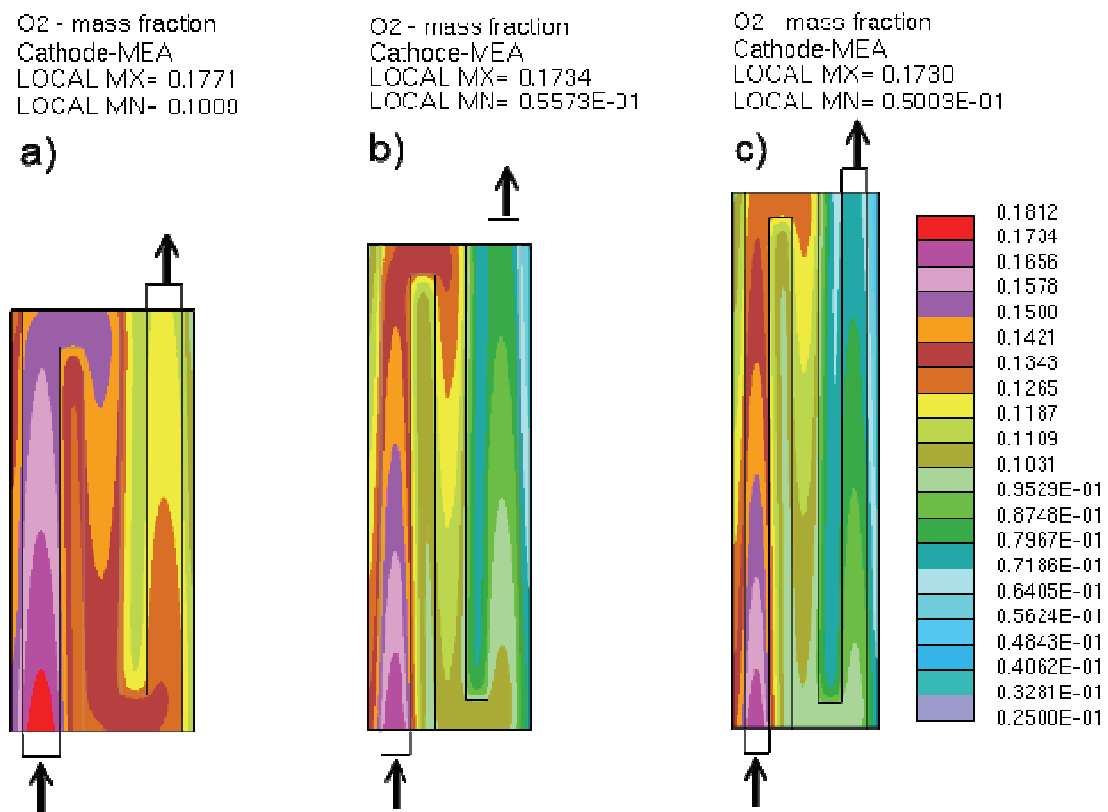


Figura 6-19. Distribución de la fracción másica de oxígeno en la GDL catódica y valores máximos y mínimos: **a)** Modelo 04/15, ($V_{avg}=0.53$ V); **b)** Modelo 05/12, ($V_{avg}=0.55$ V); **c)** Modelo 06/10, ($V_{avg}=0.57$ V). $I_{avg} = 0.6$ A cm⁻²

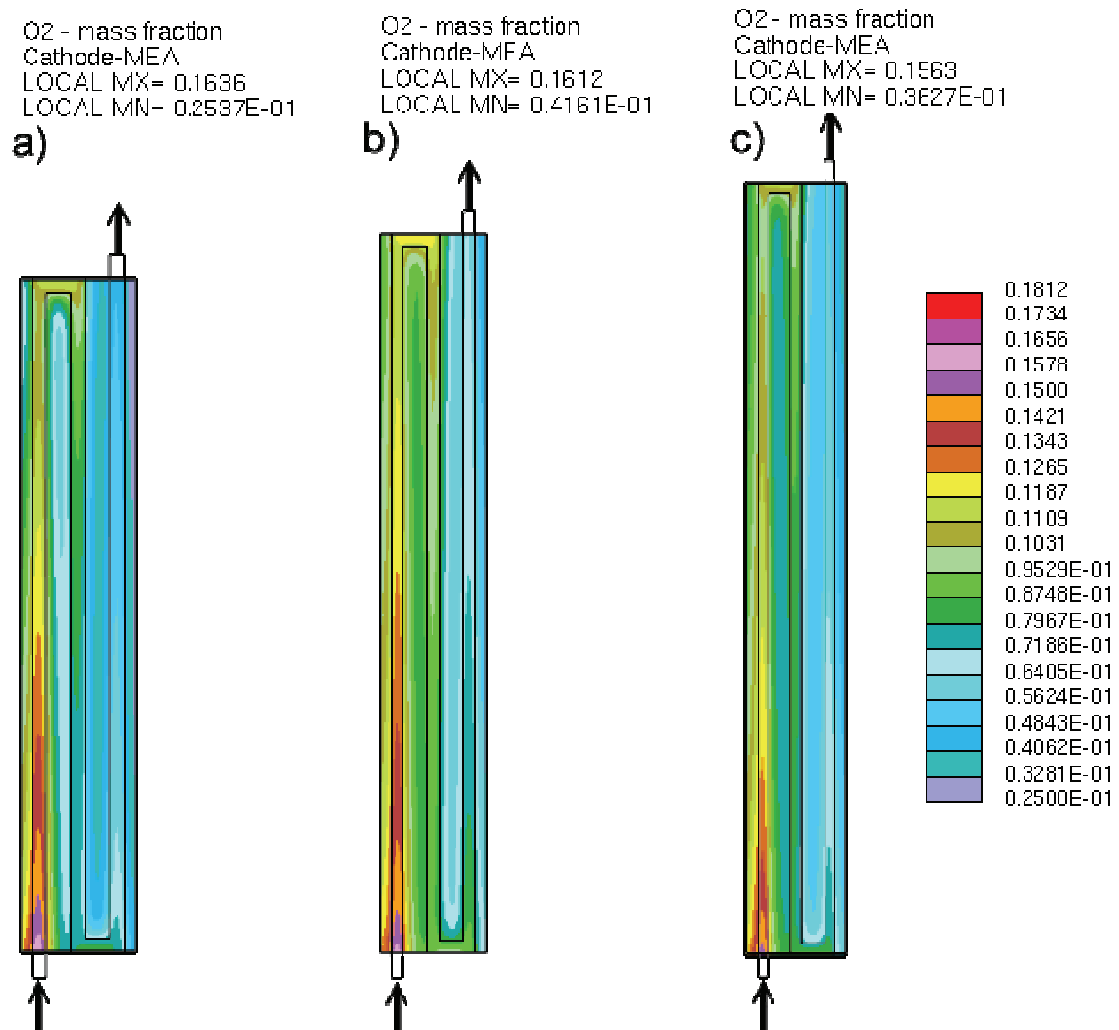


Figura 6-20. Distribución de la fracción másica de oxígeno en la GDL catódica y valores máximos y mínimos: **a)** Modelo 10/06, ($V_{avg}=0.59$ V); **b)** Modelo 12/05, ($V_{avg}=0.59$ V); **c)** Modelo 15/04, ($V_{avg}=0.59$ V). $I_{avg} = 0.6$ A cm⁻²

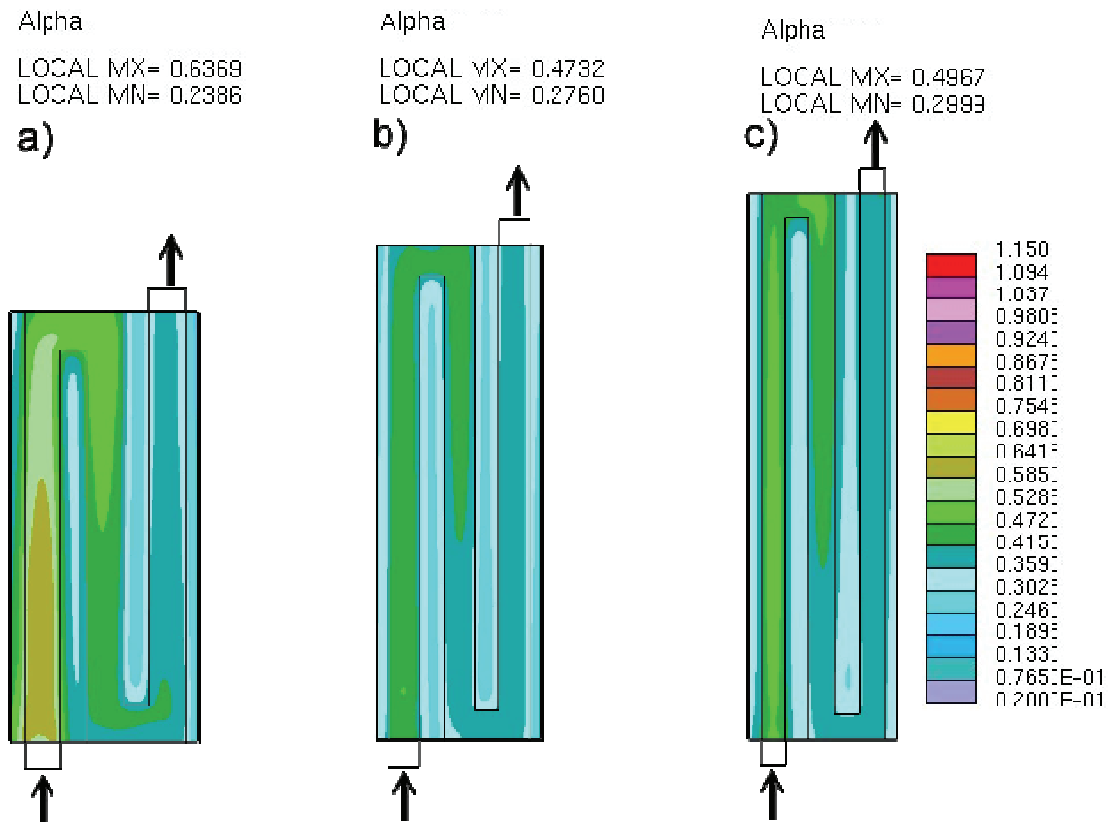


Figura 6-21. Distribución del flujo neto de agua por protón en la membrana y valores máximos y mínimos, α (alfa): **a)** Modelo 04/15, ($V_{avg}=0.53$ V); **b)** Modelo 05/12, ($V_{avg}=0.55$ V); **c)** Modelo 06/10, ($V_{avg}=0.57$ V). $I_{avg} = 0.6$ A cm^{-2}

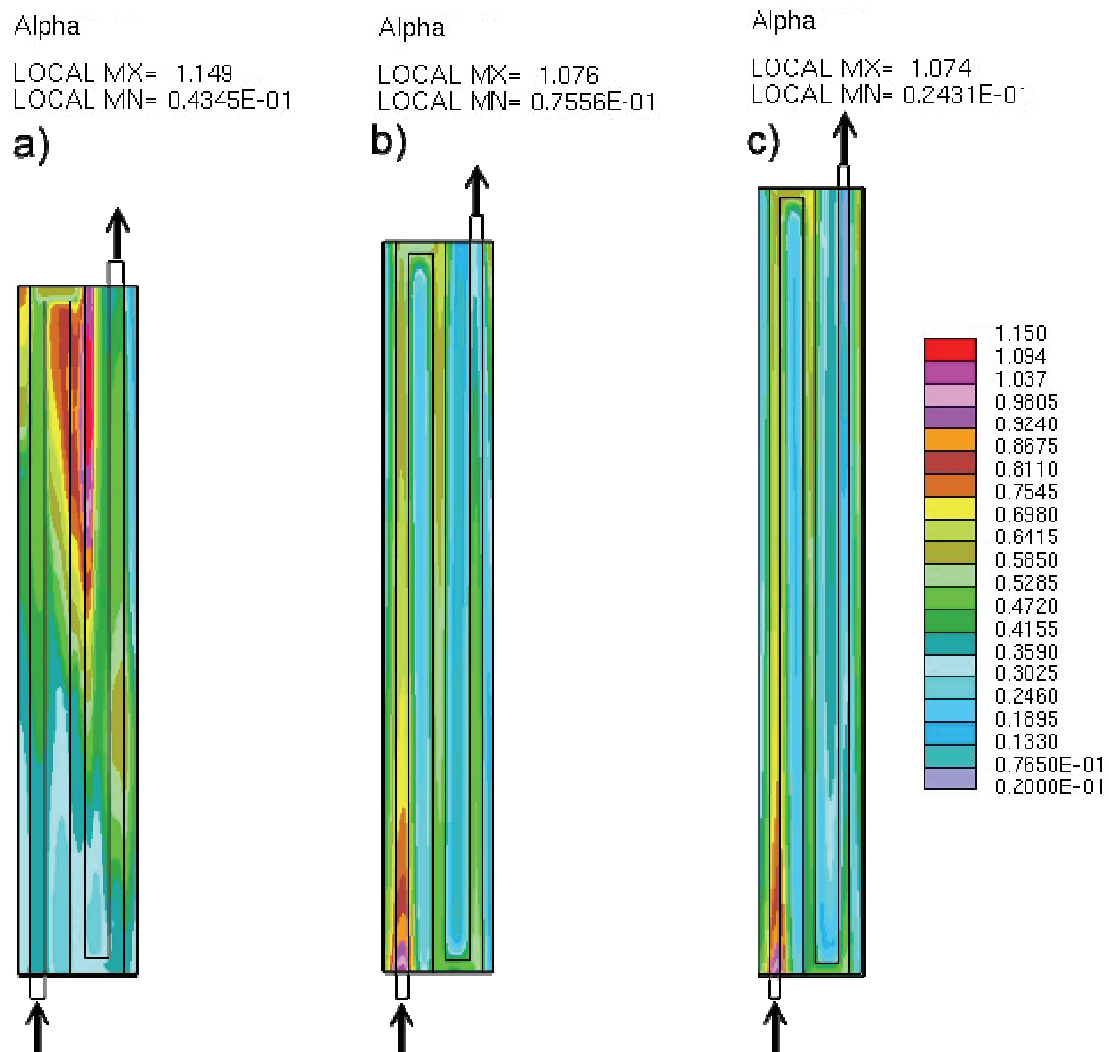


Figura 6-22. Distribución del flujo neto de agua por protón en la membrana y valores máximos y mínimos, α (alfa): **a)** Modelo 10/06, ($V_{avg}=0.59$ V); **b)** Modelo 12/05, ($V_{avg}=0.59$ V); **c)** Modelo 15/04, ($V_{avg}=0.59$ V). $I_{avg} = 0.6$ A cm^{-2}

6.4. Conclusiones

Se ha estudiado la influencia de los parámetros geométricos de la sección transversal del canal de flujo en el funcionamiento de una PEMFC. Se han analizado las distribuciones de velocidad, densidad de corriente, concentraciones de hidrógeno y oxígeno, temperatura y contenido de agua en la membrana para las 10 variantes del modelo correspondiente a una pila de combustible con un área reactiva de 256 mm², con placas con canales de flujo de tipo serpentin simple: 02/30, 03/20, 04/15, 05/12, 06/10, 10/06, 12/05, 15/04, 20/03 y 30/02.

Los resultados se han utilizado para discutir algunos de los aspectos más destacados que afectan al diseño de una PEMFC, con el objetivo de mejorar dicho diseño y optimizar su rendimiento.

Los modelos con secciones más anchas que altas ($C_H < C_W$) presentan distribuciones de corriente menos uniformes, con valores de intensidad máximos y mínimos menores, distribuciones de temperatura con mayores gradientes y valores más altos, y un bajo contenido de agua en la membrana, lo que determina un rendimiento global menor.

Por el contrario, los modelos con secciones más altas que anchas ($C_H > C_W$) presentan distribuciones de corriente más uniformes, con valores de intensidad máximos y mínimos mayores, distribuciones de temperatura con menores gradientes y valores más bajos, y un contenido de agua en la membrana superior, lo que permite obtener un mayor rendimiento. De entre estos modelos, el 10/06 y 12/05 son los que mejor combinación de variables presentan, como demuestran sus curvas de polarización.

Se ha podido comprobar la importancia de los parámetros geométricos de la sección transversal del canal de flujo de una PEMFC en su rendimiento de operación. En la práctica, el diseño de una PEMFC a menudo se reduce al diseño de las placas bipolares, que a su vez es básicamente el diseño de canales de flujo. Mejoras en el diseño de los canales de flujo de las placas bipolares podrían, por lo tanto, ayudar a alcanzar los objetivos fijados de costes y de funcionamiento para la comercialización de PEMFC.

6.5. Referencias

- [1] Hoogers Gregor: Fuel Cells technology handbook, USA. 2003
- [2] Xianguo Li, Imran Sabir, International Journal of Hydrogen Energy 30 (2005) 359-371.
- [3] Yoon,Young Gi; Lee,Won Yong; Park,Gu Gon; Yang,Tae Hyun; Kim,Chang Soo, Effects of channel and rib widths of flow field plates on the performance of a PEMFC, International Journal of Hydrogen Energy 30 (2005) 1363–1366.
- [4] Yuh Ming Ferng, Ay Su, A three-dimensional full-cell CFD model used to investigate the effects of different flow channel designs on PEMFC performance, International Journal of Hydrogen Energy 30 (2005) 4466-4476.
- [5] S. Shimpalee, S. Greenway, D. Spuckler, J.W. Van Zee, Predicting water and current distributions in a commercial size PEMFC, J. Power Sources 135 (2004) 79–87.
- [6] S. Shimpalee, S. Greenway, J.W. Van Zee, The impact of channel path length on PEMFC flow-field design, J. Power Sources 160 (2006) 398–406.
- [7] S. Shimpalee, J.W. Van Zee, Numerical studies on rib&channel dimension of flow-field on PEMFC performance, International Journal of Hydrogen Energy 32 (2007) 842 – 856
- [8] D. H. Jeon, S. Greenway, S. Shimpalee, J.W. Van Zee, The effect of serpentine flow-field designs on PEM fuel cell performance, International Journal of Hydrogen Energy 33 (2008) 1052 - 1066.
- [9] Sungho Lee, Heeseok Jeong, Byungki Ahn, Taewon Lim, Youngjin Son, Parametric study of the channel design at the bipolar plate in PEMFC performances, International Journal of Hydrogen Energy 33 (2008) 5691 - 5696.
- [10] Kap-Seung Choi, Hyung-Man Kim, Sung-Mo Moon, Numerical studies on the geometrical characterization of serpentine flow-field for efficient PEMFC, International Journal of Hydrogen Energy 36 (2011) 1613-1627.
- [11] Arnaud Morin, Feina Xu, Gérard Gebel, Olivier Diat, Influence of PEMFC gas flow configuration on performance and water distribution studied by SANS: Evidence of the effect of gravity, International Journal of Hydrogen Energy 36 (2011) 3096-3109.

- [12] Luis Valiño, Radu Mustata, María Isabel Gil, Jesús Martín, Effect of the relative position of oxygen–hydrogen plate channels and inlets on a PEMFC, *International Journal of Hydrogen Energy* 35 (2010) 11425-11436.
- [13] K. B. Shyam Prasad, S. Jyanti, Effect of channel-to-channel cross-flow on local flooding in serpentine flow-fields, *Journal of Power Sources* 180 (2008) 227-231.
- [14] C. Xu. T. S. Zhao, A new flow field design for polymer electrolyte-based fuel cells, *Electrochemistry Communications* 9 (2007) 497-503.
- [15] J. P. Feser, A. K. Prasad, S. G. Advani, On the relative influence of convection in serpentine flow fields of PEM fuel cells, *Journal of Power Sources* 161 (2006) 404-412.
- [16] S. Shimpalee, U. Beuscher, J.W. Van Zee, *J. Power Sources* 163 (1) (2006) 480.
- [17] W.k. Lee, S. Shimpalee, J.W. Van Zee, Verifying predictions of water and current distributions in a serpentin flow field PEMFC, *J. Electrochem. Soc.* 150 (2003) A341-8.
- [18] Star-CD 3.2 Methodology, CD adapco Group, <http://www.adapco.com>.
- [19] ES-PEMFC Methodology and Tutorial Manual, CD adapco Group, <http://www.adapco.com>.
- [20] P. H. Oosthuizen, L. Sun, K. B. McAuley: The Effect of Channel-to-Channel Gas Crossover on the Pressure and Temperature Distribution in PEM Fuel Cell Flow Plates, *Applied thermal engineering* 25 (2005) 1083-1096.
- [21] Dongryul Lee, Joongmyeon Bae, Evaluation of the net water transport through electrolytes in Proton Exchange Membrane Fuel Cell, *Journal of Power Sources* 191 (2009) 390-399.
- [22] F. N. Buchi, G. G. Scherer, *J. Electrochem. Soc.* 148 (2001) A183 – A188.
- [23] F. N. Buchi, S. Srinivasan, *J. Electrochem. Soc.* 144 (1997) 2767 – 2772.
- [24] S.W. Cha, R. O’Hayre, Y. Saito, F.B. Prinz, The scaling behavior of flow patterns: a model investigation, *Journal of Power Sources*, 134 (2004), 57–71.

A decorative graphic on the right side of the page. It features three blue circles of varying sizes, each composed of concentric rings in different shades of blue. These circles are arranged vertically, with the largest at the top, a medium one in the middle, and a large one at the bottom right. Thin blue lines intersect to form a triangular shape that frames the circles.

Capítulo 7

Diseños alternativos a los canales de flujo de tipo serpentín en el diseño de placas para pilas tipo PEM

Índice

CAPÍTULO 7: Diseños alternativos a los canales de flujo de tipo serpentín en el diseño de placas para pilas tipo PEM 189

7.1. Introducción.....	189
7.2. Análisis numérico.....	191
7.2.1. Modelo matemático	191
7.2.2. Geometría y operación	191
7.2.3. Resultados del análisis numérico.....	196
7.2.4. Conclusiones	203
7.3. Experimental.....	204
7.3.1. Diseño	205
7.3.2. Fabricación y montaje.....	211
7.3.3. Test de laboratorio	213
7.3.4. Resultados experimentales.....	216
7.3.5. Conclusiones	220
7.4. Trabajos futuros.....	222
7.5. Referencias	222

CAPÍTULO 7: Diseños alternativos a los canales de flujo de tipo serpentín en el diseño de placas para pilas tipo PEM

7.1. Introducción

Como se ha expuesto en capítulos anteriores, las placas en las que se integran los canales de flujo son uno de los componentes clave en una pila de combustible de tipo PEM. Entre sus funciones principales se pueden mencionar: servir de soporte mecánico al *stack*, mantener separados los diferentes reactantes, distribuir los reactantes a lo largo de la superficie catalizadora, conducir la corriente eléctrica generada o gestionar el agua y el calor producidos en el interior de la pila. Parte de estas funciones dependen directamente de las propiedades fisicoquímicas del material de las placas, mientras que otras tienen una relación más estrecha con la geometría de los canales de flujo [1].

Dado que la membrana de intercambio protónico sólo puede operar en presencia de agua líquida, es de vital importancia conseguir y mantener un nivel de hidratación de la membrana homogéneo y suficiente como para que la conductividad protónica no se vea disminuida y, a la vez, que dicho nivel de agua líquida no supere un máximo que se traduzca en la aparición del efecto denominado "**flooding**". La evacuación del calor generado durante la operación de la pila de combustible es otro punto clave para asegurar el buen funcionamiento de la misma. Una distribución homogénea de la temperatura sobre la MEA y que los valores de la misma no superen los 100 °C son condiciones indispensables para asegurar un funcionamiento óptimo del sistema y prolongar la vida útil de la membrana. Así, un diseño apropiado de los canales de flujo de una PEMFC permitirá potenciar las velocidades de transporte de reactivo en el propio canal así como en la GDL (**Gas Diffusion Layer**) antes de alcanzar la capa catalítica, donde tiene lugar la reacción. También será beneficioso en la gestión de agua del cátodo, con el fin de que el exceso se elimine de forma adecuada, manteniendo la membrana hidratada. Además, una distribución uniforme del combustible en el canal de flujo, proporcionará a su vez, una densidad de corriente homogénea en todo el área reactiva y, por tanto, una distribución uniforme de la temperatura, que generará menos tensiones mecánicas en la MEA, prolongando la vida útil de la PEMFC.

A pesar de que el coste total de fabricación de los diferentes elementos que componen una pila de tipo PEM se ha ido reduciendo paulatinamente a lo largo de los últimos años, el coste de las MEAs aún representa casi el 70% del coste total de un *stack* [2]. Por lo tanto, la vida útil de la MEA es una variable importante sobre la que se puede actuar para aumentar el rendimiento global del sistema.

Se han realizado múltiples estudios sobre el impacto que tienen las diferentes variables geométricas de los canales de flujo en distintos aspectos del funcionamiento de una PEMFC. En el Capítulo 5 se presenta una recopilación de los resultados más importantes. Entre ellos, Yoon et al. analizaron el efecto de diferentes configuraciones de canal/rib en el rendimiento de una PEMFC [3]; Ferng et al. analizaron el efecto de diferentes configuraciones de canales de flujo en una monocelda de 25 cm² [4]; Sungho Lee et al. [5] estudiaron el efecto de diferentes configuraciones de parámetros geométricos en el funcionamiento de una PEMFC con una configuración de canal simple recto. Recientes estudios analizan la influencia de la configuración de la sección transversal del canal de flujo [6, 7] y el efecto de la posición relativa de los flujos en el ánodo y cátodo [8, 9].

También se han analizado multitud de diseños diferentes para los canales de flujo de las placas (tipo pin, canales paralelos, canal en forma de serpentín, canales interdigitados, canales en espiral, canales integrados con canales de refrigeración, etc.) [1]. Muchos de estos diseños no permiten una distribución homogénea de la concentración de los reactivos sobre las capas catalíticas, lo que se traduce en un funcionamiento desigual del sistema a lo largo de la MEA.

El objetivo de este capítulo es el de proponer una nueva geometría de canales de flujo que permita obtener una distribución uniforme de los reactivos sobre las capas catalíticas, que pueda proporcionar a su vez, una densidad de corriente homogénea en toda el área reactiva y, por tanto, una distribución uniforme de la temperatura, una hidratación correcta de la membrana, evitando ineficiencias por deshidratación, ocasionando menos tensiones mecánicas en la MEA y prolongando la vida útil de la PEMFC.

Se han analizado dos modelos geométricos diferentes de canales de flujo: Un nuevo modelo (Mod #1) con canales de flujo de tipo HDFF (Acrónimo en inglés de *Homogeneous Distribution Flow Field*; Campo de Flujo con Distribución Homogénea), basado en un diseño de placa para pila de combustible con cámara de distribución de reactivo (Solicitud de patente nº P201130022), y otro modelo (Mod #2) de geometría con canales de flujo de tipo SFF (Acrónimo en inglés de *Serpentine Flow Field*, Campo de flujo tipo Serpentín) como referencia para hacer un análisis comparativo.

Este capítulo pretende dos objetivos diferentes. Uno de ellos es la comparación de los resultados de los análisis numéricos de ambas geometrías e investigar la influencia que pueden tener en el rendimiento de la PEMFC. El otro objetivo consiste en la fabricación de varias monoceldas con las diferentes geometrías, testeo en un banco de ensayos de laboratorio y análisis de los resultados obtenidos, comparándolos con los resultados de los análisis numéricos.

7.2. Análisis numérico

7.2.1. Modelo matemático

El modelo matemático utilizado es el que se describe en el Capítulo 2 de este proyecto de tesis. Concretamente, se ha utilizado una técnica de volumen de control basada en un programa comercial, STAR-CD (versión 3.26) junto con el módulo experto para PEMFC (**es-pemf** versión 2.2) [11] para resolver el modelo matemático basado en el acoplamiento de las ecuaciones de la fluidodinámica (CFD) y procesos específicos de transporte y reacciones electroquímicas de la PEMFC.

7.2.2. Geometría y operación

7.2.2.1. Geometría nueva (HDFE)

El modelo Mod #1 con canales de flujo de tipo HDFE, se compone de una o varias unidades básicas paralelas, de 6.25 cm^2 de área reactiva cada una ($12.5 \times 50 \text{ mm}$), que permiten un reparto previo de los reactivos antes de entrar en la zona de canales de flujo, donde entran en contacto con las respectivas zonas catalíticas (Figura 7-1). El sentido del flujo de los reactivos sobre la MEA es en contracorriente como se aprecia en la Figura 7-3 (pág. 193).

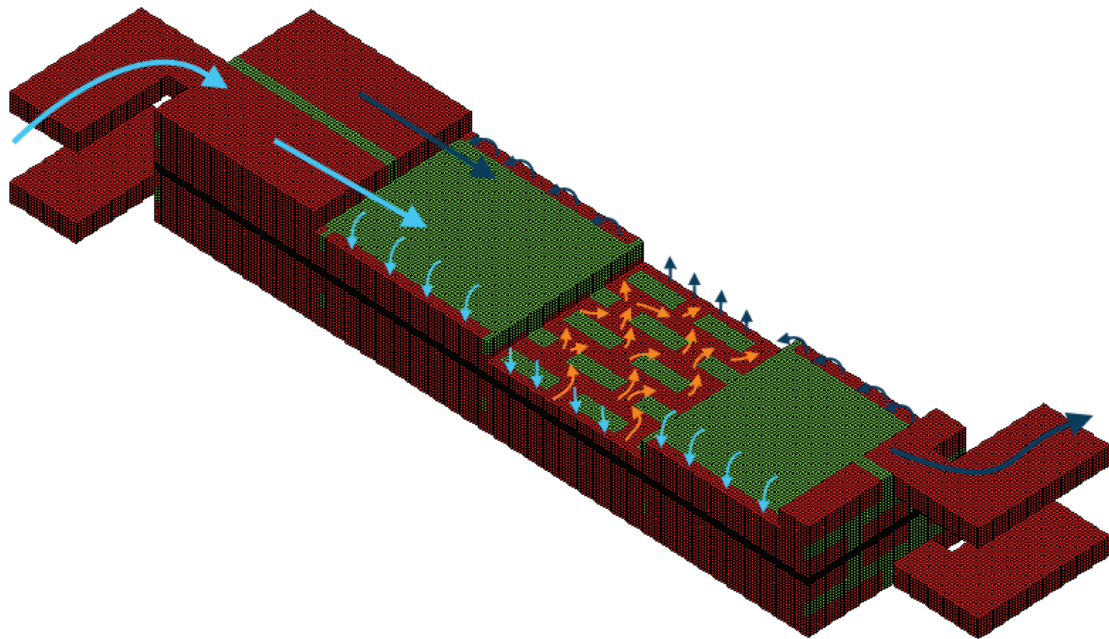


Figura 7-1. Modelo tridimensional de una unidad básica (Mod #1)

La Figura 7-2 muestra un detalle del anverso y del reverso de la geometría correspondiente a una unidad básica de las que se compone el modelo Mod #1. Cada unidad básica, como puede apreciarse en la Figura 7-2, consta de cinco zonas: cámara de distribución del reactivo **A**, conductos de inyección del reactivo **B**, zona de canales de flujo para la distribución del reactivo sobre los electrodos **C**, conductos de extracción del reactivo **D** y cámara de recogida **E**. Los reactivos (combustible y oxidante) se introducen en la pila a través de las correspondientes cámaras de distribución, que funcionan como pequeños almacenamientos distribuidos por toda la superficie de la pila. Desde estos pequeños almacenamientos, los reactivos se suministran a los canales de flujo a través de los conductos de inyección. En la zona de canales de flujo, los reactivos circulan a través de los mismos, difundiéndose a través de la zona porosa de los electrodos (GDL) y alcanzando la capa catalítica, donde reaccionan. La cámara de distribución de reactivo se sitúa en el anverso de la placa y los canales de flujo en el reverso de la misma, entendiéndose como reverso la parte de la placa que está en contacto con la MEA.

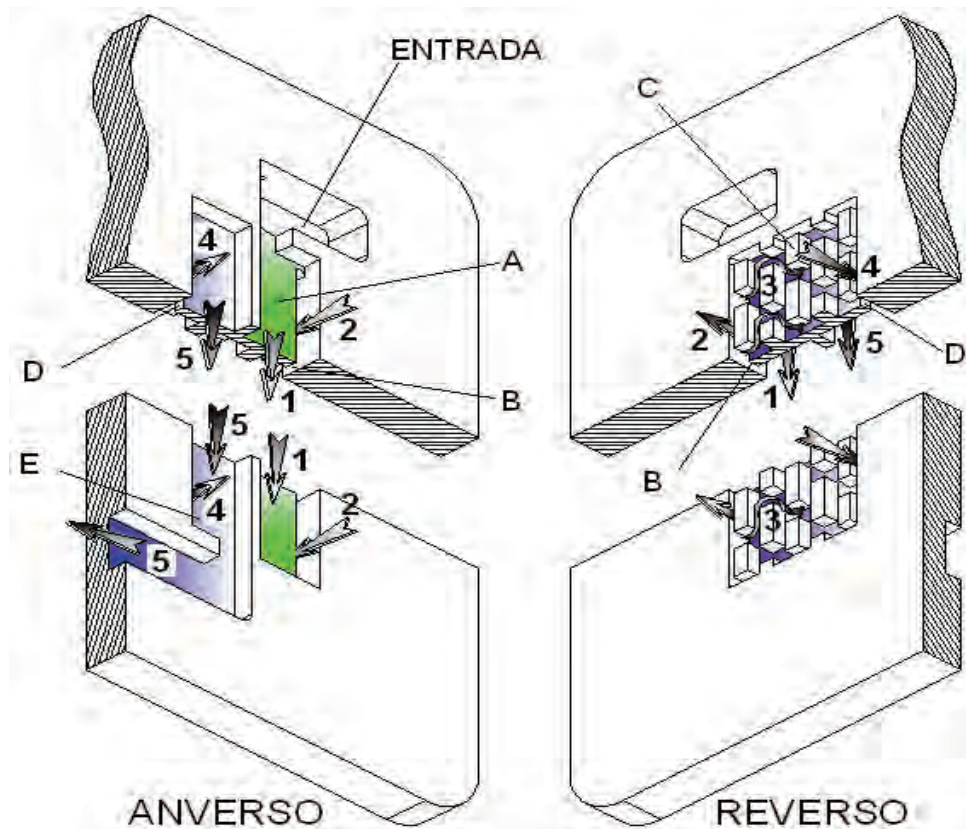


Figura 7-2. Detalle anverso y reverso de una unidad básica (Mod #1)

Los números del 1 al 5 indican las sucesivas etapas que realiza el reactivo en su recorrido a través de la placa:

- Paso 1.- Rellenar la cámara de distribución **A**.

- Paso 2.- A través de los conductos de inyección **B** el reactivo pasa del anverso al reverso de la placa, a la zona de los canales de flujo.
- Paso 3.- El reactivo serpentea entre los obstáculos de los canales de flujo **C**, entrando en contacto con el catalizador de la MEA.
- Paso 4.- El reactivo residual, a través de los conductos de extracción **D**, retorna al anverso de la placa.
- Paso 5.- Mediante la cámara de recogida **E**, el reactivo sobrante se recoge y conduce al orificio de salida.

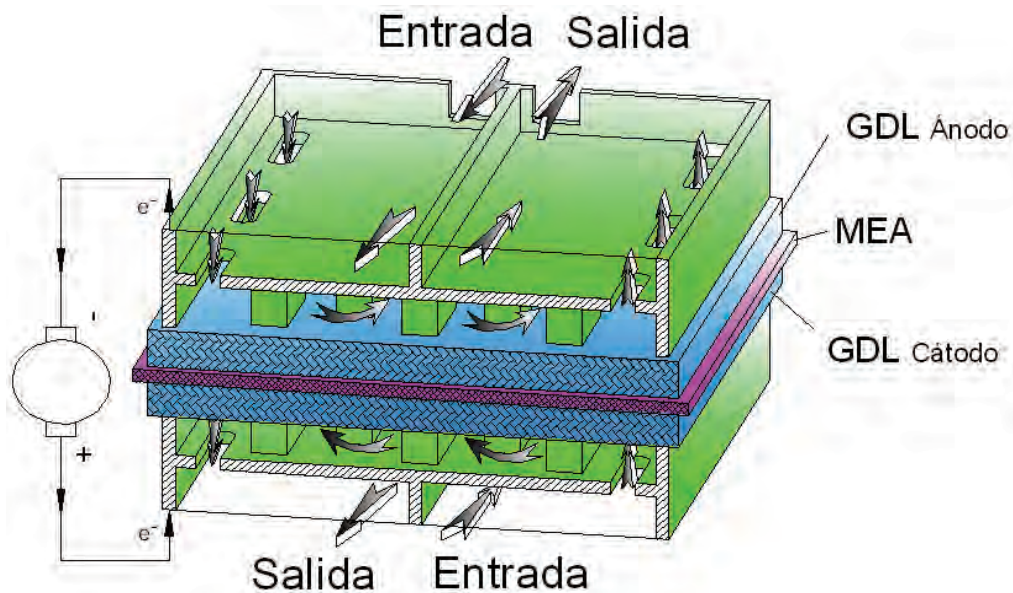


Figura 7-3. Esquema de funcionamiento de cada unidad básica (Mod #1)

El campo de flujo de cada unidad básica se compone de seis canales paralelos de 1.2 mm de ancho y 1.2 mm de profundidad. Están separados por líneas de obstáculos de 1.2 mm de espesor e interconectados por espacios abiertos entre obstáculos de 1.6 mm.

Con esta geometría se persiguen tres objetivos principales. El primero consiste en dividir el área reactiva total de la placa en áreas reactivas reducidas (unidades básicas), donde el proceso está más controlado y se podría obtener una densidad de corriente mayor. Las unidades básicas de una misma placa funcionarían como micro pilas conectadas en paralelo.

El segundo objetivo es la distribución de los reactivos en su máxima concentración a lo largo de una superficie similar al área reactiva antes de introducirse en los canales de flujo. De esta manera, la distribución de la concentración de los reactivos es más homogénea.

El tercer objetivo se refiere a las funciones de la zona de canales de flujo: la distribución homogénea de los reactivos sobre las capas catalíticas de la MEA maximizando la superficie de contacto entre ambos, y la evacuación rápida y homogénea del calor producido.

Este concepto de placa para pila de combustible es el que se refleja en la memoria técnica realizada con motivo de la solicitud de patente P201130022, titulada: **“PLACA PARA PILAS DE COMBUSTIBLE CON CÁMARA DE DISTRIBUCIÓN DE REACTIVO”**, y que consiste en una placa con cámara de distribución de reactivo caracterizada porque está dividida en unidades básicas capaces de funcionar como placa anódica o catódica de una pila independiente, estando dichas unidades básicas conectadas eléctricamente en paralelo a través del cuerpo de la propia placa. Esta división en unidades básicas favorece la distribución homogénea de los reactivos a lo largo de toda la superficie del ánodo y el cátodo.

Los dos modelos basados en esta geometría que se han analizado tienen áreas reactivas de 6.25 y 25 cm², y están compuestas por una y cuatro unidades básicas respectivamente (Figura 7-5, pág. 195).

7.2.2.2. Geometría de referencia (SFF)

El modelo Mod #2, con canales de flujo de tipo SFF, consiste en un único canal de 1.44 mm² (1.2 mm x 1.2 mm) de sección transversal que recorre todo el área reactiva. La distancia entre canales es de 1.2 mm. En este modelo, los flujos en ánodo y cátodo circulan en concordancia. La Figura 7-4 muestra el modelo con canales de flujo de tipo SFF analizado. Los dos modelos basados en esta geometría que se han analizado tienen áreas reactivas de 6.25 y 25 cm² (Figura 7-5).

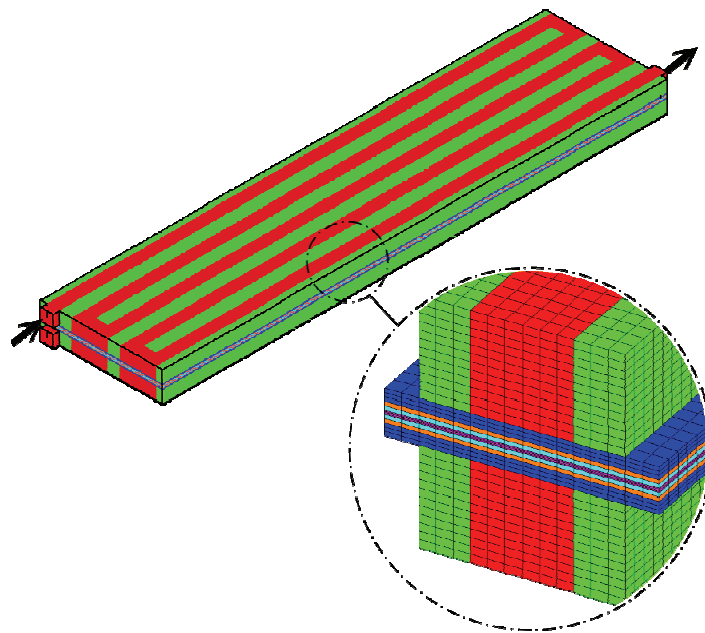


Figura 7-4. Modelo con canales de flujo de tipo serpentín (SFF), Mod #2

7.2.2.3. Condiciones de operación

Se han analizado dos modelos de cada geometría, con áreas reactivas de 6.25 y 25 cm² (Figura 7-5). Las condiciones de funcionamiento han sido idénticas en todos los casos. Los flujos másicos y las fracciones molares se han calculado tanto para el ánodo como para el cátodo fijando la densidad de corriente y la estequiometría ánodo/cátodo (1.2/2.0) a unas condiciones de humidificación determinadas. La presión de operación es una atmósfera y la temperatura de la pila se ha mantenido constante a 70 °C. En la Tabla 7-1 se representan las condiciones de operación de ánodo y cátodo utilizadas en el análisis numérico de todos los casos.

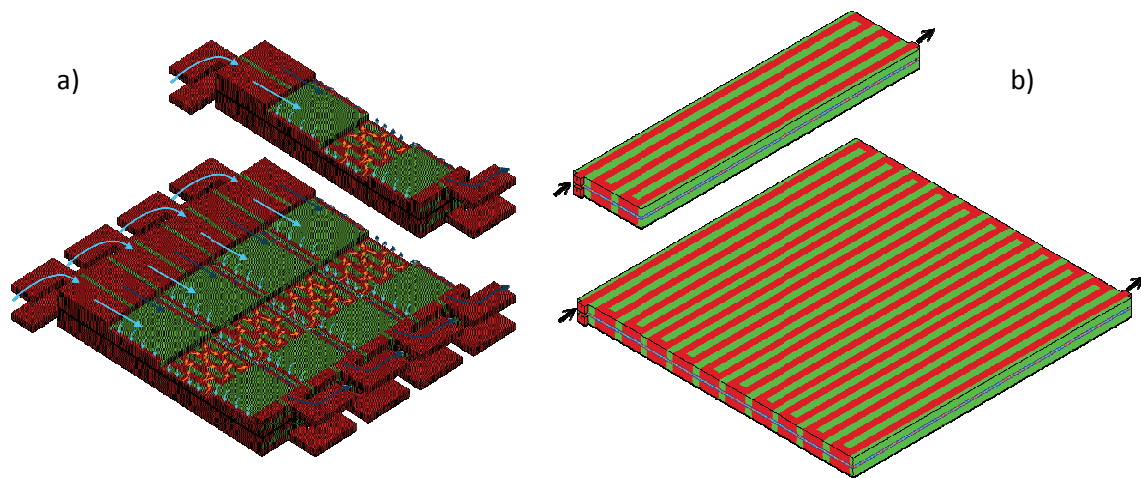


Figura 7-5. Modelos analizados: a) Modelos con canales de flujo de tipo HDFS, Mod #1; b) Modelos con canales de flujo de tipo SFF, Mod #2

Tabla 7-1. Condiciones de operación utilizadas en las simulaciones

	Ánodo	Cátodo
Gas	H ₂	Aire
Coeficiente estequiométrico	1.2	2.0
Temperatura de entrada (°C)	80	70
Temperatura de rocío (°C)	80	70
Condiciones de operación de la pila		
Presión de operación (kPa)	101	
Temperatura de operación (°C)	70	

7.2.3. Resultados del análisis numérico

Para investigar la influencia que tienen ambas geometrías en el rendimiento global de la pila, se presentan los resultados globales del análisis numérico junto con los datos observados en diferentes variables electroquímicas sobre la membrana a una intensidad de corriente de 0.6 A cm^{-2} .

La Figura 7-6 muestra las curvas de polarización y de potencia para ambas geometrías, obtenidas para los modelos de 6.25 cm^2 de área reactiva. Aunque para ambos modelos se observan mínimas diferencias en el comportamiento global, es la geometría con canales de tipo SFF la que presenta mejor comportamiento.

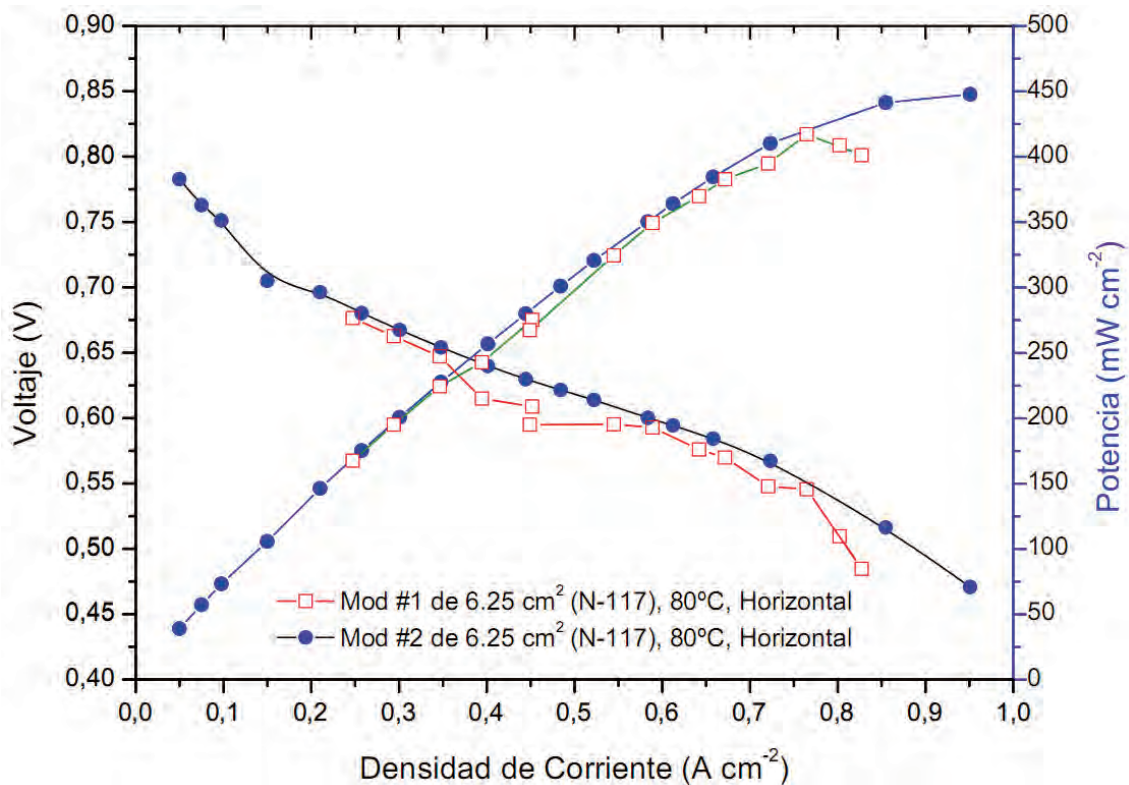


Figura 7-6. Curvas de polarización y potencia para los modelos Mod #1 y Mod #2 de 6.25 cm^2 de área reactiva

Los valores obtenidos en la simulación numérica del modelo con campo de flujo con canales de tipo serpentin de 6.25 cm^2 de área reactiva, y que se recogen en la Figura 7-6, son similares a los obtenidos en otros estudios que también utilizaron campos de flujo del mismo tipo [12-17]. En la Tabla 7-2 se presenta un resumen de las condiciones de operación utilizadas en dichos estudios.

Tabla 7-2. Condiciones de operación en diferentes estudios publicados

Referencia	[12]	[13]	[14]	[15]	[16]	[17]	
Gas	40% H ₂ 60% N ₂	40% H ₂ 60% N ₂	H ₂	40% H ₂ 60% N ₂	40% H ₂ 60% N ₂	H ₂	
ÁNODO	T. de entrada (°C)	70	65	80	65	80	80
	T. de rocío (°C)	70	65	80	65	80	80
	Humedad relativa (%)	100	100	>100	100	>100	>100
	Coef. estequiométrico	1.2	1.2	1.2	1.2	1.2	1.2
Gas	Aire	Aire	Aire	Aire	Aire	Aire	
CÁTODO	T. de entrada (°C)	70	65	70	65	70	70
	T. de rocío (°C)	70	65	70	65	70	70
	Humedad relativa (%)	100	100	100	100	100	100
	Coef. estequiométrico	2.0	2.0	2.0	2.5	2.0	2.0
PILA	T. operación (°C)	70	65	70	65	70	70
	P. operación (kPa)	101	101	101	101	101	101
	Área reactiva (cm ²)	480	25	200	25	25	10

7.2.3.1. Modelos de 6.25 cm² de área reactiva

La Figura 7-7 muestra la distribución de la densidad de corriente en la superficie de la MEA, la Figura 7-8 el contenido neto de agua en la membrana (λ), la Figura 7-9 el flujo neto de agua por protón a través de membrana (α) y la Figura 7-10 la distribución de temperatura en la superficie de la MEA, para los modelos de 6.25 cm² de área reactiva. En el pie de las figuras se indican los valores máximos y mínimos para cada variable y modelo.

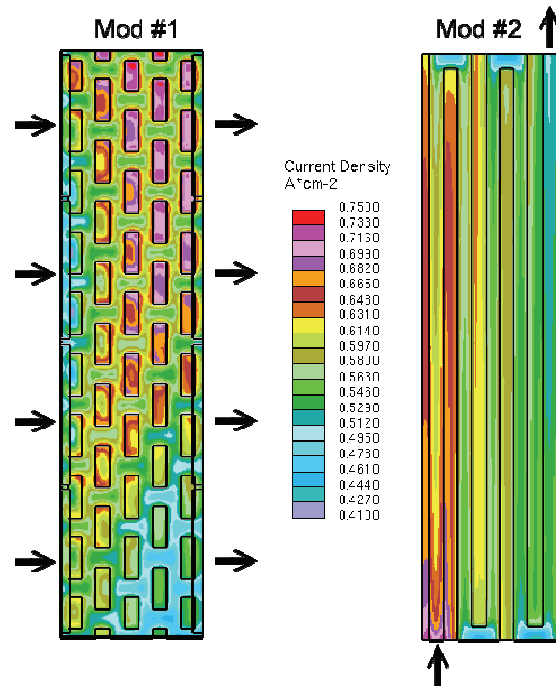


Figura 7-7. Densidad de corriente en la membrana ($A \cdot cm^{-2}$). Modelos de 6.25 cm^2 de área reactiva. $I_{avg} = 0.6 \text{ A} \cdot cm^{-2}$ (Mod #1: $I = 0.42 \div 0.74 \text{ A} \cdot cm^{-2}$, Mod #2: $I = 0.44 \div 0.74 \text{ A} \cdot cm^{-2}$)

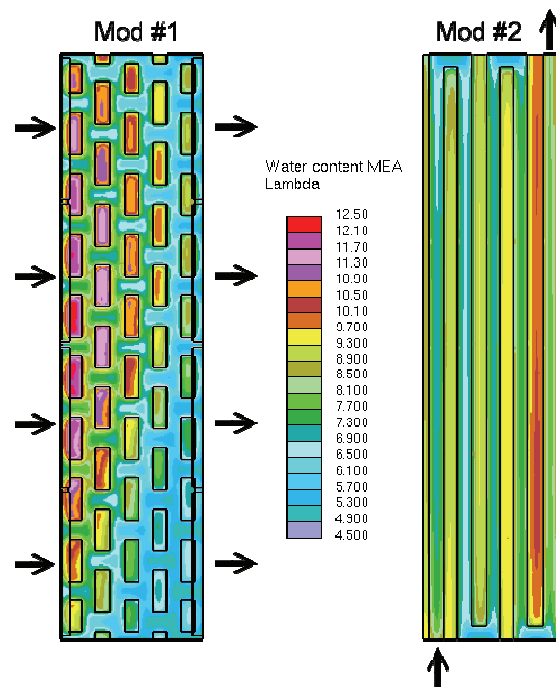


Figura 7-8. Contenido neto de agua en la membrana (λ). Modelos de 6.25 cm^2 de área reactiva. $I_{avg} = 0.6 \text{ A} \cdot cm^{-2}$. (Mod #1: $\lambda = 4.9 \div 12.2$, Mod #2: $\lambda = 5 \div 10.9$)

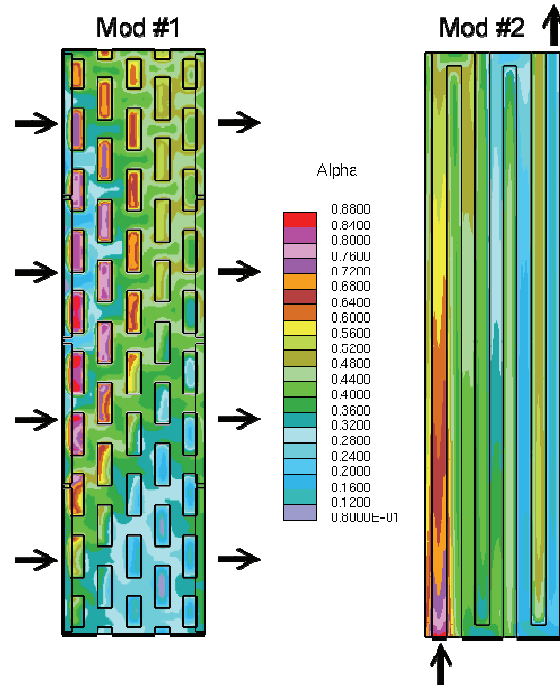


Figura 7-9. Flujo neto de agua por protón a través de la MEA (α). Modelos de 6.25 cm² de área reactiva. $I_{avg} = 0.6 \text{ A cm}^{-2}$. (Mod #1: $\alpha=0.87\text{E}-01 \div 0.88$, Mod #2: $\alpha=0.12 \div 0.87$)

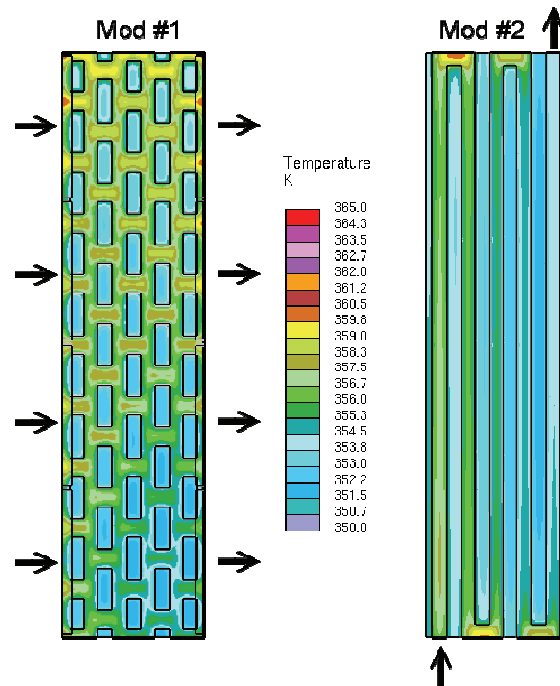


Figura 7-10. Temperatura en la superficie de la membrana (K). Modelos de 6.25 cm² de área reactiva. $I_{avg} = 0.6 \text{ A cm}^{-2}$. (Mod #1: $T=351.6 \div 361.4 \text{ K}$, Mod #2: $T=351.7 \div 360.4 \text{ K}$)

El modelo Mod #1 presenta valores de densidad de corriente máximo y mínimo similares a los que presenta el modelo Mod #2. En ambas geometrías se observa que la densidad de corriente es mayor en las zonas bajo *rib* que en la zona de canales. El contenido neto de agua en la membrana (λ) también es mayor en estas zonas. Esto puede ser debido a que la evacuación del calor producido por la reacción en la zona catalítica es más rápida a través del material de la placa que a través del canal de flujo. Por tanto, la temperatura en la superficie de la MEA bajo *rib* es menor que bajo los canales.

El contenido de agua en la membrana está directamente relacionado con la conductividad protónica de la MEA, de tal manera que un contenido de agua alto conlleva una conductividad protónica alta. Así, en las zonas bajo *rib* la conductividad protónica es mayor, donde el flujo neto de agua por protón (α) también es mayor, reflejando que en el transporte de agua el efecto del arrastre electro-osmótico es predominante ($\alpha > 0$). En el modelo Mod #2 hay un aumento del contenido de agua en la membrana (λ) al final del recorrido del canal, coincidiendo con una menor actividad electroquímica. Esto podría ser debido a una disminución de la concentración de los reactivos en esa zona.

Ambas geometrías presentan distribuciones de densidad de corriente bastante homogéneas. En el modelo Mod #2, en la zona cercana a la entrada se refleja una actividad electroquímica ligeramente superior, con valores de densidad de corriente, temperatura y flujo neto de agua por protón (α) cercanos a los valores máximos, aumentando el rendimiento local. Esto puede ser debido a la coincidencia de las máximas concentraciones de hidrógeno y oxígeno a la entrada en un modelo con flujo paralelo.

En el modelo Mod #2, a medida que se avanza en el recorrido del canal, todas las variables anteriormente mencionadas presentan valores cada vez más bajos como consecuencia de la disminución de la actividad electroquímica. Esta disminución podría tener su origen en el descenso de la fracción másica de oxígeno en el cátodo.

La distribución de temperatura en ambas geometrías es bastante homogénea, presentando un gradiente menor de 10 °C. En el modelo Mod #2 aparecen puntos calientes en los cambios de dirección.

7.2.3.2. Modelos de 25 cm² de área reactiva

La Figura 7-11 muestra la distribución de la densidad de corriente en la superficie de la MEA, la Figura 7-12 el contenido neto de agua en la membrana (λ), la Figura 7-13 el flujo neto de agua por protón a través de membrana (α) y la Figura 7-14 la distribución de temperatura en la superficie de la MEA, para los modelos de 25 cm² de área reactiva. En el pie de las figuras se indican los valores máximos y mínimos para cada variable y modelo.

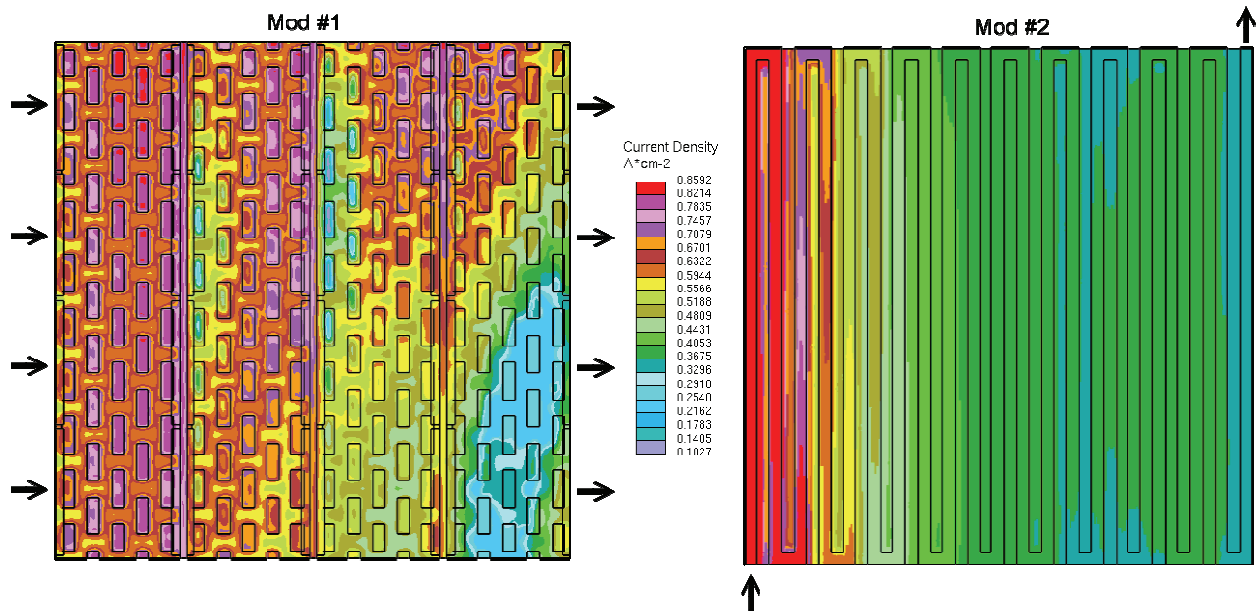


Figura 7-11. Densidad de corriente en la membrana ($A\ cm^{-2}$). Modelos de $25\ cm^2$ de área reactiva. $I_{avg} = 0.6\ A\ cm^{-2}$. (Mod #1: $I=0.1\div 0.86\ A\ cm^{-2}$, Mod #2: $I=0.33\div 1\ A\ cm^{-2}$)

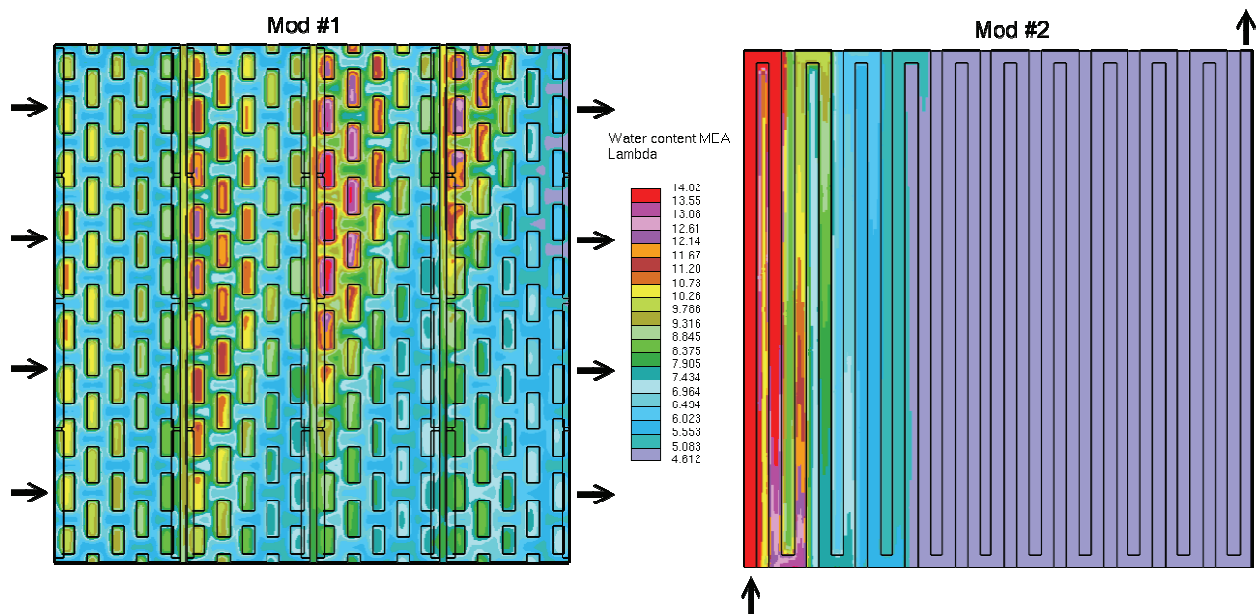


Figura 7-12. Contenido neto de agua en la membrana (λ). Modelos de $25\ cm^2$ de área reactiva. $I_{avg} = 0.6\ A\ cm^{-2}$. (Mod #1: $\lambda=4.6\div 14$, Mod #2: $\lambda=4.2\div 14.3$)

Influencia del diseño de los canales de flujo en el rendimiento de una pila de combustible de membrana de intercambio protónico (PEMFC)

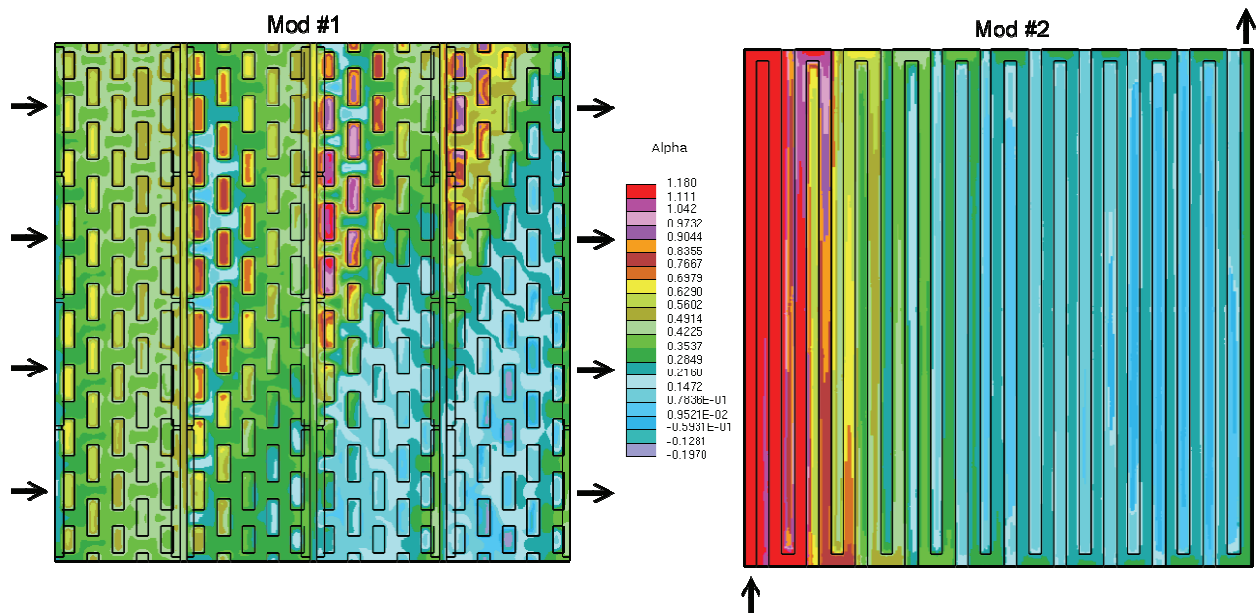


Figura 7-13. Flujo neto de agua por protón a través de la MEA (α). Modelos de 25 cm² de área reactiva. $I_{avg} = 0.6 \text{ A cm}^{-2}$. (Mod #1: $\alpha = -0.19 \div 1.18$, Mod #2: $\alpha = -0.33\text{E-}01 \div 1.75$)

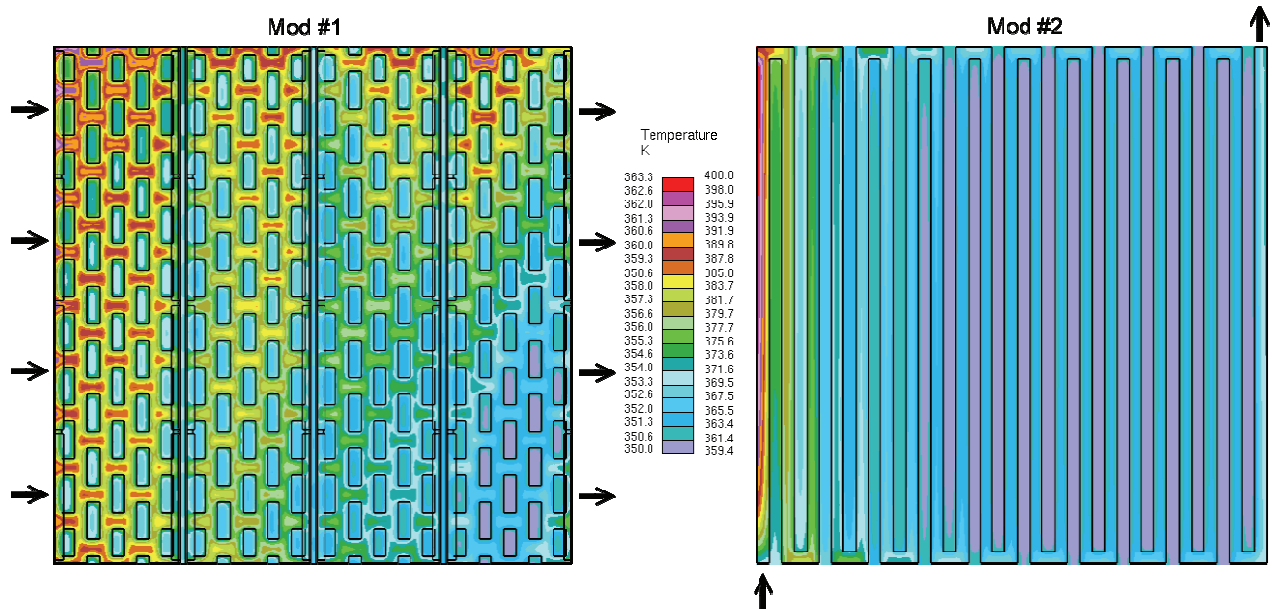


Figura 7-14. Temperatura en la superficie de la membrana (K). Modelos de 25 cm² de área reactiva. $I_{avg} = 0.6 \text{ A cm}^{-2}$. (Mod #1: $T = 350 \div 363.3 \text{ K}$, Mod #2: $T = 359.4 \div 400 \text{ K}$)

El modelo Mod #1 presenta valores de densidad de corriente máximo y mínimo menores que el Mod #2, aunque la distribución es mucho más homogénea. En las dos primeras unidades básicas se observa que la densidad de corriente es mayor en las zonas bajo *rib* que en la zona de canales. El contenido neto de agua en la membrana (λ) también es mayor en estas zonas. Esto puede ser debido a que la evacuación del calor producido por la reacción en la zona catalítica es más rápida a través del material de la placa que a través del canal de flujo. Por tanto, la temperatura en la superficie de la MEA bajo *rib* es menor que bajo los canales.

En las zonas bajo *rib* de las dos primeras unidades básicas, donde el contenido de agua en la membrana es superior, la conductividad protónica es mayor y el flujo neto de agua por protón (α) también es mayor, reflejando que en el transporte de agua el efecto de arrastre electro-osmótico es predominante ($\alpha > 0$).

En las dos últimas unidades básicas del modelo Mod #1 se observa una zona con valores bajos de densidad de corriente que reflejan un menor arrastre electro-osmótico (valores bajos del parámetro α , incluso negativos). En esta zona, los valores bajos de densidad de corriente, flujo neto de agua por protón y temperatura, junto con el alto contenido de agua en la MEA podrían indicar la aparición de “*flooding*”.

El modelo Mod #2 presenta valores de densidad de corriente máximo y mínimo superiores pero una distribución mucho menos homogénea. En la zona cercana a la entrada se refleja una gran actividad electroquímica, con valores de densidad de corriente, temperatura, contenido de agua (λ), flujo neto de agua por protón (α) elevados, aumentando el rendimiento local. Esto puede ser debido a la coincidencia de las máximas concentraciones de hidrógeno y oxígeno a la entrada en un modelo con flujo paralelo.

A medida que se avanza en el recorrido del canal, todas las variables anteriormente mencionadas presentan valores cada vez más bajos como consecuencia de la disminución de la actividad electroquímica.

7.2.4. Conclusiones

El modelo Mod #1 presenta menores valores de intensidad de corriente que el modelo Mod #2. Por el contrario, las distribuciones de intensidad de corriente, contenido de agua (λ), flujo neto de agua por protón (α) y temperatura son más homogéneas en el modelo Mod #1. Las variaciones en la densidad de corriente causan variaciones locales en la temperatura (provocando la aparición de puntos calientes), en la concentración de agua y en la conductividad de la membrana. Estas inhomogeneidades causan tensiones mecánicas en el sistema que podrían ser la causa de la reducción de la vida útil de la MEA. Estas diferencias son más evidentes a medida que el área reactiva aumenta.

Por otra parte, la caída de presión calculada en el cátodo es mucho menor en el modelo Mod #1 que en el Mod #2. Este exceso de presión dentro de la pila también puede producir

tensiones en las placas, juntas, GDLs y MEA, haciendo necesaria más energía para la bomba de impulsión en el cátodo.

En general, la nueva geometría del modelo Mod #1 podría optimizar el rendimiento, la eficiencia y aumentar la durabilidad de la MEA frente a la geometría con canales del tipo SFF.

7.3. Experimental

Se han fabricado placas con geometrías diferentes para completar cuatro monoceldas. Dos monoceldas que, incluyendo placas idénticas en ánodo y cátodo con la nueva geometría (Mod #1), disponen de campos de flujo de 6.25 y 25 cm² de área reactiva respectivamente. Las otras dos monoceldas también incluyen placas idénticas en ánodo y cátodo con la geometría de referencia (Mod #2), con campos de flujo de 6.25 y 25 cm² de área reactiva respectivamente. Todas las placas se han mecanizado a partir de una plancha de grafito **BMC 940** de 3.56 mm de espesor [18].

Se han seleccionado MEAs prefabricadas de tres capas (membrana + capas catalíticas) de 25 cm² de área reactiva [19]. La membrana polimérica es de tipo Nafion® N-117 y está recubierta con una capa de catalizador en ambos lados (Figura 7-15). Este catalizador contiene una carga de 0,3 mg Pt cm⁻² de área reactiva.

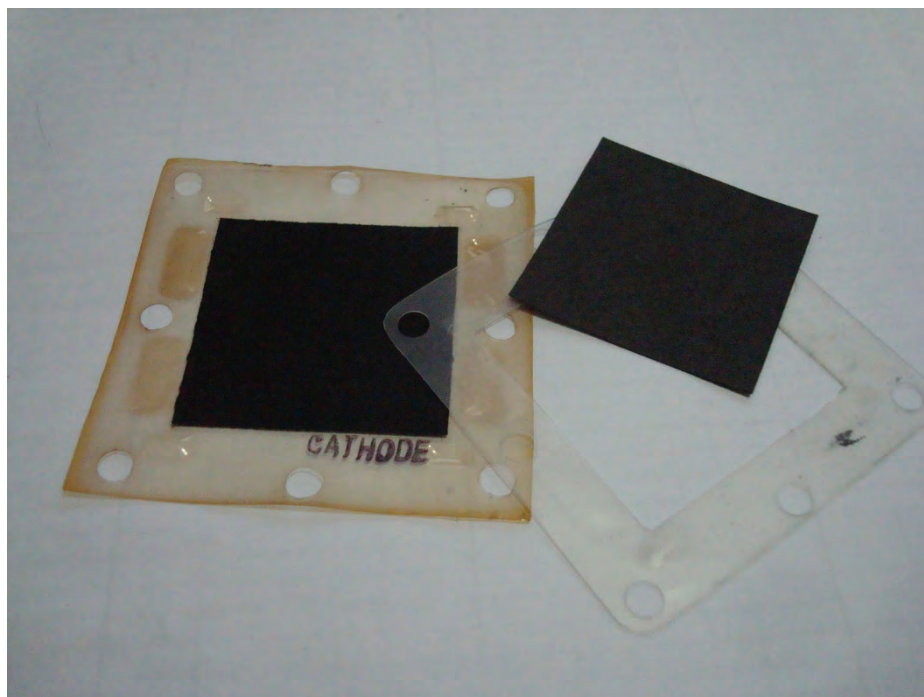


Figura 7-15. MEA de 3 capas tipo Nafion® N-117 de 25 cm² de área reactiva

Para las capas de difusión se ha utilizado una **GDL H23 15 I3 C1** [20]. Se trata de una GDL de 260 micras de espesor, compuesta por una capa de papel de carbón sobre la que se soporta una microcapa porosa de carbón teflonado (Figura 7-16). Dado que el teflón es un material hidrófugo, esta microcapa facilita la extracción del agua desde las capas catalíticas.

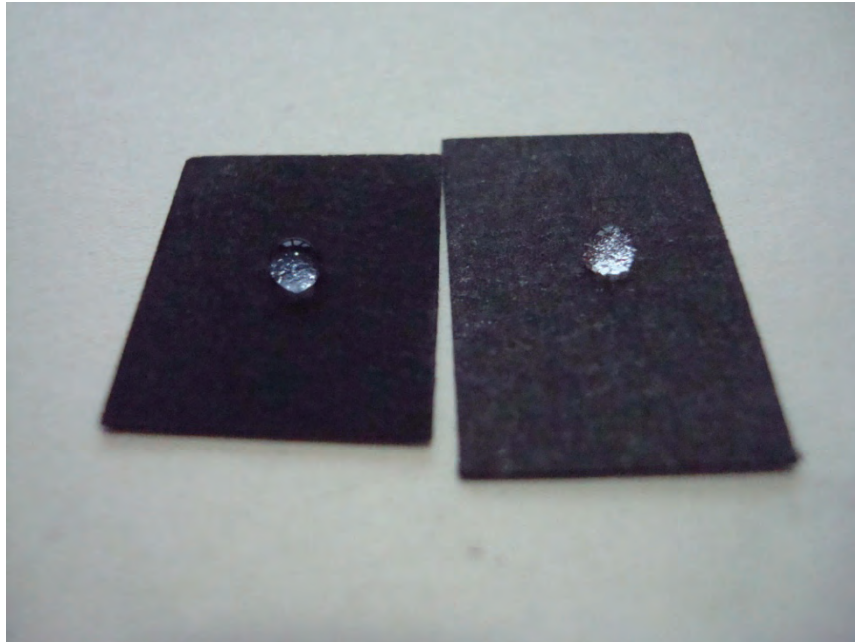


Figura 7-16. GDL con microcapa porosa de carbón teflonado

Las placas terminales están fabricadas en aluminio con el fin de aligerar el conjunto. Disponen de todas las conexiones necesarias para asegurar el suministro de los reactivos a las placas.

Con el fin de evitar fugas de gas, se dispone de juntas de silicona de 0.3 mm de espesor entre las placas terminales de aluminio y las placas de grafito. Por otra parte, ánodo y cátodo están aislados eléctricamente para evitar cortocircuitos.

7.3.1. Diseño

El diseño de los campos de flujo de las placas es idéntico al utilizado en los análisis numéricos. Por otra parte, se ha completado el diseño de las placas de grafito junto con el de las placas terminales de aluminio siguiendo un criterio de modularidad, que permite que la misma placa sirva independientemente para ser utilizada en la zona anódica y catódica (Figura 7-17). Se incluyen además orificios para alojar los elementos de sujeción del sistema y conductos para refrigeración por si fueran necesarios. Todo el diseño geométrico se ha realizado con el software de CAD 3D Solid Edge.

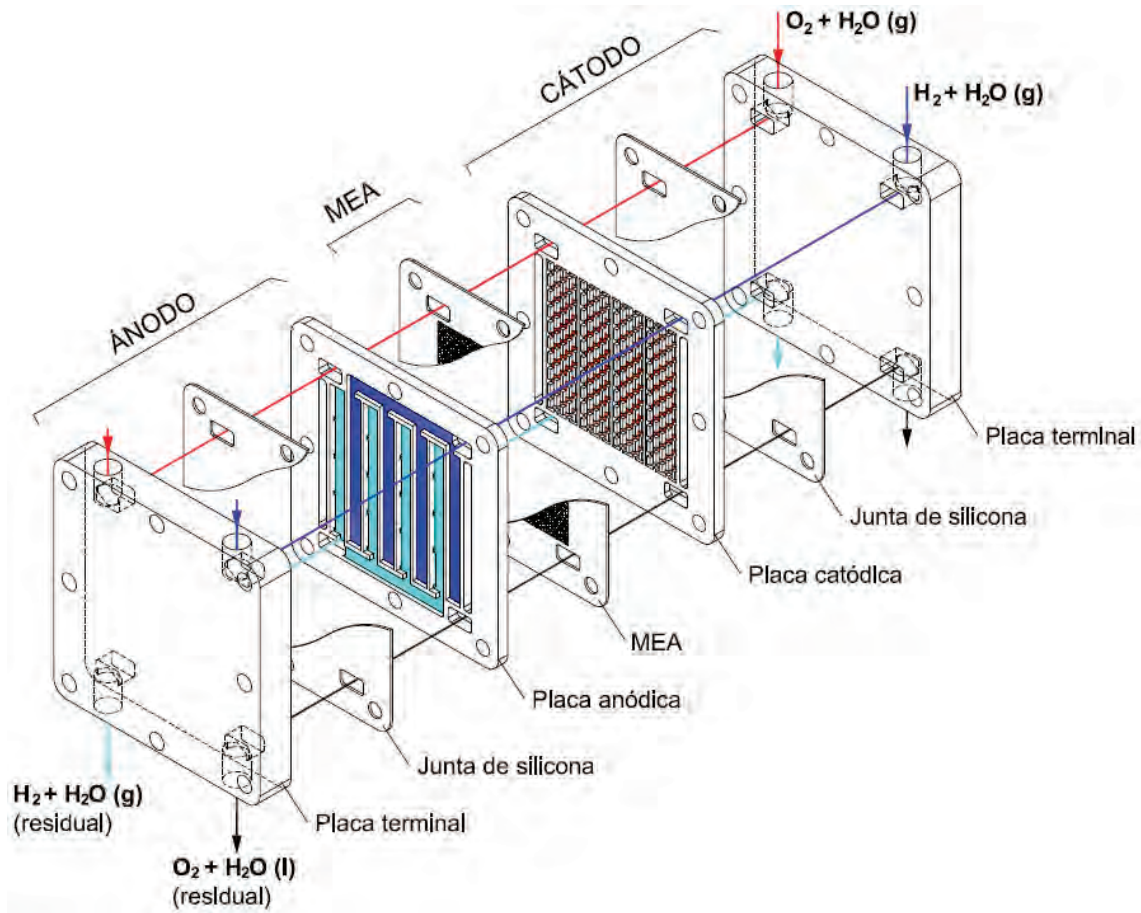


Figura 7-17. Diseño modular de una monocelda

7.3.1.1. Placas para monocelda de 25 cm². Mod #1

La placa diseñada para contener el campo de flujo con la nueva geometría (Mod #1) posee un diseño modular que permite que la misma placa sirva independientemente para ser utilizada en la zona anódica y catódica. Este diseño de placa se encuentra en proceso de patente (Solicitud de patente nº P201130022). El campo de flujo se compone de cuatro unidades básicas que ocupan 6.25 cm² de superficie cada una y que funcionan de manera independiente. Por tanto, el conjunto equivale a cuatro micro pilas de 6.25 cm² de área reactiva interconectadas en paralelo, haciendo un total de 25 cm² de área reactiva. El campo de flujo de cada unidad básica se compone de seis canales paralelos de 1.2 mm de ancho y 1.2 mm de profundidad. Están separados por líneas de obstáculos de 1.2 mm de espesor e interconectados por espacios abiertos entre obstáculos de 1.6 mm.

En la Figura 7-18 se muestra el anverso de la placa diseñada, donde se encuentran las cámaras de distribución de los reactivos. El campo de flujo se encuentra en el reverso de la placa (Figura 7-19).

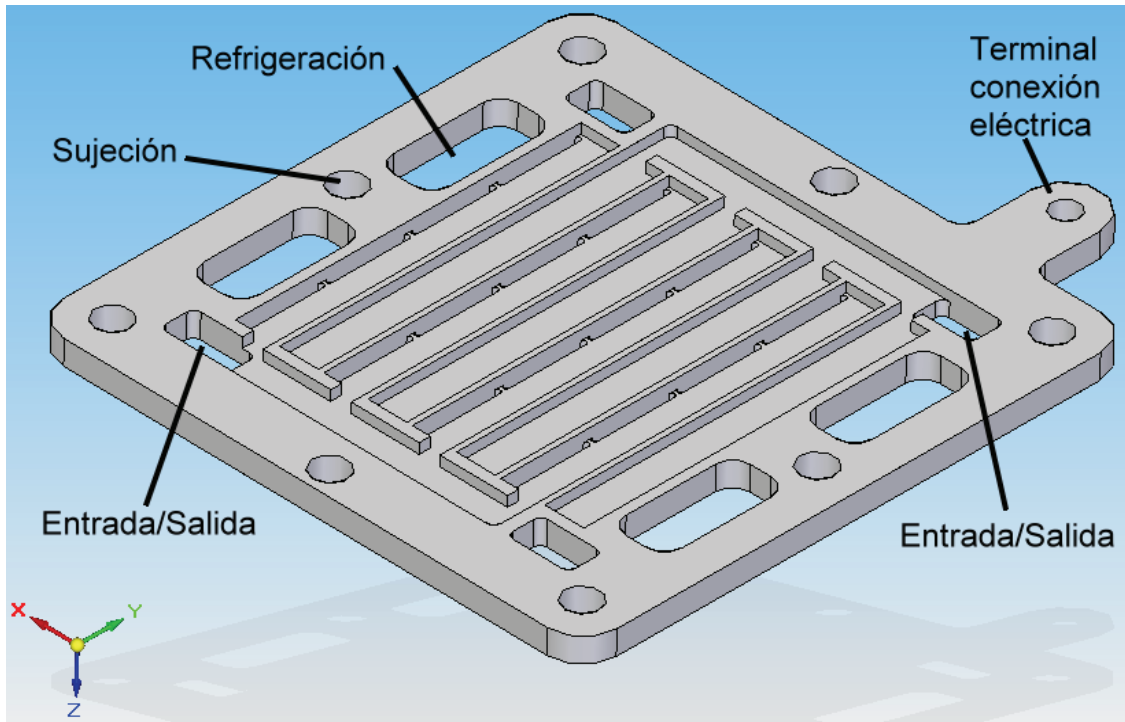


Figura 7-18. Anverso de placa Mod #1 de 25 cm² de área reactiva. Cámaras de distribución

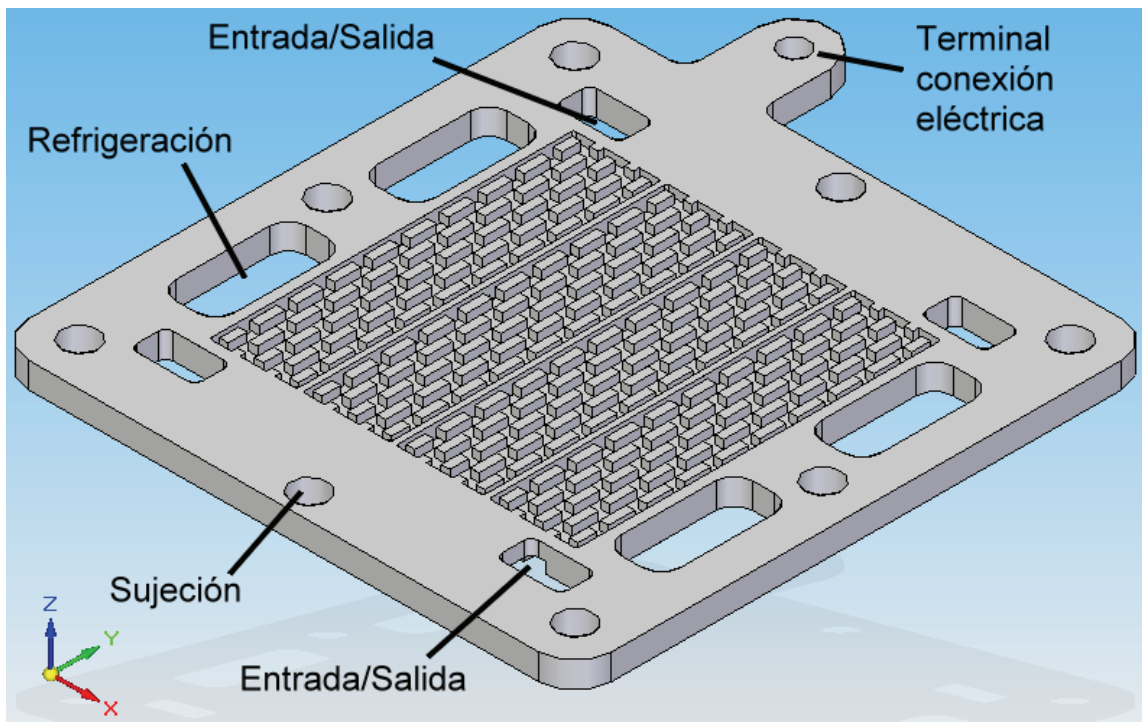


Figura 7-19. Reverso de placa Mod #1 de 25 cm² de área reactiva. Campo de flujo

7.3.1.2. Placas para monocelda de 25 cm². Mod #2

La Figura 7-20 muestra la placa diseñada para contener el campo de flujo con la geometría de referencia (Mod #2). El campo de flujo se compone de un canal de tipo serpentín de 1.2 mm de anchura y 1.2 mm de profundidad que recorre todo el área reactiva de 25 cm². La distancia entre canales es de 1.2 mm. La placa anódica y la catódica tienen el campo de flujo simétrico, de forma que los canales de flujo en ánodo y cátodo se sitúen de manera paralela. En función de cómo se conecten la entrada y salida de los reactivos obtendremos un flujo en concordancia o en contracorriente.

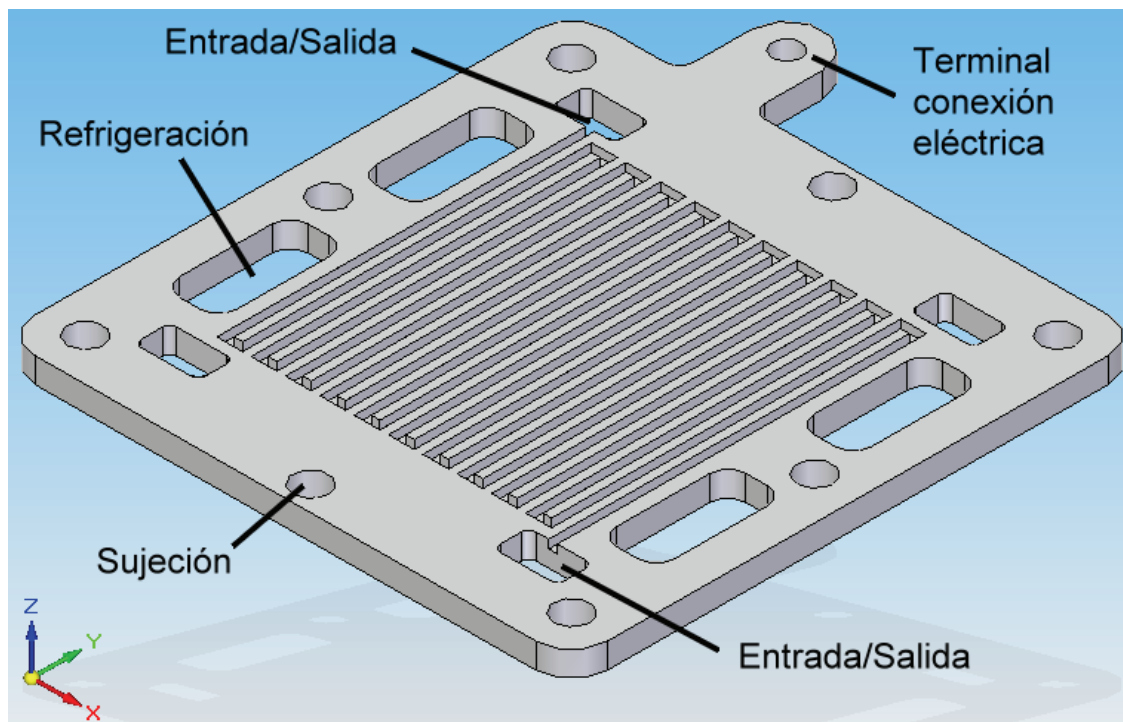


Figura 7-20. Placa Mod #2 de 25 cm² de área reactiva. Campo de flujo

7.3.1.3. Placas para monocelda de 6.25 cm². Mod #1 y Mod #2

Con el fin de reducir gastos, se han diseñado dos placas mixtas con dimensiones exteriores idénticas a las anteriores y que incluyen dos campos de flujo de 6.25 cm² de área reactiva. Cada uno de los campos se corresponde con una de las geometrías a analizar. La placa anódica y la catódica tienen un diseño simétrico. De esta forma la mitad de la superficie de la MEA queda libre para usos posteriores. La Figura 7-21 muestra el anverso de la placa mixta. La Figura 7-22 muestra el reverso de la placa mixta donde se aprecian los campos de flujo de 6.25 cm² de área reactiva cada uno.

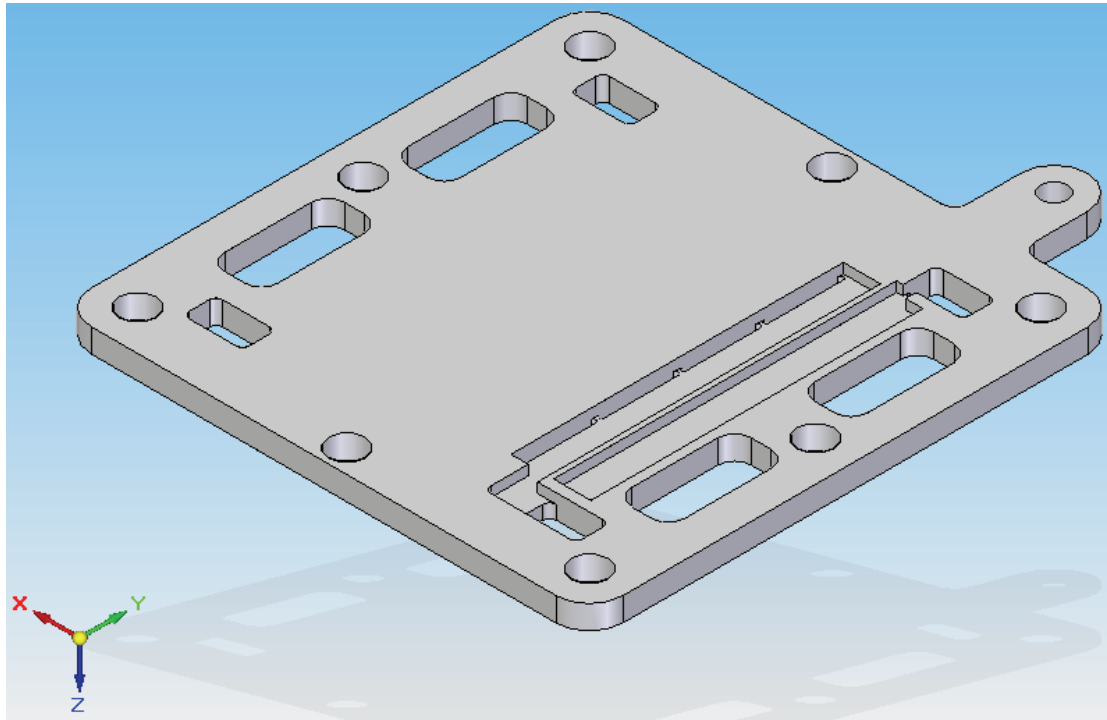


Figura 7-21. Anverso de placa mixta (Mod #1 y Mod #2) de 6.25 cm^2 de área reactiva

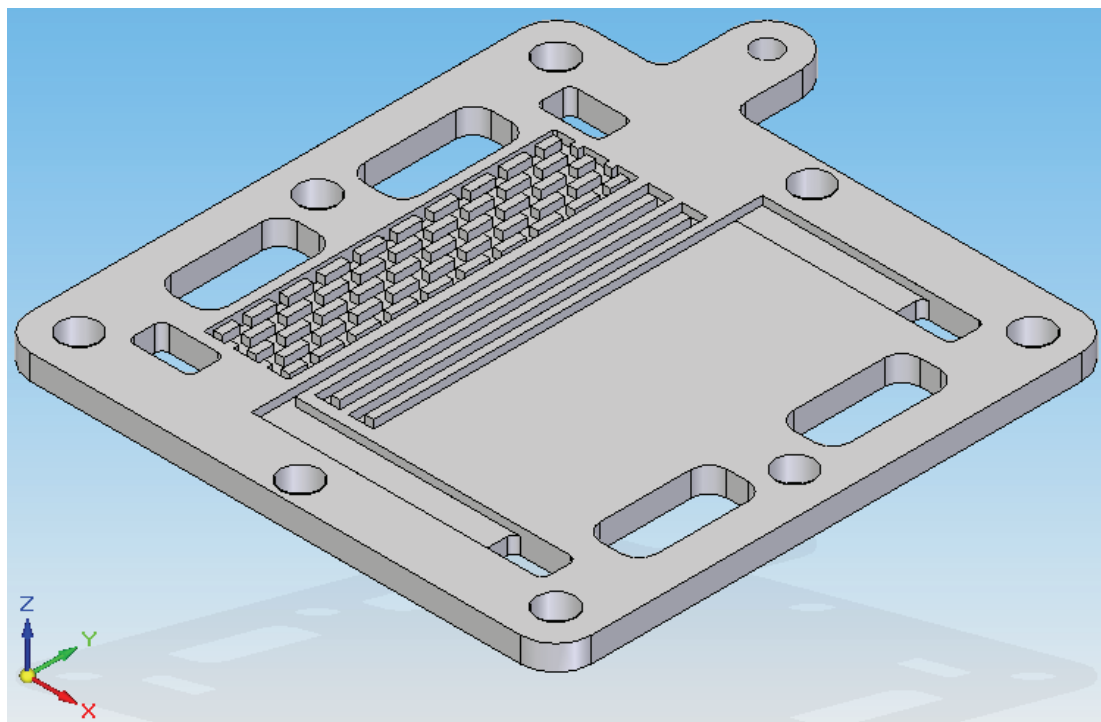


Figura 7-22. Reverso de placa mixta (Mod #1 y Mod #2) de 6.25 cm^2 de área reactiva

7.3.1.4. Placas terminales

Las placas terminales están fabricadas en aluminio con el fin de aligerar el conjunto. Disponen de todas las conexiones necesarias para asegurar el suministro de los reactivos a las placas. Se han fabricado dos modelos con diferente espesor (Figura 7-23 y Figura 7-24). El modelo más estrecho no incluye conexiones para el suministro de refrigeración.

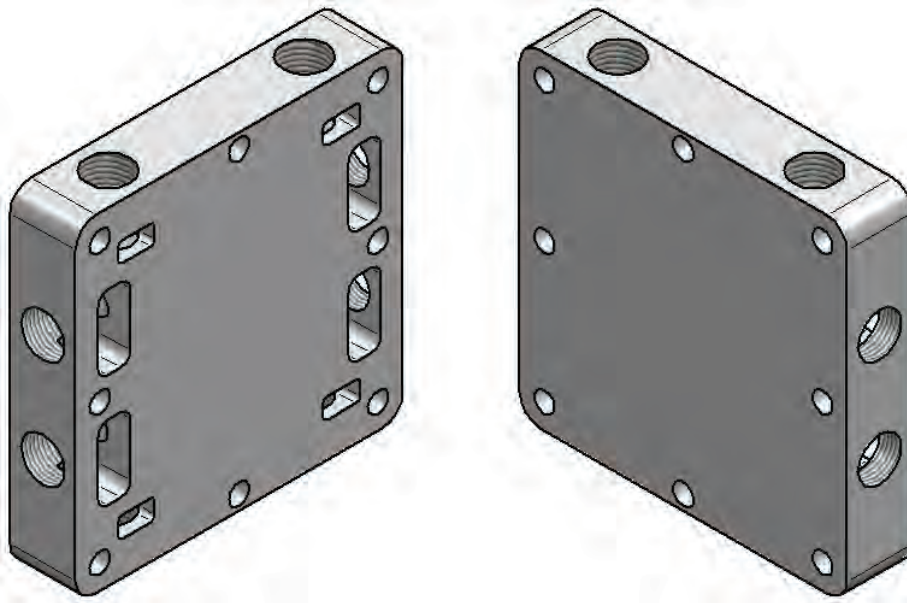


Figura 7-23. Anverso y reverso de placas terminales que incluye conexiones para refrigeración

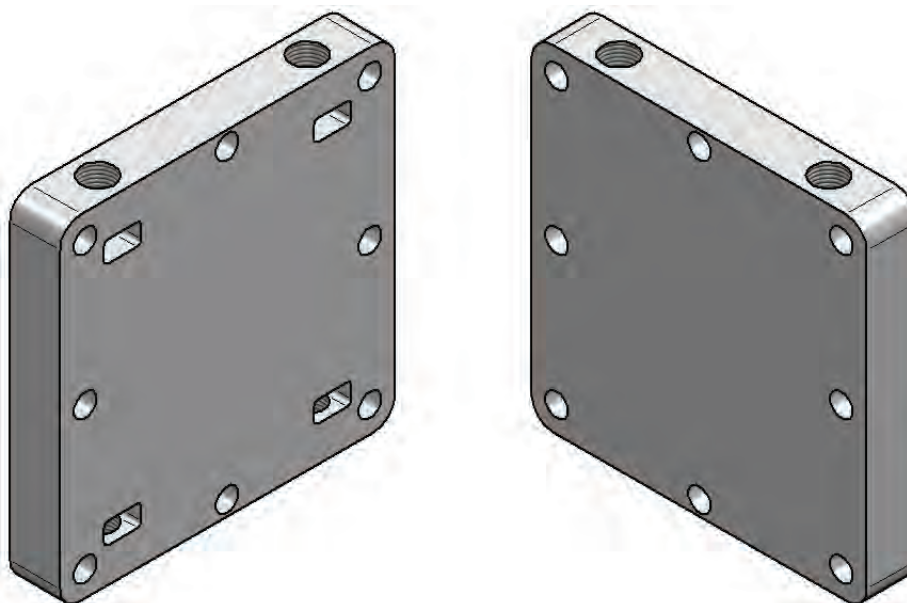


Figura 7-24. Anverso y reverso de placas terminales sin conexiones para refrigeración

7.3.2. Fabricación y montaje

El grafito es un material altamente conductor de la electricidad, por lo que el residuo de su mecanizado (polvo de grafito) puede producir cortocircuitos y malfuncionamiento en los sistemas electrónicos de las máquinas. Por este motivo, las placas de grafito han sido mecanizadas en una fresadora CNC (Acrónimo de *Control Numérico por Computador*) especialmente diseñada para trabajar con este material (Figura 7-25), perteneciente a la empresa Eurotécnica S. A. [21].

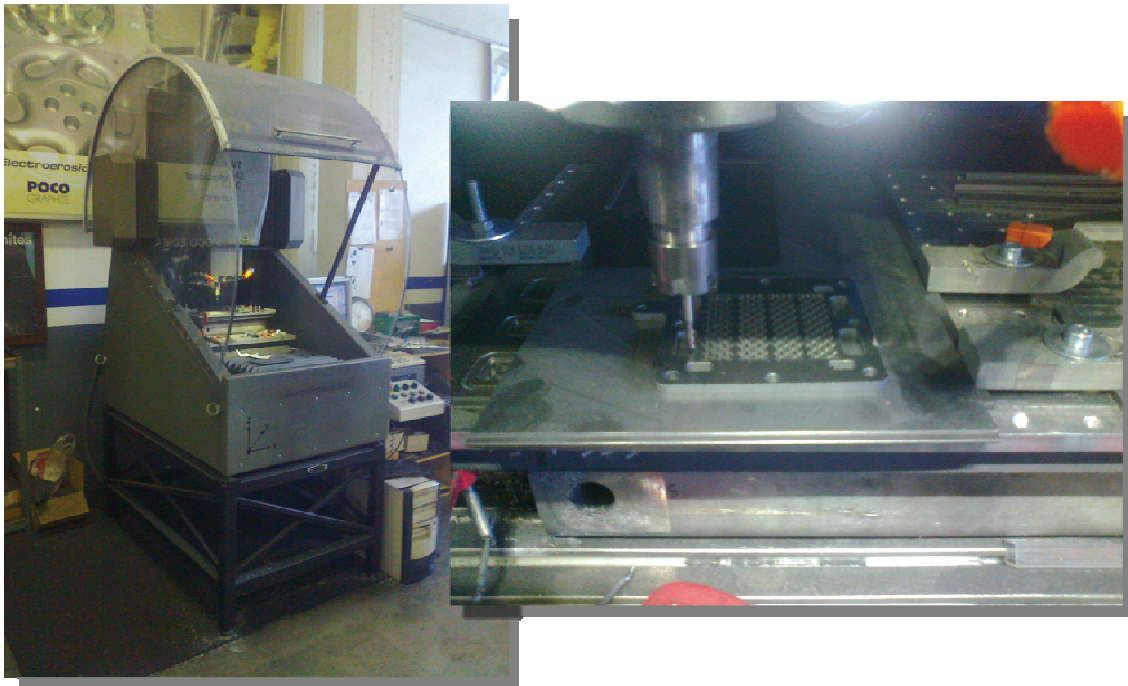


Figura 7-25. Fresadora CNC y detalle del mecanizado de una placa

La geometría generada en el sistema CAD se transfiere al sistema CAM (Acrónimo en inglés de *Computer Aided Manufacturing*; Fabricación Asistida por ordenador), que controla la máquina CNC, mediante un archivo de intercambio digital de información con formato IGES (Acrónimo en inglés de *Initial Graphics Exchange Specification*; Especificación para Intercambio Inicial de Gráficos). Se ha utilizado como sistema CAM el software **SurfCAM 2003**. Este software permite generar el programa de control numérico necesario para el mecanizado a partir del archivo de geometría IGES. La Figura 7-26 muestra varias etapas del proceso de simulación del mecanizado y la generación del programa de control numérico.

En cuanto a las placas terminales de aluminio, éstas se han mecanizado siguiendo un procedimiento estándar en una fresadora convencional de la empresa Talleres Mecánicos Manuel Echeverría S.A. [22]

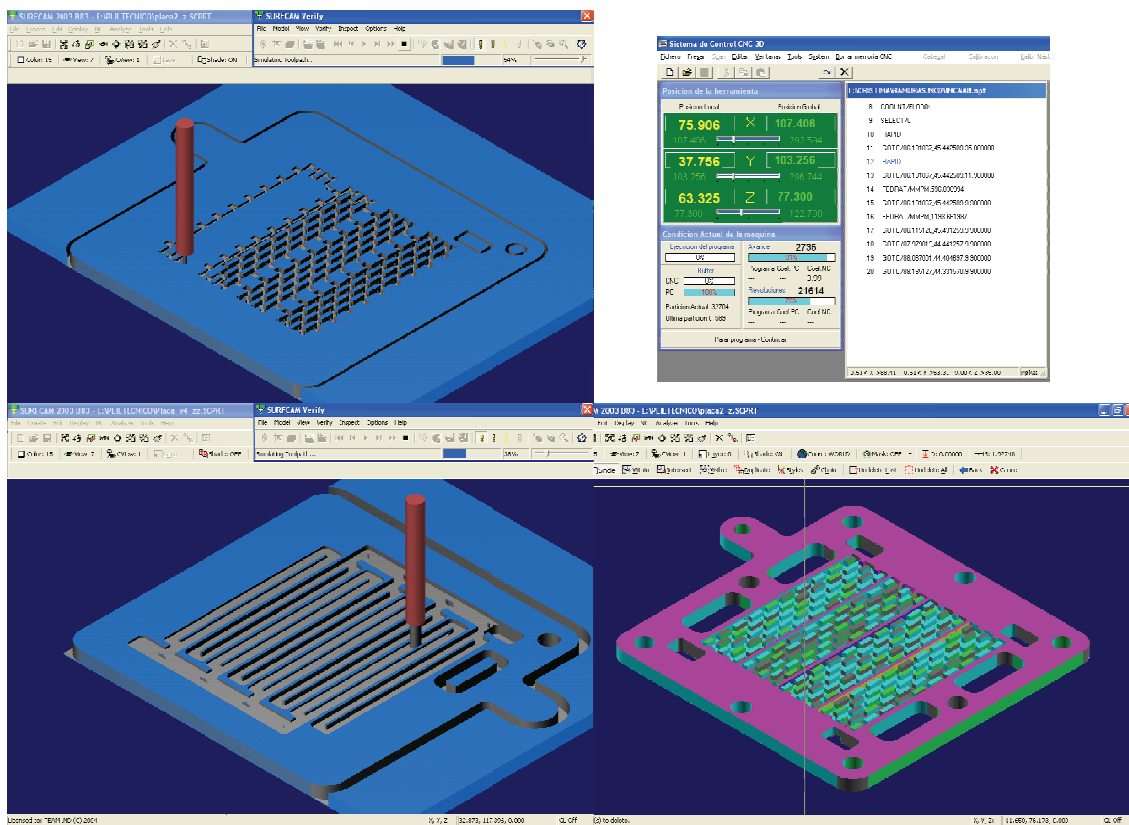


Figura 7-26. Simulación del proceso de mecanizado y generación del programa CNC en SurfCAM 2003

En el ensamblaje de las diferentes monoceldas se ha utilizado tornillería estándar: tornillos Allen M5 DIN 913, arandelas planas DIN 125 y tuercas hexagonales DIN 934. Para evitar el cortocircuito de la pila, los vástagos de los tornillos se han aislado mediante el uso de una funda de plástico termorretráctil y se han colocado arandelas de plástico bajo la cabeza del tornillo y bajo las arandelas planas.

La presión de apriete en una pila de combustible de tipo PEM también es una variable que puede afectar al rendimiento de la pila. Un par de apriete insuficiente favorecerá las fugas de los reactivos al exterior. Por el contrario, un par de apriete excesivo puede producir deformaciones en la MEA que dificulten los procesos de transporte en la misma e incluso dañarla. Además, un apriete descompensado en los diferentes tornillos de sujeción también puede permitir fugas de reactivos. Por todo ello, para que el par de apriete de todos los

Influencia del diseño de los canales de flujo en el rendimiento de una pila de combustible de membrana de intercambio protónico (PEMFC)

tornillos sea el mismo y que éste no produzca deformaciones ni daños en la MEA, se ha utilizado una llave dinamométrica regulada a 1 N·m.

En la Figura 7-27 se muestra una etapa del proceso de montaje de una de las monoceldas fabricadas.

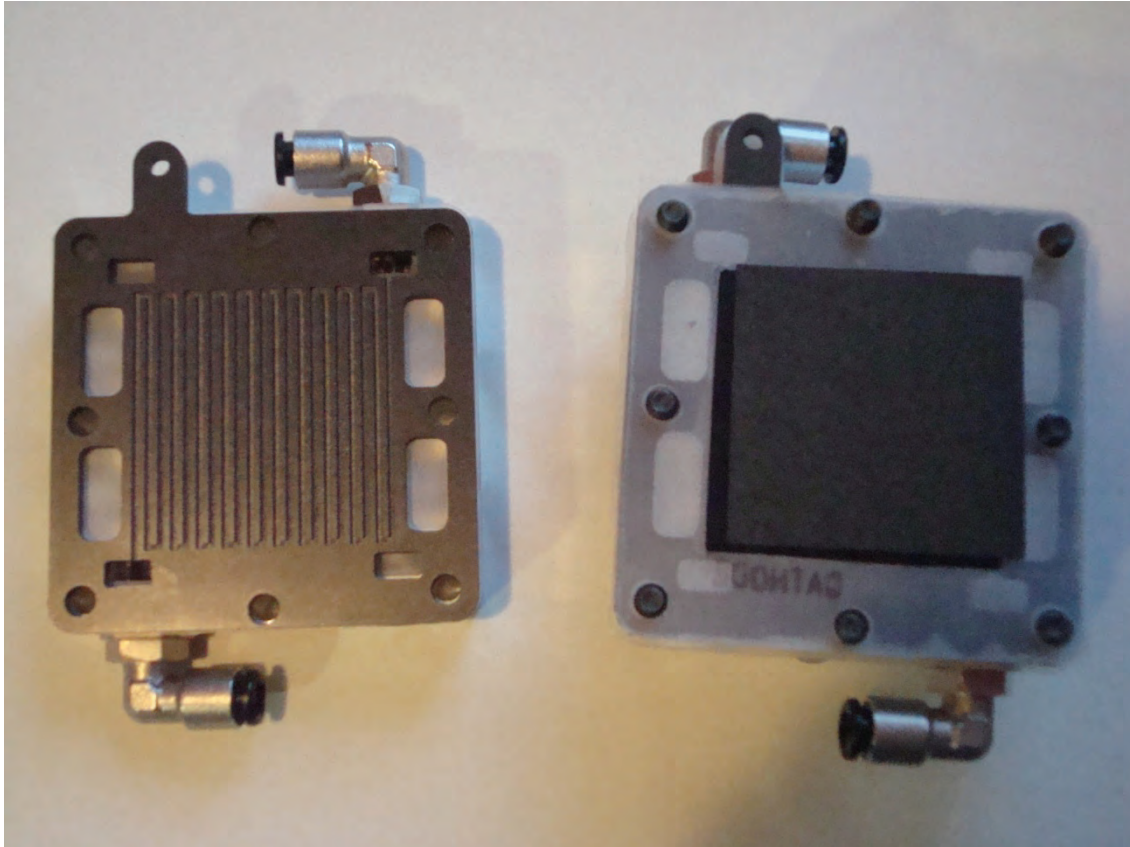


Figura 7-27. Proceso de montaje de una monocelda

En definitiva, se han fabricado y montado tres monoceldas diferentes. Una monocelda que incluye la nueva geometría (Mod #1) con campos de flujo de 25 cm² de área reactiva. La segunda monocelda incluye la geometría de referencia (Mod #2) con campos de flujo de 25 cm² de área reactiva. Por último, la tercera monocelda incluye ambas geometrías (Mod #1 y Mod #2) con campos de flujo de 6.25 cm² de área reactiva.

7.3.3. Test de laboratorio

El análisis de las monoceldas fabricadas se ha realizado en el banco de ensayos dual para pilas de combustible de tipo PEM (Figura 7-29 y Figura 7-30), perteneciente al Laboratorio de Investigación en Tecnologías de la Combustión (LITEC) [23]. Este banco de ensayos dual para

pilas de combustible de tipo PEM ha sido diseñado y fabricado en el LITEC para el estudio y caracterización de monoceldas y/o stacks de hasta 2 kW de potencia eléctrica.

El banco posee, como característica distintiva, dos líneas independientes para cada gas (H_2 y O_2 o aire) para caudales de hasta $1.2 \text{ NI}\cdot\text{min}^{-1}$ y $100 \text{ NI}\cdot\text{min}^{-1}$ respectivamente. Dispone de los siguientes sistemas:

- Sistema de humidificación de los gases reactantes con un control preciso de la temperatura, presión y humedad relativa de los mismos.
- Sistema de desecación de los gases de salida de la pila para la medida exacta del agua producida por la reacción electroquímica.
- Sistema de control de la presión de salida para poder trabajar en régimen de sobrepresión

El banco se puede operar de forma manual o automática utilizando un software desarrollado sobre LabVIEW.

Para evaluar el funcionamiento y el comportamiento electroquímico de las pilas, el banco de ensayos cuenta con dos cargas electrónicas dinámicas (300 W y 1 kW) y un potencióstato-galvanostato AutoLab.

La Figura 7-28 muestra un esquema básico del funcionamiento del banco de ensayos utilizado para el análisis de las monoceldas fabricadas.

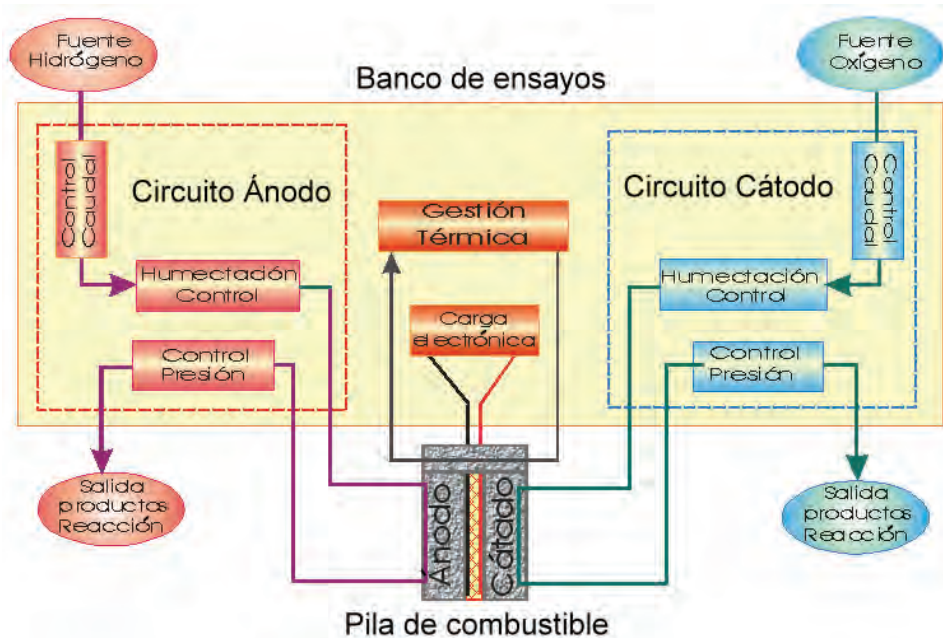


Figura 7-28. Esquema de funcionamiento del banco de ensayos



Figura 7-29. Banco de ensayos dual para pilas de combustible de tipo PEM



Figura 7-30. Análisis de una monocelda en el banco de ensayos

7.3.4. Resultados experimentales

Los ensayos realizados, se han llevado a cabo tomando como base las condiciones de operación indicadas en la Tabla 7-3, y utilizando una MEA de tipo Nafion® N-117. En algún caso concreto se ha modificado alguno de los parámetros para estudiar su influencia.

Tabla 7-3. Condiciones de operación utilizadas en los ensayos

Ánodo (H₂)	
Coefficiente estequiométrico	1.2
Temperatura de entrada (°C)	80
Temperatura de rocío (°C)	80
Humedad relativa (%)	100
Cátodo (Aire)	
Coefficiente estequiométrico	2.0
Temperatura de entrada (°C)	80
Temperatura de rocío (°C)	80
Humedad relativa (%)	100
Condiciones de operación	
Presión de operación (kPa)	101
Temperatura de operación (°C)	80

El ensayo número 1 se ha realizado con la monocelda que incluye las placas mixtas, utilizando el campo de flujo de 6.25 cm² con la nueva geometría (Mod #1). Para este ensayo, la monocelda se ha colocado en posición horizontal (campos de flujo paralelos al plano horizontal), con el cátodo en la parte inferior.

El ensayo número 2 es idéntico al número 1 pero colocando la pila en posición vertical (campos de flujo perpendiculares al plano horizontal). Los resultados de los ensayos 1 y 2 se muestran en la Figura 7-31 (pág. 217).

El ensayo número 3 se ha realizado también con la monocelda que incluye las placas mixtas, pero utilizando el campo de flujo de 6.25 cm² con la geometría de referencia (Mod #2). Para este ensayo, la monocelda se ha colocado en posición horizontal (campos de flujo paralelos al plano horizontal), con el cátodo en la parte inferior. Los resultados de este ensayo se muestran en la Figura 7-32 (pág. 218).

El ensayo número 4 se ha realizado con la monocelda con las placas con campo de flujo de 25 cm² con la nueva geometría (Mod #1), con la monocelda colocada en posición horizontal (campos de flujo paralelos al plano horizontal), estando el cátodo en la parte inferior.

El ensayo número 5 es idéntico al número 4 pero sustituyendo la MEA de tipo Nafion® N-117 (0.183 mm de espesor) por otra de tipo Nafion® XL-MEA3 (0.0275 mm de espesor). Los resultados de los ensayos 4 y 5 se muestran en la Figura 7-33 (pág. 218).

El ensayo número 6 se ha realizado con la monocelda con las placas con campo de flujo de 25 cm² con la geometría de referencia (Mod #2). Para este ensayo, la monocelda se ha colocado en posición horizontal (campos de flujo paralelos al plano horizontal), con el cátodo en la parte inferior. La temperatura de operación era de 80 °C. Los resultados de este ensayo se muestran en la Figura 7-34 (pág. 219).

El ensayo número 7 también se ha realizado con la monocelda con las placas con campo de flujo de 25 cm² con la geometría de referencia (Mod #2). Al igual que en el ensayo número 6, la monocelda se ha colocado en posición horizontal (campos de flujo paralelos al plano horizontal), con el cátodo en la parte inferior, aunque la temperatura de operación era de 50 °C y los reactivos se encontraban saturados. Los resultados del ensayo se muestran en la Figura 7-35 (pág. 219).

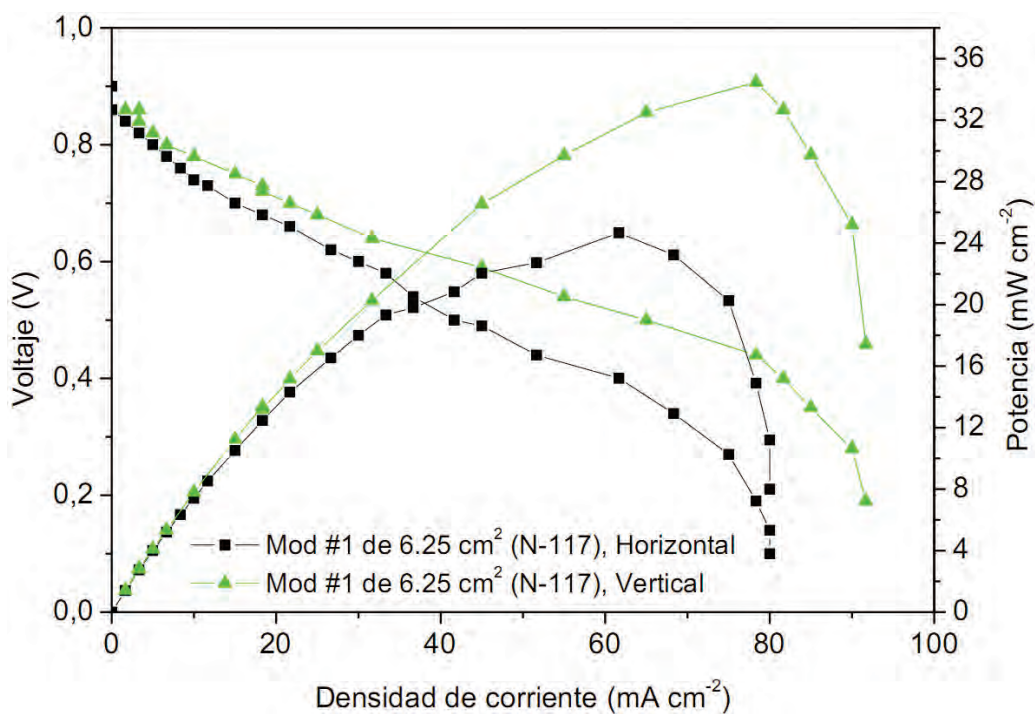


Figura 7-31. Ensayos 1 y 2. Curvas de polarización y de potencia para el Mod #1 de 6.25 cm² de área reactiva en posiciones diferentes

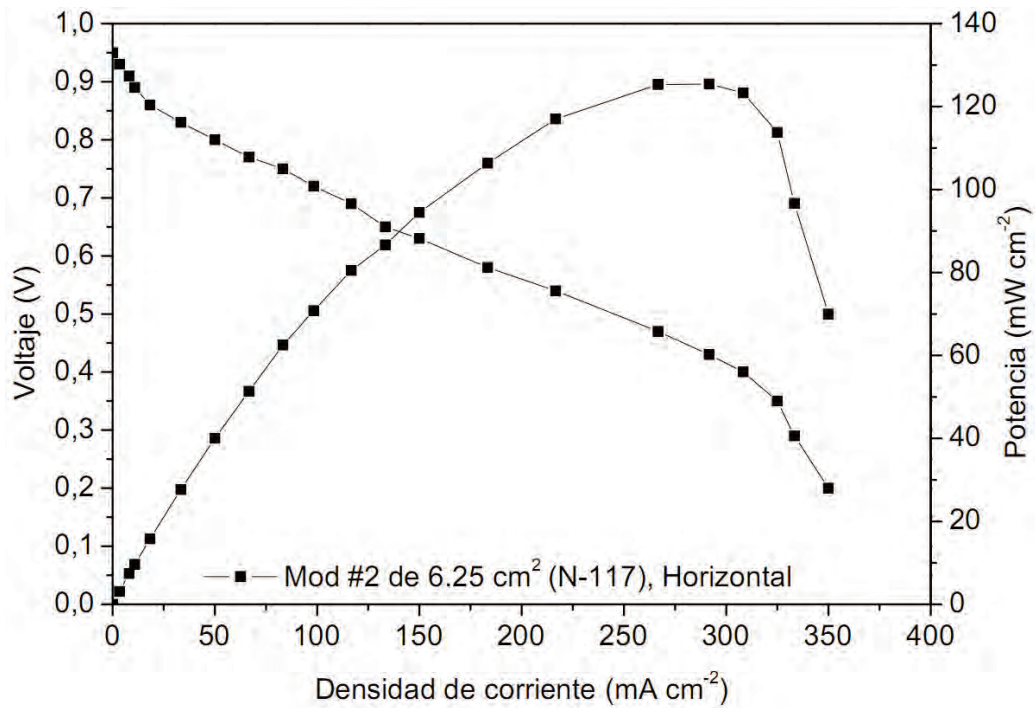


Figura 7-32. Ensayo 3. Curva de polarización y de potencia para el Mod #2 de 6.25 cm² de área reactiva

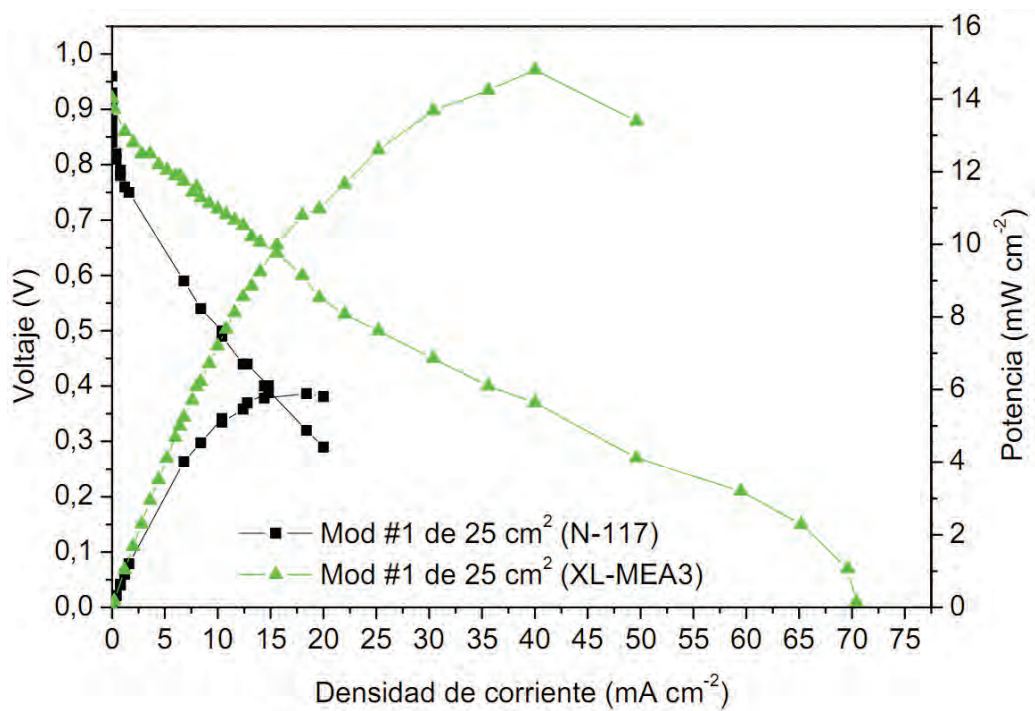


Figura 7-33. Ensayos 4 y 5. Curvas de polarización y de potencia para el Mod #1 de 25 cm² de área reactiva con MEAs diferentes.

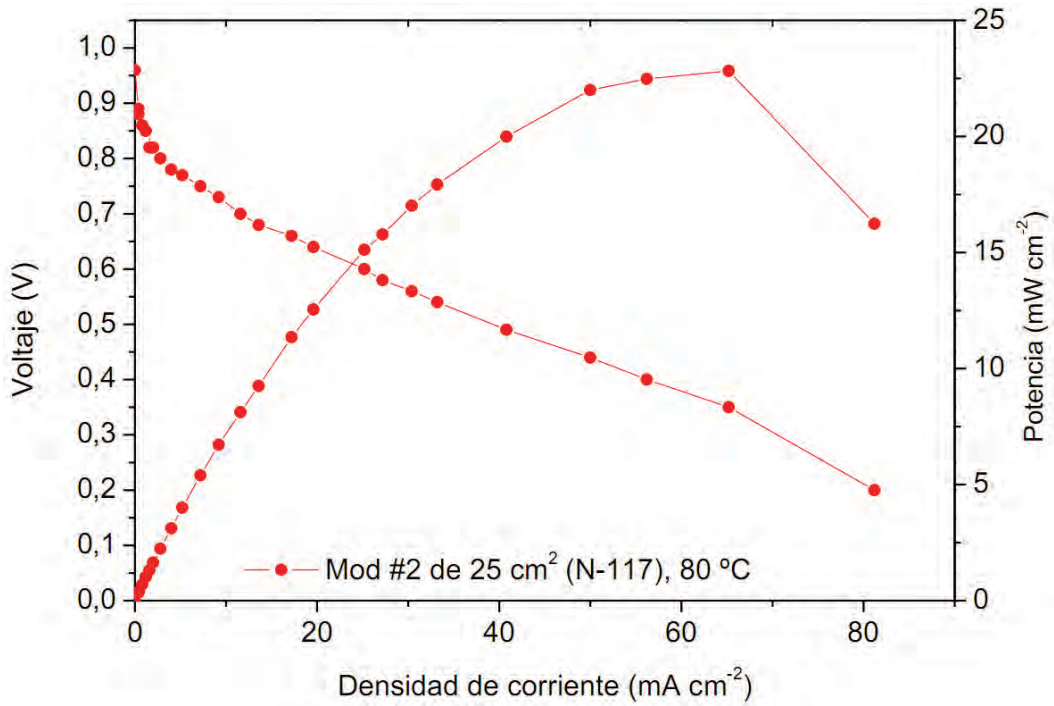


Figura 7-34. Ensayo 6. Curva de polarización y de potencia para el Mod #2 de 25 cm² de área reactiva. Temperatura de operación 80 °C

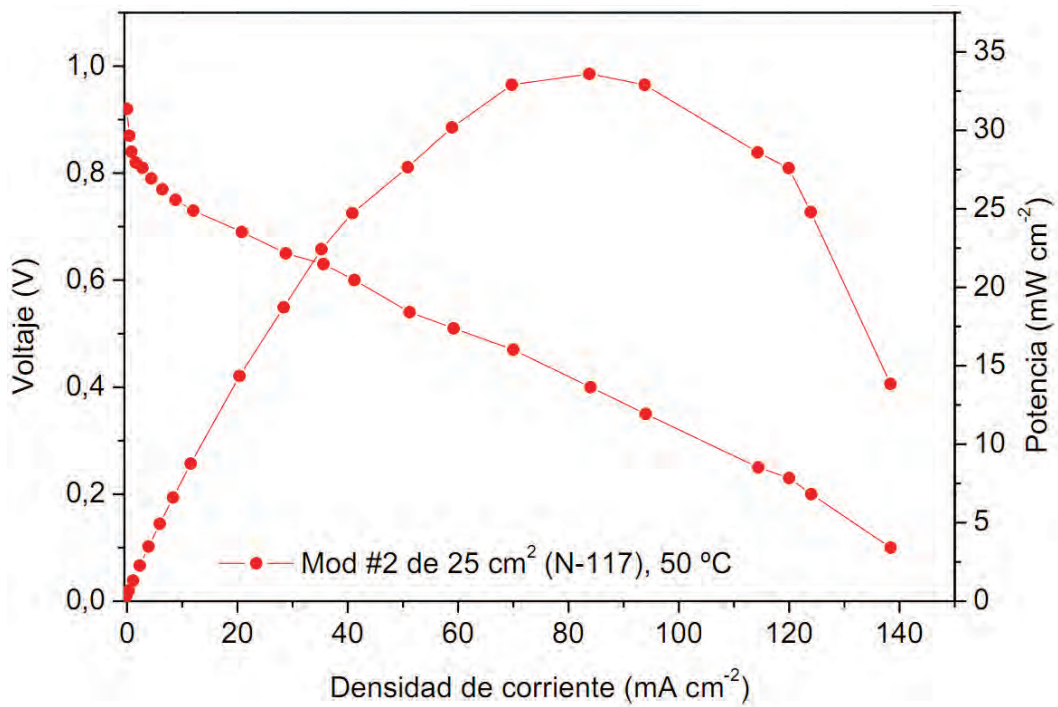


Figura 7-35. Ensayo 7. Curva de polarización y de potencia para el Mod #2 de 25 cm² de área reactiva. Temperatura de operación 50 °C

Los resultados de los ensayos 1 y 2, que se muestran en la Figura 7-31 (pág. 217), evidencian el mal funcionamiento de la monocelda con la nueva geometría (Mod #1). La densidad de potencia máxima obtenida es ligeramente superior a los 24 mW cm⁻² a una densidad de corriente de 62 mA cm⁻², mientras que en las simulaciones se han obtenido 420 mW cm⁻² a una densidad de corriente de 760 mA cm⁻², para el mismo tipo de geometría. Por otra parte, estos resultados también muestran que la posición de la monocelda es un factor muy relevante en el rendimiento de la pila, obteniéndose un 40% más de potencia con la monocelda en posición vertical que en posición horizontal.

Los resultados del ensayo 3, que se muestran en la Figura 7-32 (pág. 218), también muestran un mal funcionamiento de la monocelda con la geometría de referencia (Mod #2), aunque las diferencias con los resultados de las simulaciones son menores. La densidad de potencia máxima obtenida es aproximadamente de 125 mW cm⁻² a una densidad de corriente de 280 mA cm⁻², mientras que en las simulaciones se han obtenido 445 mW cm⁻² a una densidad de corriente de 950 mA cm⁻², para el mismo tipo de geometría.

Los resultados de los ensayos 4, 5 y 6, que se muestran en la Figura 7-33 y Figura 7-34 (pág. 218), indican que con una mayor área reactiva el rendimiento cae aún más. La densidad de potencia máxima obtenida es ligeramente inferior a los 6 mW cm⁻² a una densidad de corriente de 17 mA cm⁻² para la geometría nueva (Mod #1). Para la geometría de referencia (Mod #2), la densidad de potencia máxima obtenida es ligeramente superior a los 22.5 mW cm⁻² a una densidad de corriente de 68 mA cm⁻². Por otra parte, los resultados del ensayo 5 muestran que el espesor de la MEA también es un factor muy relevante en el rendimiento de la pila, obteniéndose un 250% más de potencia con una MEA del tipo Nafion® XL-MEA3 (espesor = 27.5 μm) frente a la de tipo Nafion® N-117 (espesor = 183 μm).

Los resultados del ensayo 7, que se muestran en la Figura 7-35 (pág. 219) junto con los resultados del ensayo 6 (Figura 7-34 en pág. 218), indican que la temperatura de operación de la pila es asimismo un aspecto determinante en el funcionamiento de la monocelda. En este caso, una temperatura de operación menor (50 °C frente a 80 °C) permite obtener un aumento superior al 45% en la densidad de potencia.

7.3.5. Conclusiones

La temperatura de funcionamiento de una PEMFC debe limitarse por debajo de la temperatura de ebullición del agua, porque los protones que circulan a través de la membrana, lo hacen mediante las moléculas de agua en estado líquido presentes en dicha membrana. Aunque la temperatura de ebullición disminuye con el aumento de la presión, por lo general las PEMFC operan a presión atmosférica debido a la reducida resistencia mecánica de la membrana. Por este motivo, la temperatura de funcionamiento debe ser inferior a 100 °C, y por ello también, las PEMFC están clasificadas como pilas de combustible de baja temperatura.

Por otra parte, la baja temperatura de operación favorece que el agua generada por la reacción esté en fase líquida. Si la cantidad de agua en fase líquida es de tal magnitud que interrumpe el flujo de los reactivos hasta las capas catalíticas, se produce lo que se conoce como inundación o efecto “*flooding*”. Este efecto, que se puede dar tanto en el ánodo como en el cátodo, puede inutilizar parte del campo de flujo, provocando una distribución no homogénea de los reactivos sobre los catalizadores. El flujo de gases no uniforme conlleva una caída del rendimiento y puede provocar degradación en la membrana.

Además, cuando la corriente eléctrica se genera con un aporte de gases inadecuado (pobre), el platino y el carbón soportado sobre las capas catalíticas pierden parte de su funcionalidad, fenómeno denominado inanición (*starvation*) [24].

Es evidente que los resultados de los ensayos difieren ampliamente de los obtenidos mediante la simulación numérica. El bajo rendimiento mostrado en todos los casos parece responder a un malfuncionamiento del sistema por acumulación de agua en estado líquido en el cátodo, provocando los dos efectos mencionados anteriormente y que se hacen más evidentes con el aumento del área reactiva. De hecho, durante los ensayos siempre apareció una gran cantidad de agua en estado líquido a la salida de la zona catódica.

Es muy probable que la razón de este malfuncionamiento no se deba a una única causa sino a una combinación de varios factores. Por una parte, el contenido de agua en las corrientes de reactivos puede ser excesivo para la temperatura de operación de la pila. Sería recomendable trabajar con humedades relativas inferiores, al menos en la zona catódica.

Por otra parte, una geometría que provoque una menor pérdida de carga al paso de los reactivos, también produce un menor efecto de “arrastre” del agua producida en el cátodo. Esta podría ser la causa de que los resultados obtenidos para la geometría de referencia (Mod #2) sean superiores que los obtenidos con la nueva geometría (Mod #1). Sería recomendable aumentar la presión en el cátodo o cambiar la geometría del campo de flujo del cátodo por otra que provoque una mayor pérdida de carga.

También la posición de la monocelda es un factor influyente en el rendimiento de la pila. De los resultados de los ensayos 1 y 2 se podría concluir que la monocelda colocada en posición vertical favorece la eliminación del agua y, por tanto, mejora el rendimiento de la pila.

Aunque los ensayos se han realizado en unas condiciones de operación más favorables que las utilizadas en las simulaciones, los resultados demuestran que no son las óptimas para las geometrías utilizadas. Éstos resultados no son definitivos, sino que por el contrario sólo constituyen la primera tentativa en la búsqueda de la combinación óptima del binomio “**geometría-condiciones de operación**” que permita obtener el mejor rendimiento posible.

7.4. Trabajos futuros

Los resultados obtenidos en este proyecto de tesis determinan una sólida base que sirve de punto de partida para continuar con la línea de investigación iniciada. Entre los trabajos a futuro se pueden destacar los siguientes:

- Determinación de las condiciones óptimas de funcionamiento de una monocelda que incluya la geometría nueva (Mod #1) tanto en la zona anódica como en la zona catódica.
- Determinación de las condiciones óptimas de funcionamiento de una monocelda que incluya la geometría nueva (Mod #1) en la zona anódica y la geometría de referencia (Mod #2) en la zona catódica (actualmente en curso).
- Diseño y fabricación de un stack de 250 W de potencia como aplicación en un vehículo ligero.
- Diseño de nuevos campos de flujo para su aplicación en Pilas de combustible de metanol directo, DMFC (Direc Methanol Fuel Cells)

7.5. Referencias

- [1] Xianguo Li, Imran Sabir, *International Journal of Hydrogen Energy* 30 (2005) 359-371.
- [2] J. Sinha, S. Lasher, Y. Yang, *Direct Hydrogen PEMFC Manufacturing Cost Estimation for Automotive Applications*, DOE Annual Merit Review, Arlington, VA, May 21, 2009.
- [3] Yoon, Young Gi; Lee, Won Yong; Park, Gu Gon; Yang, Tae Hyun; Kim, Chang Soo, *Effects of channel and rib widths of flow field plates on the performance of a PEMFC*, *International Journal of Hydrogen Energy* 30 (2005) 1363-1366.
- [4] Yuh Ming Ferng, Ay Su, *A three-dimensional full-cell CFD model used to investigate the effects of different flow channel designs on PEMFC performance*, *International Journal of Hydrogen Energy* 30 (2005) 4466-4476.
- [5] Sungho Lee, Heeseok Jeong, Byungki Ahn, Taewon Lim, Youngjin Son, *Parametric study of the channel design at the bipolar plate in PEMFC performances*, *International Journal of Hydrogen Energy* 33 (2008) 5691-5696.
- [6] A.P. Manso, F.F. Marzo, M. Garmendia, J. Barranco, *Numerical analysis of the influence of the channel cross-section aspect ratio on the performance of a PEM fuel cell with*

- serpentine flow field design, *International Journal of Hydrogen Energy*, 36 (2011), 6795-6808.
- [7] Kap-Seung Choi, Hyung-Man Kim, Sung-Mo Moon, Numerical studies on the geometrical characterization of serpentine flow-field for efficient PEMFC, *International Journal of Hydrogen Energy* 36 (2011) 1613-1627.
- [8] Arnaud Morin, Feina Xu, Gérard Gebel, Olivier Diat, Influence of PEMFC gas flow configuration on performance and water distribution studied by SANS: Evidence of the effect of gravity, *International Journal of Hydrogen Energy* 36 (2011) 3096-3109.
- [9] Luis Valiño, Radu Mustata, María Isabel Gil, Jesús Martín, Effect of the relative position of oxygen–hydrogen plate channels and inlets on a PEMFC, *International Journal of Hydrogen Energy* 35 (2010) 11425-11436.
- [10] Xianguo Li, Imran sabir, Review of bipolar plates in PEM fuel cells: Flow-field designs, *Journal of Hydrogen Energy* 30 (2005) 359-371.
- [11] ES-PEMFC Methodology and Tutorial Manual, CD adapco Group, <http://www.adapco.com>.
- [12] S. Shimpalee, S. Greenway, D. Spuckler, J.W. Van Zee, Predicting water and current distributions in a commercial-size PEMFC, *Journal of Power Sources*, 135 (2004), 79–87.
- [13] S. Shimpalee, U. Beuscher, J.W. Van Zee, Investigation of gas diffusion media inside PEMFC using CFD modeling, *Journal of Power Sources*, 163 (2006), 480–489.
- [14] S. Shimpalee, S. Greenway, J.W. Van Zee, The impact of channel path length on PEMFC flow-field design, *Journal of Power Sources*, 160 (2006), 398–406.
- [15] S. Shimpalee, U. Beuscher, J.W. Van Zee, Analysis of GDL flooding effects on PEMFC performance, *Electrochimica Acta*, 52 (2007), 6748–6754.
- [16] S. Shimpalee, J.W. Van Zee, Numerical studies on rib&channel dimension of flow-field on PEMFC performance, *International Journal of Hydrogen Energy*, 32 (2007), 842 – 856.
- [17] D.H. Jeon, S. Greenway, S. Shimpalee, J.W. Van Zee, The effect of serpentine flow-field designs on PEM fuel cell performance, *International Journal of Hydrogen Energy*, 33 (2008), 1052 – 1066.
- [18] «Bulk Molding Compounds, Inc.» [Online]. Disponible en: <http://www.bulkmolding.com/>. [Acceso: 23-11-2011].

- [19] «Nafionstore - Online Shopping for Nafion® Products and Membrane Electrode Assemblies». [Online]. Disponible en: <http://www.nafionstore.com/>. [Acceso: 23-11-2011].
- [20] «Freudenberg Group». [Online]. Disponible en: <http://www.freudenberg.com/>. [Acceso: 23-11-2011].
- [21] «Suministro industrial para mecanizado y línea de corte». [Online]. Disponible en: <http://www.eurotecnica.es/>. [Acceso: 24-11-2011].
- [22] «Talleres Mecánicos Manuel Echeverría, S.A.» [Online]. Disponible en: <http://www.tmmecheverria.com/>. [Acceso: 24-11-2011].
- [23] «LITEC - CSIC». [Online]. Disponible en: <http://www.litec.csic.es/>. [Acceso: 24-11-2011].
- [24] N. Yousfi-Steiner, Ph. Moçotéguy, D. Candusso, D. Hissel, A review on polymer electrolyte membrane fuel cell catalyst degradation and starvation issues: causes, consequences and diagnostic for mitigation, *Journal of Power Sources*, 194 (2009), 130-145.

The page features a decorative graphic consisting of three blue circles of varying sizes, each with a darker blue center and a lighter blue outer ring. These circles are arranged vertically, with the largest at the top, a medium one in the middle, and the largest at the bottom. Two thin blue lines intersect at the top left and extend diagonally across the page, framing the circles.

Capítulo 8

Contribución científica

CAPÍTULO 8: Contribución científica	231
8.1. Introducción.....	231
8.2. Patente.....	231
8.3. Artículos publicados en revistas científicas	231
8.4. Capítulo de libro	232
8.5. Contribuciones a congresos.....	232

CAPÍTULO 8: Contribución científica

8.1. Introducción

En este capítulo se recoge la contribución científica producida durante la realización de este proyecto de tesis. Los resultados científicos se dividen en cuatro apartados: patentes, artículos publicados en revistas científicas, capítulo de libro y contribuciones realizadas para Congresos. En el apartado de artículos publicados en revistas científicas, además de los ya publicados, se incluye un artículo que se encuentra en proceso de revisión.

8.2. Patente

Como consecuencia de la realización de este proyecto de tesis, el 11 de enero de 2011 se presentó una solicitud de patente con número P201130022 en la Oficina Española de Patentes y Marcas (OEPM – Madrid), bajo el título de: “PLACA PARA PILAS DE COMBUSTIBLE CON CÁMARA DE DISTRIBUCIÓN DE REACTIVO”. Los documentos acreditativos se incluyen en el Capítulo ANEXOS.

8.3. Artículos publicados en revistas científicas

En este apartado se recogen las diferentes contribuciones publicadas en revistas científicas internacionales durante la realización de este proyecto de tesis y que se incluyen en el Capítulo ANEXOS.

- A. P. Manso, F. F. Marzo, A. R. Pierna, J. Barranco, A. Lorenzo and J. Barroso, Design optimization of a polymer electrolyte membrana fuel cell, PEMFC, *Journal of New Materials for Electrochemical Systems*, 12 (2009), 133 – 139.
- A.P. Manso, F.F. Marzo, M. Garmendia Mujika, J. Barranco, A. Lorenzo, Numerical analysis of the influence of the channel cross-section aspect ratio on the performance of a PEM fuel cell with serpentine flow field design, *International Journal of Hydrogen Energy*, 36 (2011), 6795–6808
- A.P. Manso, F.F. Marzo, M. Garmendia Mujika, X. Garikano, Influence of geometric parameters on the performance of a PEMFC. A review, *International Journal of Hydrogen Energy* (En proceso de revisión)

8.4. Capítulo de libro

En este apartado se recoge el artículo de libro publicado durante la realización de este proyecto de tesis y que se incluyen en el Capítulo ANEXOS.

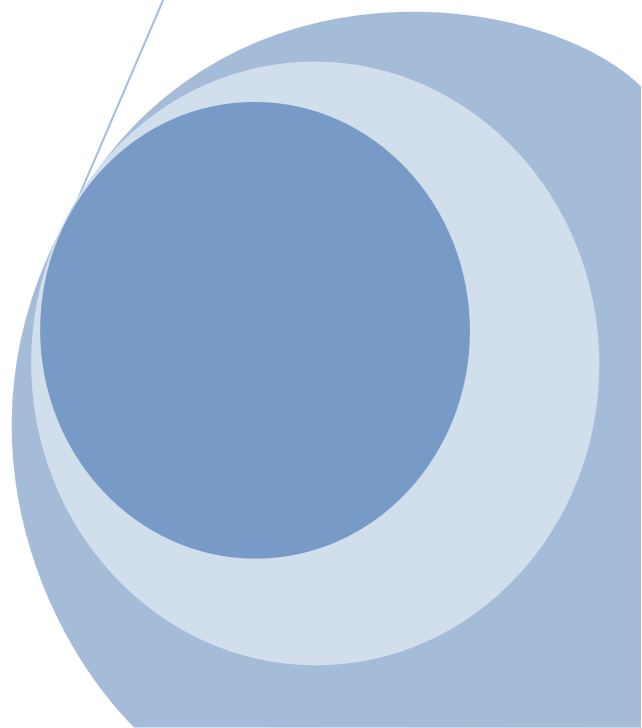
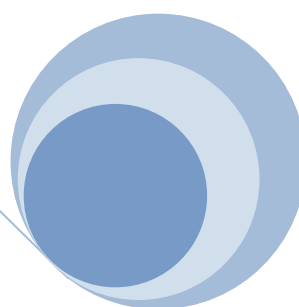
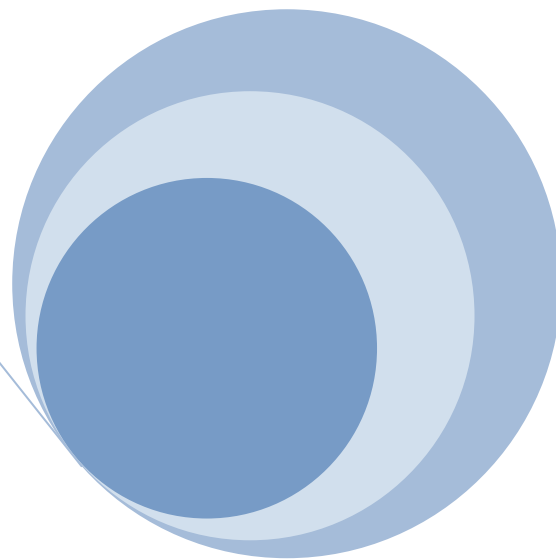
- A. P. Manso, F. F. Marzo, J. Barranco y M. Garmendia, 2011. Application of techniques of computational fluid dynamics in the design of bipolar plates for PEM fuel cells. En: International Energy and Environment Foundation, ed. Maher A. R. Sadiq Al-Baghdadi; Computational Fluid Dynamics Modeling in Development of Renewable Energy Applications. ISBN: 978-1466231313. Pp. 377- 402.

8.5. Contribuciones a congresos

En este apartado se recogen las diferentes contribuciones a congresos presentadas durante la realización de este proyecto de tesis y que se incluyen en el Capítulo ANEXOS.

- Ángel Pérez Manso, Expresión Gráfica en el Diseño de Pilas de combustible (PEMFC), Libro de comunicaciones “XII Congreso de Gráfica Digital e Informática Aplicada SIGRADI2008”, La Habana (Cuba), 1-5 de diciembre de 2008, ISBN: 978-959-261-285-3, pp. 67-72.
- A. Pérez, F. F. Marzo, A. R. Pierna, J. Barranco, A. Lorenzo y J. Barroso, Optimización del diseño de una celda de combustible de membrana de intercambio protónico (PEMFC), CD de Comunicaciones y Resúmenes, “I Simposium Ibérico de Hidrógeno, Pilas de Combustible y Baterías Avanzadas HYCELTEC 2008”, Bilbao (España), 1 al 4 de julio de 2008, ISBN 978-84-9860-101-5, pp. 1 – 15.
- F. F. Marzo, A. Pérez, A. R. Pierna, J. Barranco, A. Lorenzo y J. Barroso, Modelado computacional de una pila de combustible de membrana de intercambio protónico, PEMFC, Libro de Comunicaciones “III Congreso Nacional de Pilas de Combustible, CONAPPICE 2008”, Zaragoza (España), 24-26 de septiembre de 2008, ISBN: 978-84-691-4415-2, pp. 211 - 214.
- A. P. Manso, F. F. Marzo, M. Garmendia y A. Lorenzo, Análisis numérico de la influencia de los parámetros geométricos de la sección transversal del canal de flujo en una PEMFC, Libro de Comunicaciones “IV Congreso Nacional de Pilas de Combustible, CONAPPICE 2010”, Sevilla (España), 16-18 de junio de 2010, ISBN: 978-84-693-2330-4, pp. 141 - 144.
- A. P. Manso, F. F. Marzo, M. Garmendia y J. Barranco, Diseños alternativos a los canales de flujo de tipo serpentín (SFF) en el diseño de placas para pilas de tipo PEM, Libro de Comunicaciones y Resúmenes “III Iberian Symposium on Hydrogen, Fuel Cells and Advanced Batteries HYCELTEC 2011”, Zaragoza (España), 27 al 30 de junio de 2011, ISBN 978-84-938668-8-4, pp. 458.

ANEXOS





MINISTERIO
DE INDUSTRIA, TURISMO
Y COMERCIO



Oficina Española
de Patentes y Marcas

Justificante de presentación electrónica de solicitud de patente

Este documento es un justificante de que se ha recibido una solicitud española de patente por vía electrónica, utilizando la conexión segura de la O.E.P.M. Asimismo, se le ha asignado de forma automática un número de solicitud y una fecha de recepción, conforme al artículo 14.3 del Reglamento para la ejecución de la Ley 11/1986, de 20 de marzo, de Patentes. La fecha de presentación de la solicitud de acuerdo con el art. 22 de la Ley de Patentes, le será comunicada posteriormente.

Número de solicitud:	P201130022	
Fecha de recepción:	11 enero 2011, 13:19 (CET)	
Oficina receptora:	OEPM Madrid	
Su referencia:	231-10	
Solicitante:	UNIVERSIDAD DEL PAIS VASCO - EUSKAL HERRIKO UNIBERT-SITATEA	
Número de solicitantes:	1	
País:	ES	
Título:	PLACA PARA PILAS DE COMBUSTIBLE CON CÁMARA DE DISTRIBUCIÓN DE REACTIVO	
Documentos enviados:	Descripcion-1.pdf (14 p.) Reivindicaciones-1.pdf (3 p.) Resumen-1.pdf (1 p.) Dibujos-1.pdf (8 p.) OLF-ARCHIVE.zip	package-data.xml es-request.xml application-body.xml es-fee-sheet.xml feesheet.pdf request.pdf
Enviados por:	CN=ENTIDAD HERRERO Y ASOCIADOS SL - CIF B28865236 - NOMBRE CARPINTERO LOPEZ FRANCISCOO - NIF 03057999B,OU=703015214,OU=FNMT Clase 2 CA,O=FNMT,C=ES	
Fecha y hora de recepción:	11 enero 2011, 13:19 (CET)	
Codificación del envío:	32:ED:2E:67:3A:DE:57:CE:29:59:1C:15:50:FD:75:AA:E6:A7:52:34	

/Madrid, Oficina Receptora/

ARTICLE IN PRESS

Design Optimization of a Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cell, PEMFC

A. P. Manso^{1*}, F. F. Marzo², A. R. Pierna², J. Barranco², A. Lorenzo² and J. Barroso²

¹Graphical Expression and Engineering Projects Dept., University of the Basque Country,
UPV-EH, Plaza de Europa 1, 20018 San Sebastián, España.

²Chemical Engineering and Environment Dept, University of the Basque Country,
UPV-EHU, Plaza de Europa 1, 20018 San Sebastián, España

Received: April 22, 2009, Accepted: June 23, 2009

Abstract: A three-dimensional numerical simulation of the performance of a polymer electrolyte membrane fuel cell (PEMFC) has been developed combining computational fluid dynamics (STAR-CD version 3.26, ADAPCO) with an expert module (es-pemfc version 2.2, ADAPCO) which comprises a computational fluid dynamic solver, specific mass transfer process and electrochemical performance in PEMFCs. The geometric design, meshing and numerical simulation processes of the PEMFC in steady operating conditions will be described. In accordance with the results obtained, the most relevant aspects affecting the PEMFC design will be discussed in order to optimize the performance of the cell.

Keywords: Simulation, PEMFC, Hydrogen

1. INTRODUCTION

Nowadays both, the polymer electrolyte membrane fuel cells (PEMFCs) and hydrogen technologies, are considered as one of the most promising alternatives for sustainable energy systems due to their very low or even inexistent carbon monoxide emissions. Nevertheless different obstacles still exist ingenieriles and scientific (as well as economic and sociopolitical) that must be overcome before these technologies are implanted in a definitive way [1]. For this reason the technology of fuel cells is submitted to an intense development. The combination of more and more optimized new materials, the new architectures of computer systems, the study of more efficient mass transfer processes and the most optimized designs, are thought to improve, in addition to other factors, the efficiency of the cells of fuel.

In this sense, the new computational fuel cell engineering technologies (CFCE) can allow us the systematically simulation, design and optimization of systems of fuel cells, allowing a minor dependency on the prototypes of hardware and reducing this way the development cycles. The CFCE needs a robust integration of models representative of a wide variety of processes and with different time scales in which integrate the fluid dynamic, ionic, elec-

tronic and thermal transport with electrochemical reactions.

There exists an extensive recognition of the use of the fuel cells as efficient and clean energy conversion devices. The fuel cells can be adapted to many different needs, have a high theoretical efficiency and, opposite to the batteries, they can produce electricity in a continued form while the necessary fuel is continuously supplied. When they are fed with hydrogen, the only reaction products are water and heat. In addition to the problems related to the infrastructure necessary for the distributed supply of the hydrogen [2], the principal obstacles for the development and commercialization of the PEMFCs are principally the cost, the durability and the yield of operation [3].

A PEMFC is fundamentally constituted by seven components. The anode flow channel (AF), the anode diffusion layer (AD) and the anode catalysts layer (AC), in the anodic part. Separating the anodic part of the cell with the cathodic part there is the polymeric membrane (M). In the cathodic part are placed the cathodic catalyst layer (CC), the cathode diffusion layer (CD) and the cathode flow channels (CF). The multi layer structure form by AD-AC-M-CC-CD components is defined as the MEA (Membrane Electrode Assembling) meanwhile the AD-AC and CC-CD constitute the fuel cell electrodes [1]. The correct assembly of these components is of great importance for the final performance of the PEMFC.

The operational principles of the PEMFC are quite simple. The

*To whom correspondence should be addressed: Email:angel.perez@ehu.es
Fax: (+34) 943017130

hydrogen feeds in the cell, across the AF, spreads in AD and reaches the catalyst, where it oxidizes and liberates electrons and protons. The protons that are generated in the plate behave across the polymer electrolyte membrane (PEM) towards the cathode. As the membrane is not an electronic driver, the electrons liberated in the plate flow across an external circuit, generating useful electrical power. At the same time oxygen (or air) feeds across the CF. The oxygen reaches the CC, where it reacts with the protons and electrons to generate water.

The enhance of PEMFCs performance can be reached increasing so much the transport and/or reaction rates, as well as the relation surface/volume of the interfacial areas where the reaction/transport takes place. Thus, it is necessary to identify all the possible limitations and their origins. The In-situ measurements carried out to detect these anomalies are very difficult due to the reduced space where the electrochemical reactions take place in the PEMFC and the complexity in including the different transport phenomenas due to his transitory nature. The mathematical models for PEMFCs based on fundamental physical-chemical processes, together with the experimental observation are, therefore, a fundamental tool for understanding the global functioning of a fuel cell.

Connecting the PEMFCs mathematical models with computational fluid dynamic modern methods (CFD) it can be form powerful hardware of CFCE that provide the necessary way to reduce the time and development costs in the PEMFCs design. Thus, it could be possible to have, on the one side, the necessary capacities for the numerical discretization and solution of conservation equations, and on the other hand, a CFCE hardware associated with specific transport processes in PEMFCs, including multiphase flows in porous medias, electrochemical reactions and transport of loaded species and water in the polymeric membrane. These processes, properly connected, constitute the bases for the success of solving the design, management of the heat and water generated problems, as well as in the progress of the performance and cost reduction in PEMFCs [4, 5].

In a PEMFC, the flow-fields are used to conduct the fuel (hydrogen) and oxygen along the anode and cathode sides of the cell, respectively. When a PEMFC gets connected in series to obtain an increase in power, they constitute a so call stack, which gets all the simple cells connected by means of bipolar plates. A bipolar plate is a multifunctional component of a fuel cell stack, since it has the function of distributing the gases and coolant homogeneously over the whole area of the single cells; separation of the fuel, oxidant gasses and coolant; and collecting the current produced in the electrochemical reactions.

The design of the flow channels in bipolar plates is one of the key factors affecting the performance of a PEMFC, thus it can promote the rate of reagent transport along the channel as in the anodic or cathodic gas diffusion layer, before reaching the catalytic layer. This distribution of the reaction causes gradients in temperature and water production over the area of the cell which can lead to ternary effects such as the local flooding when the local partial pressure of water exceeds the saturation pressure fro water at the local temperature.

Studies of the geometric section and design of the flow-field path length have been carried out concerning the effect on the distribution of current, temperature, and electrochemical variables on commercial-size PEMFC. Shipmate et al. [6, 7] studied a 3D serpentine

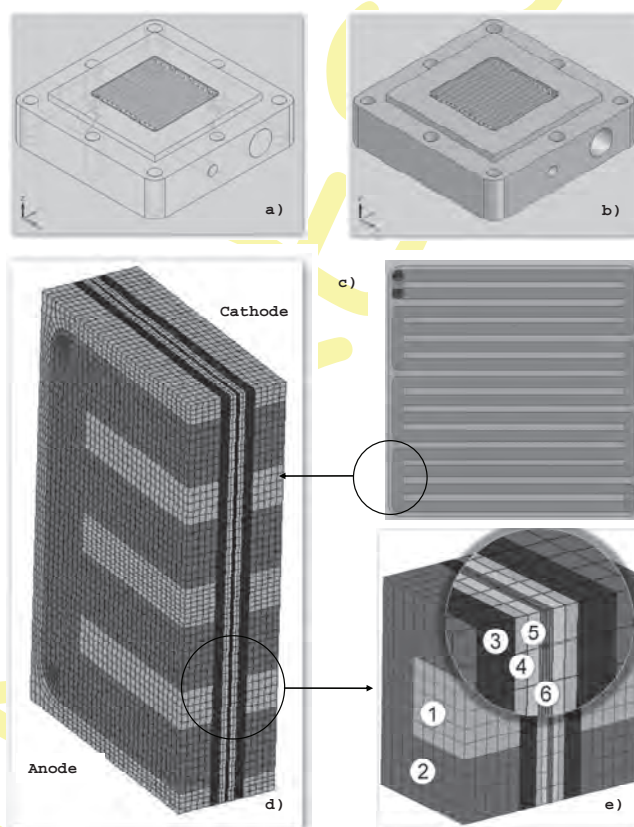


Figure 1. a), b): Hydrogen PEMFC current collectors and graphite bipolar plates with the flow channels. The same geometry for both anode and cathode are shown. c) Detail of the PEMFC flow channels. d) Geometry surface mesh used for CFD calculation, e): surface mesh components: (1) solid domain; (2) anodic and cathodic flow channels (fluid domain); (3, 4, 5) anodic and cathodic diffusion layer (GDL, Gas diffusion Layer); (6) membrane.

flow-field model in an attempt to explain how 200 cm² serpentine flow-fields with different number of gas paths, and thus different gas path lengths, affect performance and species distribution. They concluded that changing the number of parallel channels in order to change the path length of the flow-field of the PEMFC, affects its performance and uniformity. Thus it was finally found that the shorter path length gives more uniform current density distribution and less condensed liquid water than the longer paths. With the innovation in the design of the new flow-fields, it is becoming possible to increase the gas flow by convection under the ribs of the cell [9, 10, 11] facilitating so much the mass transport to the electrode as the elimination of water flooding problems, and thus, to improve the yield and the operational stability of the PEMFC.

The aim of this work is the design, by means of CAD techniques, and the simulation of a hydrogen PEMFC with a serpentine flow field (type SSF, Serpentine Flow Field), by means of CFD techniques, in order to establish a working methodology that would provide the systematical study of the influence of the different operational variables in the performance of the cell. A 3D fuel cell (PEMFC) model will be analyzed comprising fluid dynamic (CFD;

STAR-CD version 3.26, ADAPCO) and specific processes of transport and electrochemical reactions in a PEMFC by means of the expert module pemfc (version 2.20, ADAPCO) [12].

2. EXPERIMENTAL

Numerical simulation is based in a complete CFD three dimensional (3D) mass transfer model as a function of the temperature and the change of water phases. The flow channel geometry used in this work is shown in Fig. 1 a) and b). It has double channel with 13 serpentine features. The total active surface is 319,44 mm² with a volume of 159,72 mm³. The channels cross section is of 1 mm wide with a 0.5 mm depth. Anode and cathode present the same geometry. Details of the cell canalization geometry are shown in Fig. 1 c). The MEA is located between the anode and cathode diffusion layers (GDLs) which contain micro-layer. A whole of 931456 cells have been used to design the surface mesh and to define the computing domains necessary for modelling the finished PEMFC. This three-dimensional surface mesh is shown in Fig. 1 d) and e). This 3D geometry was used for the CFD calculation.

Previous to the 3D surface mesh design of the cell it was studied the cell in a 2D geometry. This 2D geometry was divided in specific sub-section capable of further generate a complete and coherent 2D solid mesh. During this study a vertex file was generated. Later on, and once the 2D study was completed, all the 2D structures were assembled forming the 3D surface mesh. The vertex file generated in the 2D study of the cell, will now constitute the set of the three coordinates (x, y, z) of the 3D surface mesh vertexes. Once the final file was created it was exported to the STA-CD environment building the mesh as follows: 1) reading of the vertex files; 2) generation of poly-lines and two-dimensional meshes; 3) creation of the three-dimensional surface mesh for assembling; 4) homogenization of the surface mesh, generating the necessary connections; 5) mesh refinement. It was assign to each component (MEA, GDL and fluid) a specific thickness and a certain number of layers (MEA: 0.05 mm/4; GDL: 0.25 mm/5; fluid: 0.5 mm/5); 6) assignation of different properties to the cells. 10 different types of cells were generated (Fig. 1 e)): fluid (red) plate, GDL plate (dark blue, orange and ciano); fluid (red) cathode, GDL cathode (dark blue, orange and ciano); MEA on (rose); solid (ciano).

The equations that are solved in the model representative of the PEMFC include the conservation of mass, the equations of Navier-Stokes, the equations of transport of species, the equation of the energy, and the model of the water phase changes. These equations are developed in the works of S. Shimpalee et al. [13,14,15,16]. The model of water phase changes bears in mind the presence of a water layer or film in the anodic and cathodic catalyst surfaces of the MEA. Thus, when the local water activity overcomes the unit, liquid water exists in the control volume and a film of liquid water forms on the surface. The thickness of this liquid film depends on the speed of condensation / evaporation and on the water production due to the oxygen/hydrogen electrochemical reaction. The solubility of H₂ and O₂ is included in the model using the Henry's law to take into account the diffusion of the reagent gases towards the surface of the MEA and across the water film. Thus, as a result of water condensation the local current will decrease.

In order to solve the mathematical model based in the comprised fluid-dynamic (CFC), specific transport, and electrochemical reactions on the PEMFC software it was used a volume control tech-

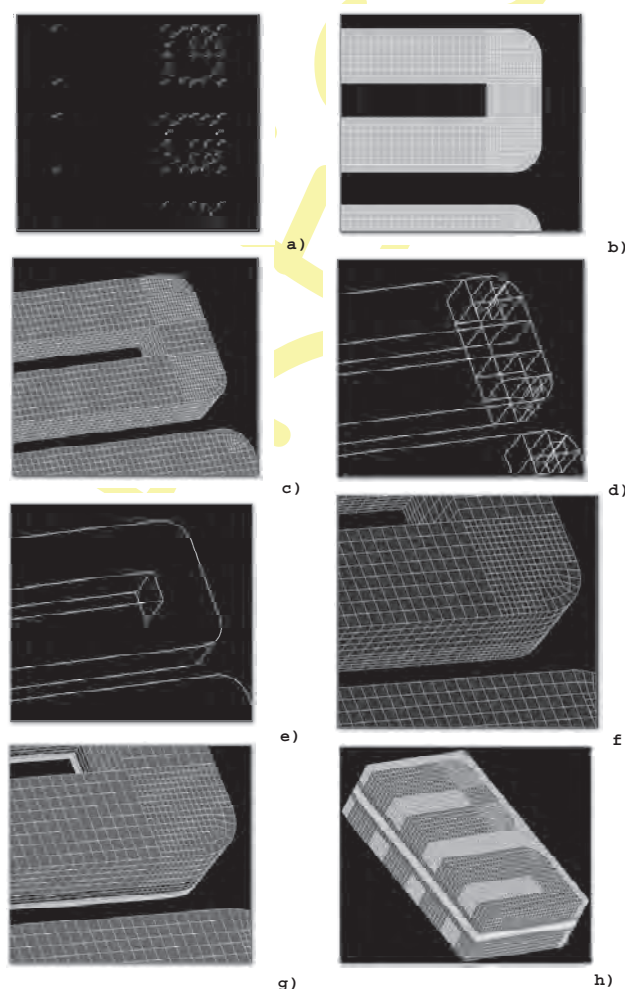


Figure 2. PEMFC surface meshing process for CFD computational measures. a) Vertex files; b) bi-dimensional polilines and meshes; c) Three-dimensional meshing by 2D assemblies; d,e)homogenization of the mesh, coupling; f) mesh refinement. To each component (MEA, GDL and fluid) it is assigned a mesh with a determined width and number of layers (MEA: 0.05 mm/4; GDL: 0.25 mm/5; fluid: 0.5 mm/5); g) Properties assignation to the cells.

nique based in a commercial program (STAR_CD, version 3.26) [17] together with an expert module for PEMFC (es-pemf version 2.2) [18]. This software needs to specify the source terms for the species equations, transport equations and generation of heat caused by electrical losses equations [13, 16, 18]. Standard es-pemfc has also additional subprograms in the module capable of calculating the overpotential, permeability and effective gas diffusivity.

The properties of the materials used in the PEMFC simulation with the groove geometries as shown in Fig. 1 c) are reported in Table 1 [18]. Table 2 shows the anode and cathode operational conditions for a cell potential of 0.5 V.

Table 1. GDL (Gas diffusion Layer) y MEA (Membrane Electrode Assembly) properties

Channels width (mm): 1 mm
Channels height(mm): 0.5 mm
Channel length (mm): 165 mm
GDL thickness (μm): 0.25 μm
Thermal conductivity de GDL ($\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$): 0.25
MEA thickness (catalytic layer included; μm): 50
Thermal conductivity of the MEA ($\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$): 0.15
Thermal conductivity of the bipolar plates ($\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$): 5.7
Dry membrane density (g cm^{-3}): 2
Equivalent weight of dry membrane (g mol^{-1}): 1100

Table 2. Operational conditions used in the PEMFC simulation

Inlet conditions in the anodic channel

H ₂ mass flux (kg s^{-1}): 1.39E-08
Inlet gas rate (m/s): 0.33
H ₂ mass fraction: 0.115
H ₂ O mass fraction: 0.885
Inlet gas temperature ($^{\circ}\text{C}$): 80

Inlet conditions in the cathodic channel

O ₂ mass flux(kg s^{-1}): 1.092E-06
Inlet gas rate (m/s): 0.98
O ₂ mass fraction: 0.183
H ₂ O mass fraction: 0.215
N ₂ mass fraction: 0.602
Inlet temperature of the gass ($^{\circ}\text{C}$): 70

Operational conditions

Open circuit potential (V): 0.96
Outlet pression (kPa): 101
H ₂ Exchange current density (A cm^{-2}):0.2
O ₂ Exchange current density (A cm^{-2}):0.02
Fuel cell temperature ($^{\circ}\text{C}$): 70

3. RESULTS AND DISCUSSION

Fig. 3 shows the local current density distribution over the MEA surfaces, the oxygen mass-fraction, the overpotential and the mass fraction of liquid water in the MEA (cathode) in the operational condition of Table 2. It can be observed in Fig 3 a), that the current density decreases from the gas inlet to the gas outlet, as a result of the reduction of the concentration of the reactant gases. There exist a relation between the in the cathode, Fig.3.b) and the current density distribution. Thus, the oxygen mass-fraction decreases as the current density decreases. The reduction of the oxygen concentration provokes an increase of the superficial overpotential, Fig.3.c).

On the other hand, there exist low values of the liquid water mass fraction in the cathodic part of the MEA, Fig.3 d) which shows little variations from the inlet towards outlet. The water flux through the MEA is included as source term so much for the anode as the cathode taking into account the net water flux per proton flux (α scalar α), the water content in the membrane and the diffusion coefficient of water, as described in [18]. The conductivity distribution on the cathodic part of the MEA, the net water flux per proton flux (α) and the temperature distribution are shown in Fig. 4 a), b) and c), respectively. As observed in the figure, the conductivity values of the membrane are relatively low decreasing from the inlet towards the outlet of the cell. Alpha values give information related to the dominant process in the water transfer through the membrane. Thus, positive values indicate the electro-osmotic drag

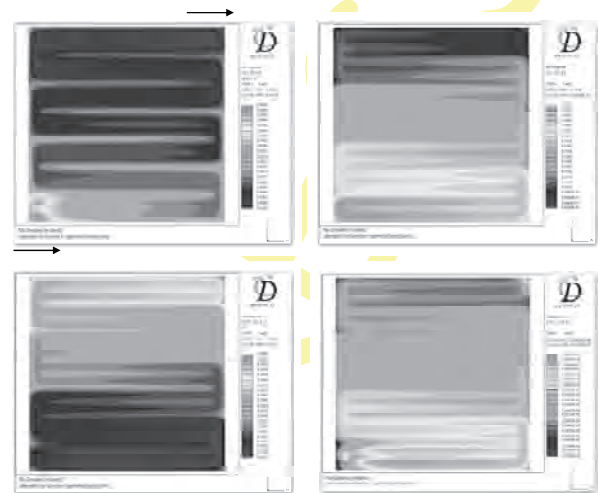


Figure 3. a) Local current density distribution (A cm^{-2}); b) oxygen mass fraction; c) overpotential (V); d) liquid water fraction in the MEA; cathode.

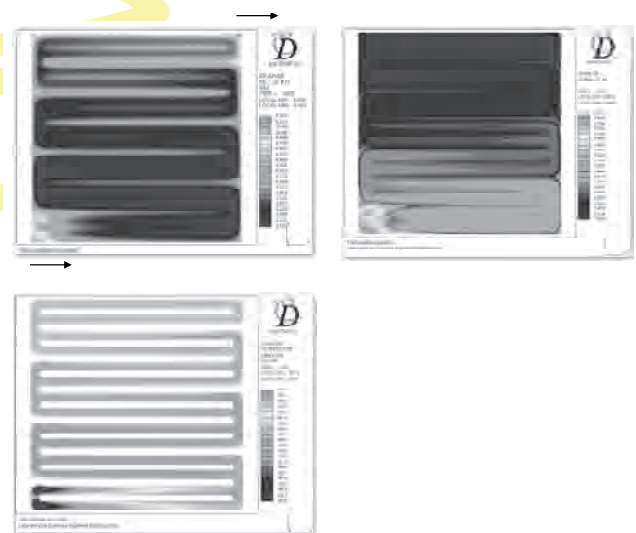


Figure 4. a) Conductivity distribution of the MEA; b) net water flux per proton flux, α distribution; c) Temperature distribution; cathode.

of water molecules from the anode towards the cathode as the leading process, where as negative values are related to the diffusion water transport from the cathode towards the anode. Finally, values close to zero indicate a proper balance in water content in the cell [13]. In this case, a decrease in the membrane conductivity provokes a decrease in α values, although they are always positive values (max. 0.85; min. 0.29). The maximum conductivity values are obtained at the inlet of the cell, in which the humidity conditions of the membrane are optimal. The dew points of the inlet fluxes (anode / cathode; 80/70 $^{\circ}\text{C}$) are lower than the temperature of the cell, which presents a uniform temperature distribution. Fig. 4 c). The condensation of liquid water is not favoured giving the higher temperature of the cell in comparison with the dew tempera-

ture, decreasing the fraction of liquid water in the MEA, Fig. 3.c), and the conductivity values of the membrane, Fig. 4.a).

4. CONCLUSIONS

The behaviour of a PEMFC has been simulated combining a design CAD software and a CFD computational technology, using a model 3-D implemented with conservation of mass, momentum transport and conservation of energy equations with the electrochemical processes that take place in the fuel cell electrodes. The results have been used to discuss some of the most out-standing aspects which affect the design of a PEMFC, in order to optimize its design and improve the performance.

The methodology that has been used in this design process and simulation will be applied in the future to new prototypes of PEMFC of type SFF, in order to study the influence of the geometry of the flow channels and of new materials (MEA, electrocatalysts, on GDLs) in the fuel cell performance.

5. ACKNOWLEDGEMENTS

The authors gratefully acknowledge the financial support of the Basque Government (Education, University and Investigation Department; RC-2008-1-36), the U.P.V/E.H.U (GIU2006/2008 project) and to the MEC (CTQ2006/13163/BQU, FEDER foundations) for the economic help. The SGI/IZO-SGIker UPV/EHU is gratefully acknowledged for generous allocation of computational resources.

REFERENCES

- [1] N. Djilali, *Energy*, 32, 269 (2007).
- [2] Sperling D. Cannon JS, (editors). *The hydrogen energy transition*. Elsevier, 2004.
- [3] Stone C., Morrison A. E., *Solid State Ionics*, 152, 1 (2002).
- [4] K. Z. Yao et al., *Fuel Cells*, 4, 1 (2004).
- [5] Weber A. Z., Newman J., *Chem. Rev.*, 104, 4679 (2004).
- [6] Shimpalee S., Greenway S., Spuckler D., Van Zee J., *J. Power Sources*, 135, 79 (2004).
- [7] Shimpalee S, Greenway S, Van Zee J., *J. Power Sources*, 160, 398 (2006).
- [8] S. Shimpalee, J. W. Van Zee, *Journal of Hydrogen Energy*, 32, 842 (2007).
- [9] K. B. Shyam Prasad, S. Jyanti, *Journal of Power Sources*, 180, 227 (2008).
- [10] C. Xu. T. S. Zhao, *Electrochemistry Communications*, 9, 497 (2007).
- [11] J. P. Feser, A. K. Prasad, S. G. Advani, *Journal of Power Sources*, 161, 404 (2006).
- [12] ES-PEMFC methodology and tutorial manual: CD adapco Group, <http://www.adapco.com>.
- [13] S. Shimpalee, U. Beuscher, J. W. Van Zee, *J. Power Sources*, 163, 480 (2006).
- [14] W-k. Lee, S. Shimpalee, J. W. Van Zee, *J. Electrochem. Soc.*, 150, 341 (2003).
- [15] S. Shimpalee, S. Greenway, D. Spuckler, J. W. Van Zee, *J. Power Sources*, 135, 79 (2004).
- [16] S. Shimpalee, J. W. Van Zee, *J. Hydrogen Energy*, 32, 842 (2007).
- [17] Star-CD 3.2 Methodology, CD adapco Group, <http://www.adapco.co>.
- [18] ES-PEMFC Methodology and Tutorial Manual, CD adapco Group, <http://www.adapco.co>

Available at www.sciencedirect.comjournal homepage: www.elsevier.com/locate/ijhe

Numerical analysis of the influence of the channel cross-section aspect ratio on the performance of a PEM fuel cell with serpentine flow field design

A.P. Manso^{a,*}, F.F. Marzo^b, M. Garmendia Mujika^a, J. Barranco^c, A. Lorenzo^b

^a Graphic Expression and Engineering Projects Department, University of the Basque Country, San Sebastián, Spain

^b Chemical Engineering and Environment Department, University of the Basque Country, San Sebastián, Spain

^c Department of Mechanical Engineering, University of Zaragoza, Zaragoza, Spain

ARTICLE INFO

Article history:

Received 21 December 2010

Received in revised form

15 February 2011

Accepted 17 February 2011

Available online 2 April 2011

Keywords:

PEMFC

Fuel cell

Flow-field design

Simulation

es-pemfc

Aspect ratio

ABSTRACT

This work numerically investigates the influence of the channel cross-section aspect ratio (defined as the ratio height/width) on the performance of a PEM fuel cell with serpentine flow field (SFF) design. The local current densities, velocity distributions, liquid water concentration in the membrane, hydrogen and oxygen concentrations and temperature were analyzed in the PEM fuel cell for 10 different aspect ratios, varying between 0.07 and 15, to understand the channel cross-section aspect ratio effect. The area of the channel cross section (1.06 mm^2) and the total effective reactive area of the PEM fuel cell (256 mm^2) were maintained constant in all cases. The obtained results show that at low operating voltages the cell performance is independent of the channel cross-section aspect ratio. At high operating voltages, where the influence of mass transporting velocity is predominant, as the channel cross-section aspect ratio increases the cell performance is improved. The models with high aspect ratio show, in general, more uniform current distributions, with the higher maximum and minimum intensity values, temperature distributions with smaller gradients and a superior contain of water in the membrane, which allows to obtain a higher performance. From these models the 10/06 and 12/05 aspect ratio present the best combination of variables, as shown by their polarization curves.

Copyright © 2011, Hydrogen Energy Publications, LLC. Published by Elsevier Ltd. All rights reserved.

1. Introduction

PEMFC performance depends on many factors, including the operating conditions, transport phenomena inside the cell, kinetics of the electrochemical reaction, MEA assembly and flow channel geometry [1].

PEMFC flow channels, used to supply the fuel (hydrogen) to the anode, and the oxygen to the cathode, are integrated in the bipolar plates. These are one of the key components for a fuel cell, as it performs different essential functions for the system

to operate correctly: acting as a mechanical support for the stack, keeping the different reactants apart, distributing the reactants over the catalysing surface area, driving the electrical current that is generated or managing the water and heat produced inside the cell. Some of these functions are better associated with the material's physical–chemical properties. Others, on the other hand, are intricately linked to flow channel geometry [2].

An appropriate design for PEMFC flow channels will strengthen the reactive transport velocities in the channel

* Corresponding author. Fax: +34 943017200.

E-mail address: angel.perez@ehu.es (A.P. Manso).

itself and in the GDL (Gas Diffusion Layer) before reaching the catalytic layer, where the reaction takes place. It will also be beneficial in terms of managing the cathode's water, so that it is eliminated properly. In addition, uniform distribution of the gas in the flow channel will in turn supply a uniform current density throughout the reactive area, therefore giving a uniform temperature distribution that will cause less mechanical tension in the MEA, prolonging the PEMFC's useful life.

A variety of studies have been done on the impact of the flow channels' different geometric variables on different operating aspects of the PEMFC. Yoon et al. analysed the effect of different configurations of rib and channel on the performance of a PEMFC [3]. Ferng et al. analysed the effect of different flow-field patterns in a 25 cm² single-PEMFC [4]. Shimpalee et al. analysed a 3D model with flow channels in 480 cm² coil [5] and another 200 cm² model with a different number of channels and lengths [6]. Shimpalee and Van Zee [7] ran a numerical study on how flow channels with different channel/rib cross sections (space between channels) affect the performance and species distribution in different PEMFC operating systems. D.H. Jean et al. [8] analysed different flow channel configurations (single channel, double channel, single cyclical channel and single symmetrical channels) and their influence on how the PEMFC operates. Sungho Lee et al. [9] studied the effect of different configurations of geometric parameters on how a PEMFC operates with a single right channel configuration. Recent studies analyse the influence of cross-sectional configuration of the flow channel [10] and the

Table 1 – Design parameters for the flow channels C_H : Channel height, C_W : Channel width, C_L : Channel length, L_y : Width of the reactive area, L_x : length of the reactive area.

Cross section	Model	Flow channel			MEA		Residence time (s)
		C_H (mm)	C_W (mm)	C_L (mm)	L_y (mm)	L_x (mm)	
Horizontal pos.	06/10	0.80	1.33	93.3	8	32	0.11
	05/12	0.67	1.60	84.6	8.8	29.1	0.15
	04/15	0.53	2	74.1	10	25.6	0.17
	03/20	0.40	2.66	61.3	12	21.33	0.19
	02/30	0.27	4	45.3	16	16	0.21
Vertical pos.	10/06	1.33	0.80	117.3	6.4	40	0.26
	12/05	1.60	0.67	125.3	6	42.67	0.28
	15/04	2	0.53	134.5	5.6	45.72	0.30
	20/03	2.66	0.40	145	5.2	49.23	0.32
	30/02	4	0.27	157.3	4.8	53.33	0.34

Bold values represent the design parameters for the models.

effect of the relative position of the anode and cathode flows [11,12].

With an innovating design for new flow channels, it is also possible to increase the flow of gas by convection under the ribs of the cell [13–15], thereby making it possible to both transport the mass to the electrode and eliminate the water due to flooding problems. Therefore, strengthening the gases' convective processes through the Gas Diffusion Layer by means of optimising the flow channel is also an effective way

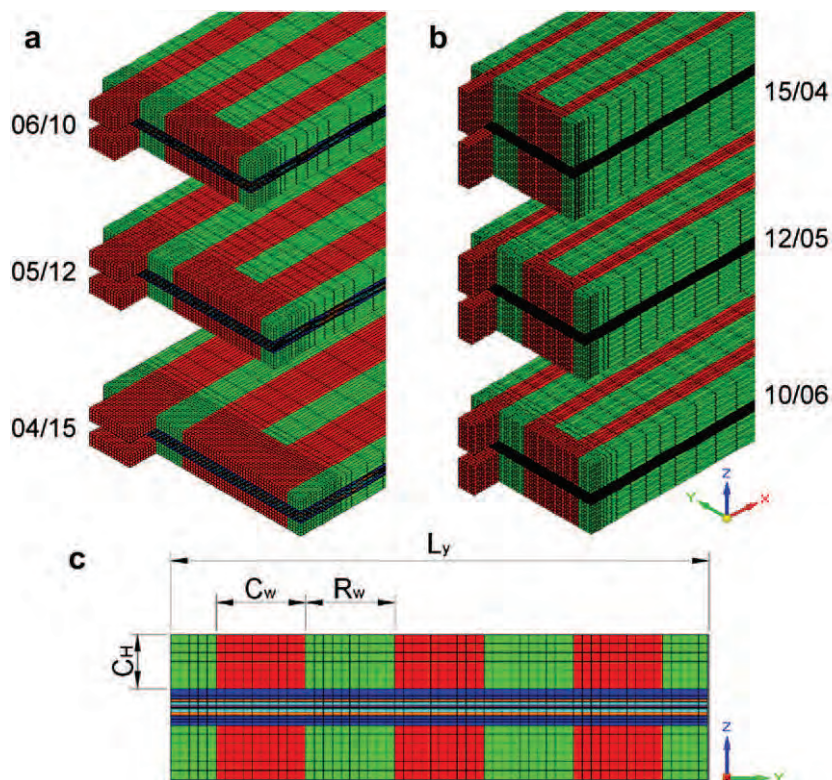


Fig. 1 – Geometric configuration of the models analysed: a) Models with horizontal cross section; b) Models with vertical cross section; c) Diagram of the cross section and parameters: C_H : Channel height, C_W : Channel width, R_W : Rib width, L_y : Width of the reactive area.

of reducing flooding in the cathode, increasing mass transport and therefore improving performance and PEMFC operation stability.

In this study, continuation of A. P. Manso et al. [16], ten models with SSF (Serpentine Flow Field) type flow channels have been analysed with height/width ratios for different channels, keeping constant the flow channel cross section area, the reactive area, the rib width and the operation conditions (pressure, temperature and relative humidity of the reagents). The aim of this study is to investigate the influence of the flow channel cross section configuration on how a PEMFC with SSF type flow channels operates.

2. Mathematical model

The three dimensional CFD model used resolves a representative model of the PEMFC that includes the mass conservation equations, Navier–Stokes equations, species transport equations, the energy equation, and the model to change the water phase. These equations are developed and validated in the works by S. Shimpalee et al. [5,7,17,18]. The water phase change model takes into account the presence of a film of water on the surface of the MEA for the anode and cathode. When the water's local activity exceeds the unit, there is liquid in the control volume and a film of liquid water forms. The thickness of this film of liquid depends on the velocity of condensation/evaporation and water production by electrochemical reaction. H_2 and O_2 solubility is included in the model using Henry's Law to account for the diffusion of reactive gases towards the MEA surface through the film of surface water. Therefore, the local current drops as the water is condensed.

A control volume technique was used based on a commercial program, STAR-CD (version 3.26) [19] along with the expert module for PEMFC (es-pemf version 2.2) [20] to resolve the mathematical model based on coupling the equations for fluid-dynamics (CFD) and specific transport processes and electrochemical reactions of the PEMFC. This

Table 2 – Geometric details and properties of the materials: GDL (Gas Diffusion Layer) and MEA (Membrane Electrode Assembly).

Properties	Value
Density of the bipolar plates ($g\ cm^{-3}$)	0.2
Conductivity of the bipolar plates ($W\ m^{-1}\ K^{-1}$)	5.7
Specific heat from the bipolar plates ($J\ kg^{-1}\ K^{-1}$)	500
Thickness of the MEA (including catalyser layer; μm)	50
Density of the dry membrane ($g\ cm^{-3}$)	2
Heat conductivity of the MEA ($W\ m^{-1}\ K^{-1}$)	0.15
Specific heat of the MEA ($J\ kg^{-1}\ K^{-1}$)	500
Equivalent weight of the dry membrane ($g\ gmol^{-1}$)	1100
GDL thickness (μm)	250
GDL porosity	0.7
Heat conductivity of the GDL ($W\ m^{-1}\ K^{-1}$)	0.25

Table 3 – Operating conditions $I_{avg} = 0.6\ A\ cm^{-2}$.

Anode	
H_2 mass flow ($kg\ s^{-1}$)	1.769E-08
Input velocity ($m\ s^{-1}$)	4.424E-01
H_2 mass fraction (%)	11.5
H_2O mass fraction (%)	88.5
Stoichiometric coefficient	1.2
Input temperature ($^{\circ}C$)	80
Friction point ($^{\circ}C$)	80
Relative humidity (%)	100
Cathode	
Air mass flow ($kg\ s^{-1}$)	1.002E-06
Input velocity ($m\ s^{-1}$)	1.316
O_2 mass fraction (%)	18.3
H_2O mass fraction (%)	21.5
N_2 mass fraction (%)	60.2
Stoichiometric coefficient	2
Input temperature ($^{\circ}C$)	70
Friction point ($^{\circ}C$)	70
Relative humidity (%)	100
Operating conditions	
Input pressure (kPa)	101
Output pressure (kPa)	101
Operating temperature ($^{\circ}C$)	70
Open circuit voltage (V)	0.96
H_2 exchange current density ($A\ cm^{-2}$)	0.2
O_2 exchange current density ($A\ cm^{-2}$)	0.02

software requires source terms to be specified for the species transport and heat generation equations due to electrical losses [7,17,20]. There are also additional sub-routines in the standard es-pemfc module to calculate the overpotential, permeability and effective diffusivity of gas.

2.1. Geometry and operation

This study has analysed 10 variants of the model corresponding to a fuel cell with a reactive area of $256\ mm^2$, using bipolar plates with SSF type (Serpentine Flow Field) flow channels. In all cases, the cross section of the flow channel ($1.06\ mm^2$), the width of the rib or gap between channels ($1.33\ mm$), the reactive area ($256\ mm^2$) and the operation conditions remain constant. The length of the flow channel is different in each model to maintain the reactive section constant. So the volume contained in the flow channels is different in each model. Therefore, the residence time is different for each model. Table 1 shows the design parameters for the different models analysed, where residence time is included. The first five models have the channel cross section arranged horizontally. The rest have the channel cross section arranged vertically. Fig. 1c) shows a diagram of the cross section for the models analysed and the parameters considered.

Working from a model with a $0.80\ mm$ high and $1.33\ mm$ wide channel (cross section arranged horizontally, $C_H < C_W$) another four models are derived where, maintaining the flow channel section constant, the width of the channel is increased as its height decreases. Fig. 1a) shows three of them.

Working from a model with a $1.33\ mm$ high and $0.08\ mm$ wide channel (cross section arranged vertically, $C_H > C_W$) another four models are derived where, maintaining the flow

channel section constant, the width of the channel is decreased as its height increases. Fig. 1b) shows three of them.

The properties of the materials used when simulating the different models are given in detail in Table 2. Table 3 represents the anode and cathode operating conditions for an average current of $I_{avg} = 0.6 \text{ A cm}^{-2}$.

3. Results and discussion

10 variants have been studied of the model corresponding to a fuel cell with a reactive area of 256 mm^2 . The results obtained are analysed below.

Fig. 2a) shows the polarisation curves corresponding to the flow channel cross section models in horizontal position ($C_H < C_W$). For operating voltages over 0.7 V , the geometry of the flow channels does not have a significant influence, as at these potentials the electrochemical reaction velocity is low with low reactive consumption and little water production. However, below 0.7 V we can appreciate significant differences between the polarisation curves. The Potential values in the ohmic control zone decrease as the width of the channels increases. When the width of the channels is changed, the predominant parameter affected is the limiting current density in the form of contact resistance and/or mass transport limitation. As the reaction areas of all the models are kept

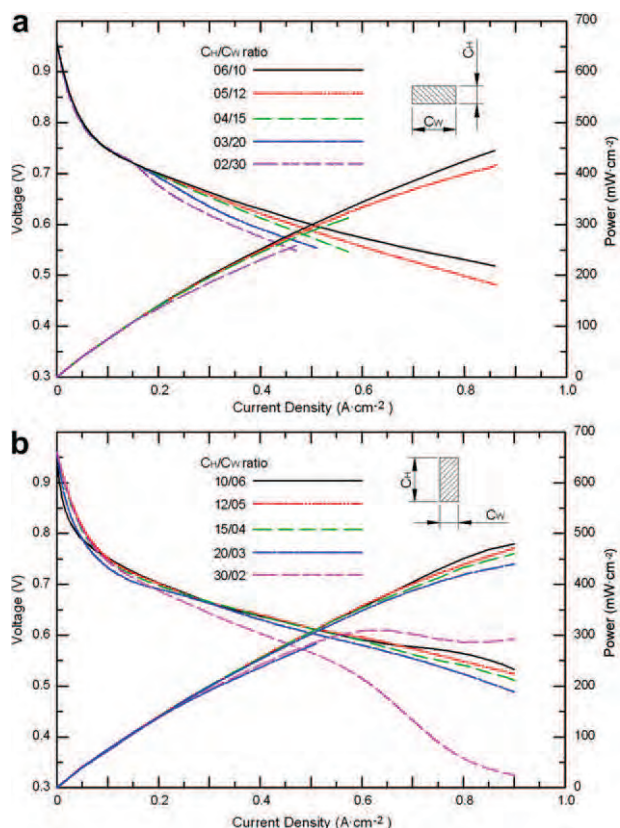


Fig. 2 – Polarization curves: a) Models with horizontal cross section (06/10, 05/12, 04/15, 03/20 and 02/30); b) Models with vertical cross section (10/06, 12/05, 15/04, 20/03 and 30/02).

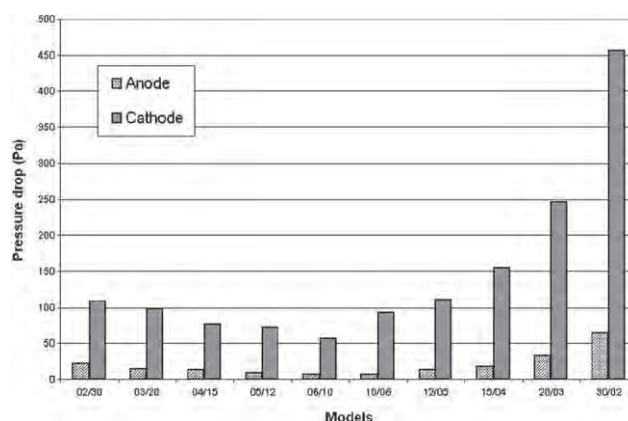


Fig. 3 – Pressure drop in anode and cathode for the different models: ΔP (Pa). $I_{avg} = 0.6 \text{ A cm}^{-2}$.

invariable by keeping the width of the ribs constant, it could not be expected that the width of the channels could have any effect in the contact resistance. Also, pressure drop may place an important role. But contrary to what can be expected pressure drop increases with the width of the channels, Fig. 3, thus the mass transport along the flow channels should be increased, giving rise to an increase in the voltage value. Such striking result could be explained if checking on the resident time of gases, Table 1. This table shows that the resident time increases as the length of the channel increases, which improve the diffusion of gases towards the catalyst layer enhancing the PEM fuel cell performance. The 06/10 model is seen to display the best behaviour, showing no problems in mass transport and thus, showing the higher limiting current density.

Fig. 2b) shows the curves obtained for the models with vertical flow channel cross section models ($C_H > C_W$). In the kinetic control zone, for operating potentials over 0.75 V , slight differences are observed between the different models and the 10/06 model has worse behaviour at higher potentials. Between 0.75 V and 0.7 V , the behaviour of the 10/06 model is inverted. In the ohmic control zone, as the operating potential drops, the behaviour of the different models is similar, except for the 30/02 model that displays very significant differences. In the zone limited by the mass transfer, for potentials values below 0.6 V , the differences between the polarisation curves are greater, and the 10/06 model presents the best behaviour. In these models narrower and larger channels are shown. Thus, it is assume that the pressure drop together with the water content will influence seriously to the behaviour of the PEM fuel cell. Figs. 3 and 4d), e) and f), show the effect of flow channels path lengths on the pressure drop and the water content at an average current density of 0.6 A cm^{-2} , respectively. These figures show that pressure drop and water content in the MEA increases with the increase of channel length. Although only the 10/06, 12/05 and 15/04 model configurations are shown in Fig. 4, the results obtained for 20/03 and 30/02 configurations showed distribution of water content (λ) values above 14. The membrane in such cases is completely humidified in a water liquid equilibrated state, which indicates that these flow channels have significant

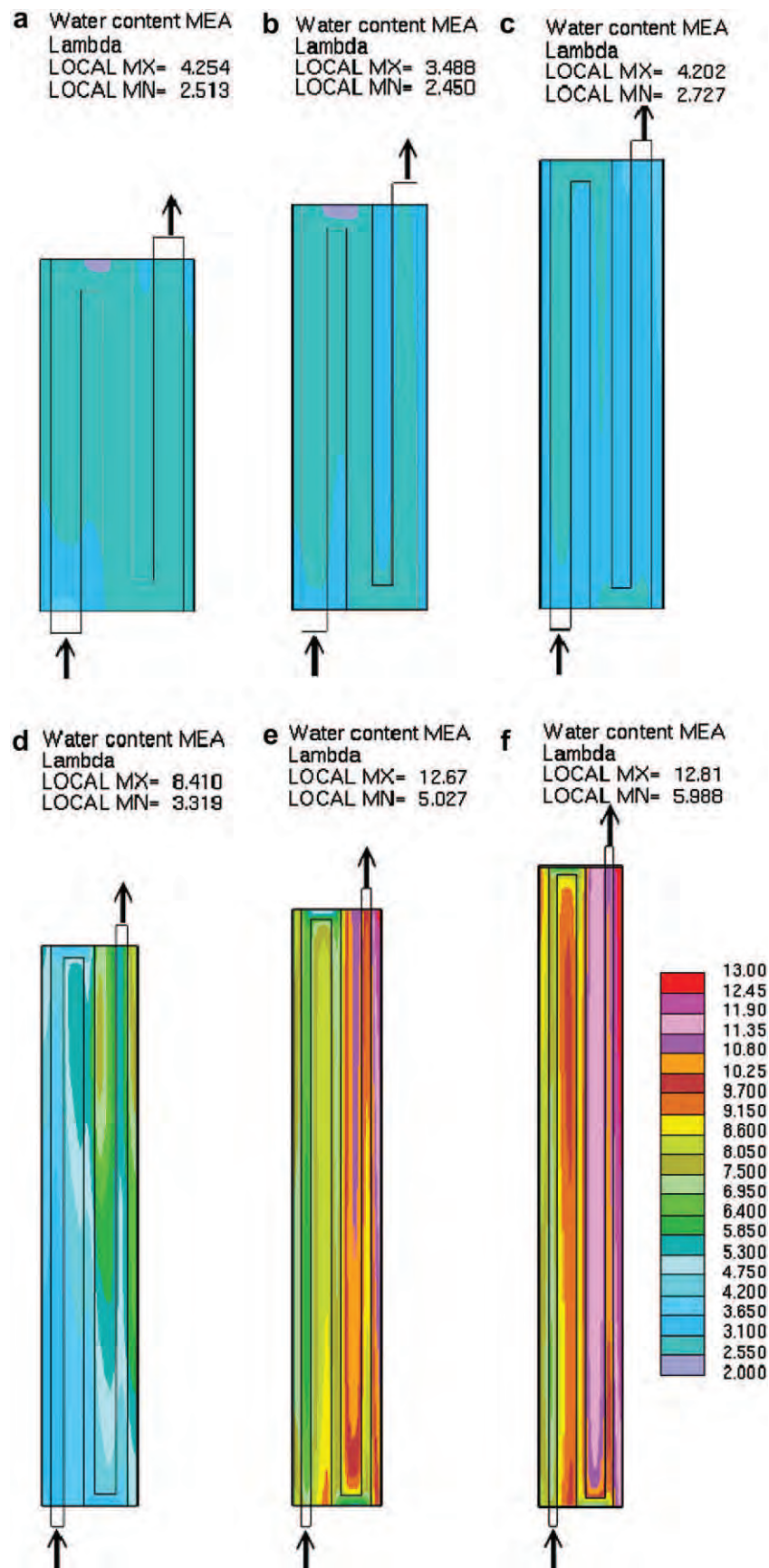


Fig. 4 – Distribution of net water content and max and min values in the membrane, λ (lambda): a) Model 04/15, ($V_{avg} = 0.53$ V); b) Model 05/12, ($V_{avg} = 0.55$ V); c) Model 06/10, ($V_{avg} = 0.57$ V); d) Model 10/06, ($V_{avg} = 0.59$ V); e) Model 12/05, ($V_{avg} = 0.59$ V); f) Model 15/04, ($V_{avg} = 0.59$ V). $I_{avg} = 0.6$ A cm⁻².

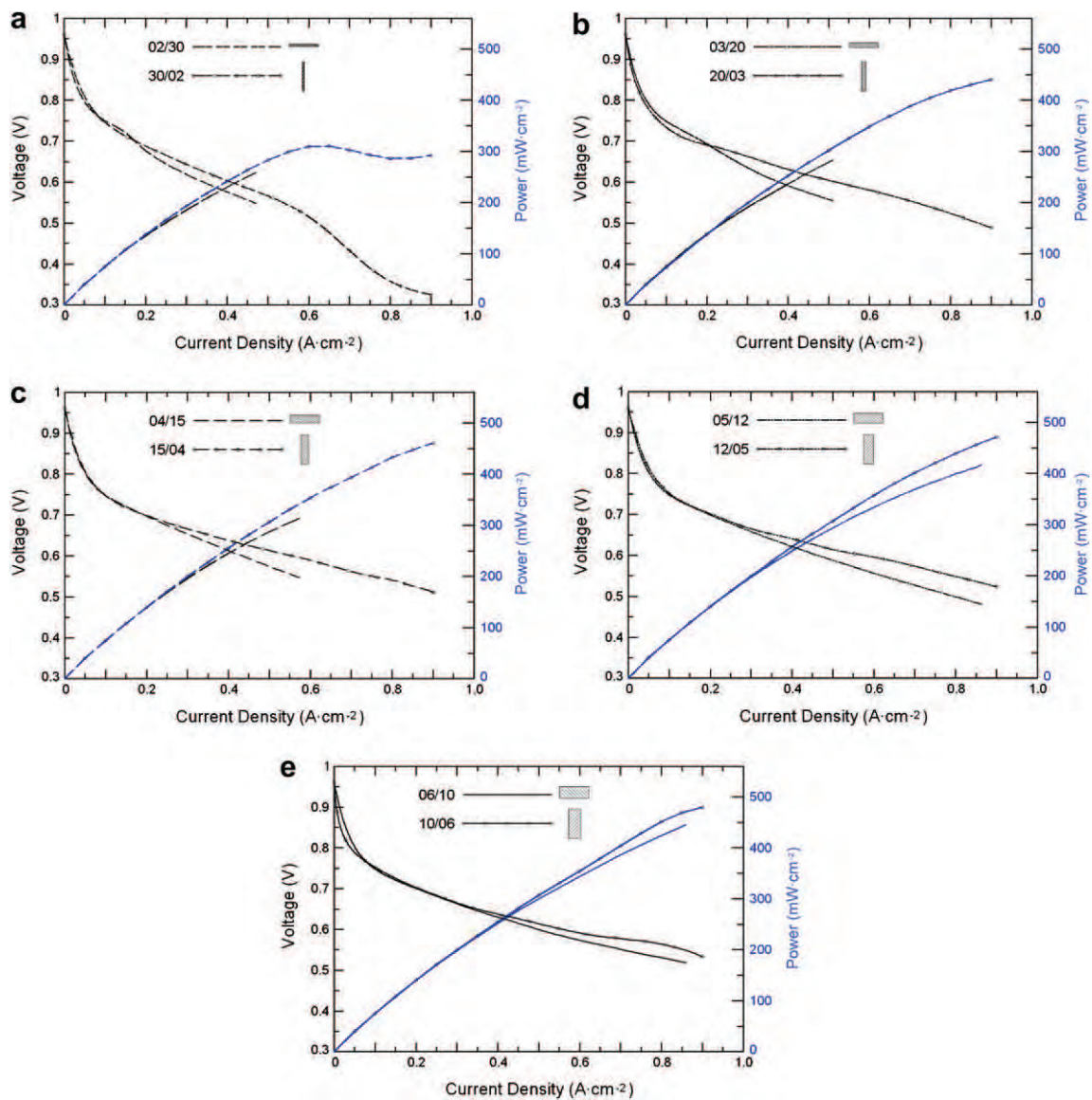


Fig. 5 – Polarization curves in pairs: a) Models 02/30 and 30/02; b) Models 03/20 and 20/03; c) Models 04/15 and 15/04; d) Models 05/12 and 12/05; e) Models 06/10 and 10/06.

fractions of liquid water [21]. Water content of the membrane is linearly related to the proton conductivity of the membrane. Thus, the higher water content leads to higher proton conductivity and a better performance of the PEM fuel cell. However, as can be observed in Fig. 2b) for 30/02 model, as the height to width ratio increases, the worst performs the cell. This is due to the effect that the flooding of the channel has on the mass transport towards the membrane. As the channel height increases, the pressure drop increases between the adjacent channels. A pressure gradient much larger than that along the channel direction, which results in a considerable cross-leakage flow between the adjacent channels [10]. Moreover, with increasing the height of the channel, the channel area in contact with the MEA is reduced, so that the cross-leakage flow decreases in both the anode and the cathode. For 30/02 model, this effect causes an increase in the liquid water mass fraction on the anode side due to back diffusion effects. Although not shown in Fig. 11, the alpha

parameter shows negative values in some areas of the 30/02 model.

Given that the performance of the most extreme models (02/30, 03/20, 20/03 and 30/02) is very low compared to the rest, the analysis and comparison of the different variables that intervene in the fuel cell's operation and that is shown below has been reduced to studying the 04/15, 05/12, 06/10, 10/06, 12/05 and 15/04 models.

Fig. 5 shows the polarisation curves in pairs, comparing sections with similar ratios but different positions. In all cases the polarisation curves are checked to see that they display better behaviour if the flow channel cross section is vertical; meaning $C_H > C_W$. This can be due to the fact that the pressure drop is higher in the models with $C_H > C_W$ and thus, the different pressure values between adjacent channels is also high. This would enhance the flows under the ribs, and as a result, the performance of the fuel cell would be enhanced. Fig. 3 shows how in models with identical sections the pressure

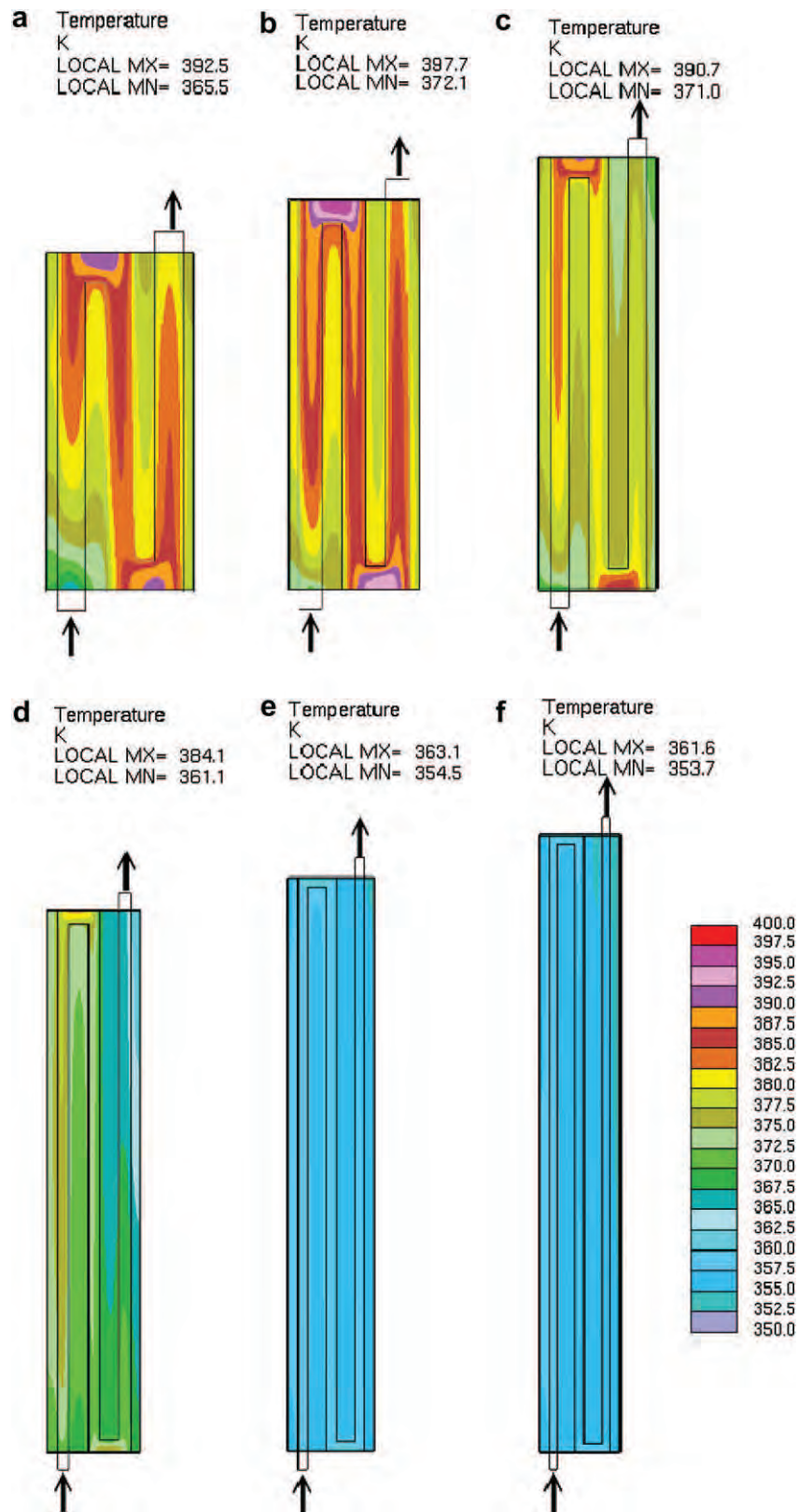


Fig. 6 – Distribution of temperature and max and min values in the membrane, (K): a) Model 04/15, ($V_{avg} = 0.53$ V); b) Model 05/12, ($V_{avg} = 0.55$ V); c) Model 06/10, ($V_{avg} = 0.57$ V); d) Model 10/06, ($V_{avg} = 0.59$ V); e) Model 12/05, ($V_{avg} = 0.59$ V); f) Model 15/04, ($V_{avg} = 0.59$ V). $I_{avg} = 0.6$ A cm⁻².

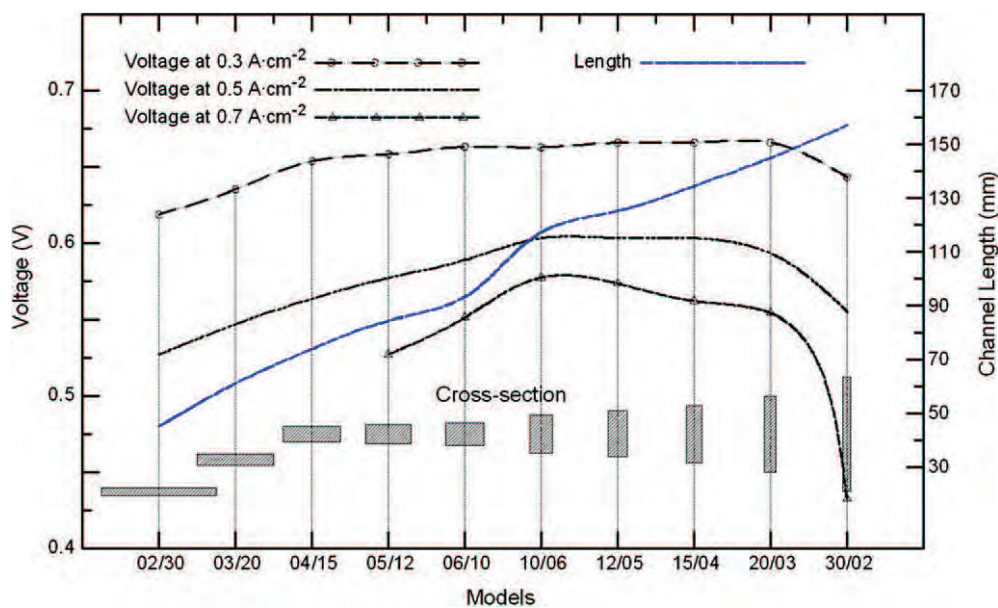


Fig. 7 – Influence of the flow channel's cross section geometry on the PEMFC voltage for a current of 0.3 A cm^{-2} , 0.5 A cm^{-2} and 0.7 A cm^{-2} .

drop in the anode and the cathode sides is higher when the section is placed vertically. This can be explained by the combination of two different effects, the resident time of the flows, Table 1 and the water content, Fig. 4. Table 1 shows that the resident time of gas flow channels increases with increasing channel height. Since the flow conditions and sectional area are the same, the flow rate is the same in all cases. Thus, residence time, defined as the ratio between the volume and flow is different. The values of resident times depicted for models 04/15, 05/12, 06/10, 10/06, 12/05, 15/04, show that the resident time increases as the length of the channel increases, which improve the diffusion of gases towards the catalyst layer enhancing the PEM fuel cell performance. Moreover, the water content is shown to be higher when the vertical geometry of the channels is used, Fig. 4.

The distribution of net water content (λ) in the different models ($C_H < C_W$ vs $C_H > C_W$) is also consistent with the increase in the temperature of the MEA, Fig. 6. The lower water content in the membrane for 04/15, 05/12, and 06/10 models enhances the formation of local hot spots when the fuel cell is under a current density demand e. i. 0.6 A cm^{-2} , as the MEA would act as a capacitor. Fig. 6 shows temperature of the MEAs for 04/15, 05/12, and 06/10 models that reaches 114.5°C up to 125°C . Such behaviour will lead to MEA failure reducing seriously the performance of the fuel cell. On the contrary, uniform distribution of the membrane water is maintained for 10/06, 12/05 and 15/04 models reaching λ values in the range of 9–13 as the channels get narrower. This behaviour enhances the proton conductivity and the homogeneous distribution of the current density, which induce a homogeneous distribution of the temperature of the MEA. Temperature values for the latter models are in the range of $97\text{--}92^\circ\text{C}$.

Fig. 7 represents the voltage of the different models for a current of 0.3, 0.5, and 0.7 A cm^{-2} and the length of the flow

channel for each model analysed. It is observed that as the height of the channel (C_H) increases and the width (C_W) drops, better results are obtained in models with horizontal cross sections ($C_H < C_W$). Model with vertical cross sections ($C_H > C_W$) 10/06, 12/05 and 15/04 display similar behaviour, whilst the 20/03 and 30/02 models display worse behaviour.

Fig. 8 shows the current distributions for the 04/15, 05/12, 06/10, 10/06, 12/05 and 15/04 models. It is seen that models with vertically positioned cross sections ($C_H > C_W$) present more uniform distribution. The 10/06 model has the highest maximum and minimum values. For the 12/05 and 15/04 models, despite presenting uniform distributions, the maximum values of the current density decrease. The models with vertical cross sections show the effect that the flow under the ribs has on the increase of the useful reaction area of the stack. As discussed above, this effect is due to the pressure drop which creates higher pressure differences between adjacent channels, thus enhancing such flow under the ribs.

To sum up, and considering the distributions of velocity in the anodic and cathodic channels, the distribution of the current density in the membrane, Fig. 8, the distributions of the mass fractions for hydrogen and oxygen in the anodic and cathodic GDL, Figs. 9 and 10 respectively, the distribution of temperature in the membrane Fig. 6, and the net water content in the membrane, λ (lambda), Fig. 4 for models 04/15, 05/12, 06/10, 10/06, 12/05 and 15/04, it can be seen that in models with cross sections that are wider than they are tall ($C_H < C_W$) current distribution is less uniform with lower max and min values, temperature distribution presents steeper gradients and higher values, and the membrane water content remains low ($2.4 < \lambda < 4.2$). This occurs because the humid reagents at the entrance arrive successfully at the reaction zones, causing an increase in the current density in this zone. Consequently, the electro-osmotic drag is greater

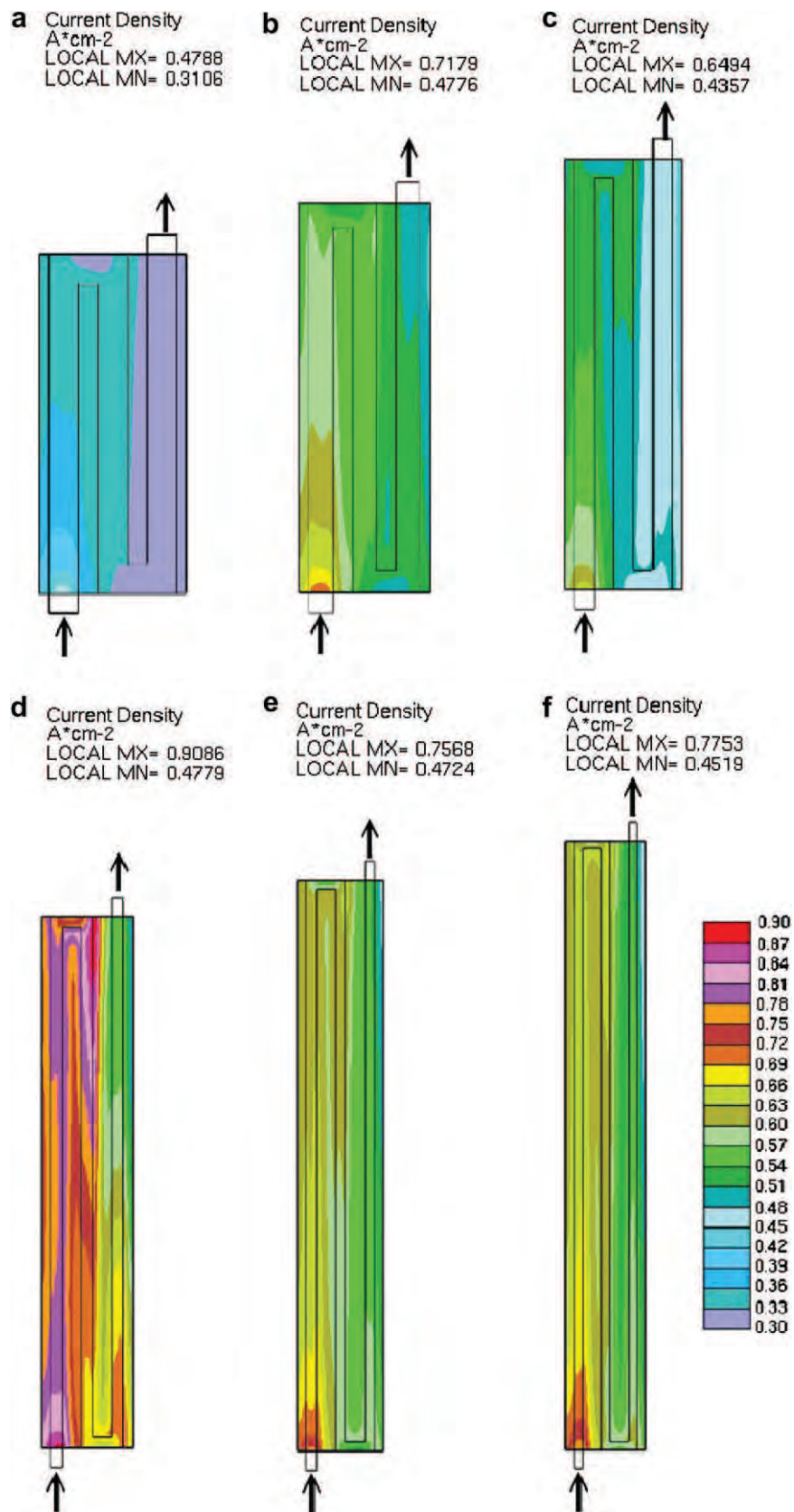


Fig. 8 – Distribution of current density and max and min values in A cm⁻² in the membrane: a) Model 04/15, ($V_{avg} = 0.53$ V); b) Model 05/12, ($V_{avg} = 0.55$ V); c) Model 06/10, ($V_{avg} = 0.57$ V); d) Model 10/06, ($V_{avg} = 0.59$ V); e) Model 12/05, ($V_{avg} = 0.59$ V); f) Model 15/04, ($V_{avg} = 0.59$ V). $I_{avg} = 0.6$ A cm⁻².

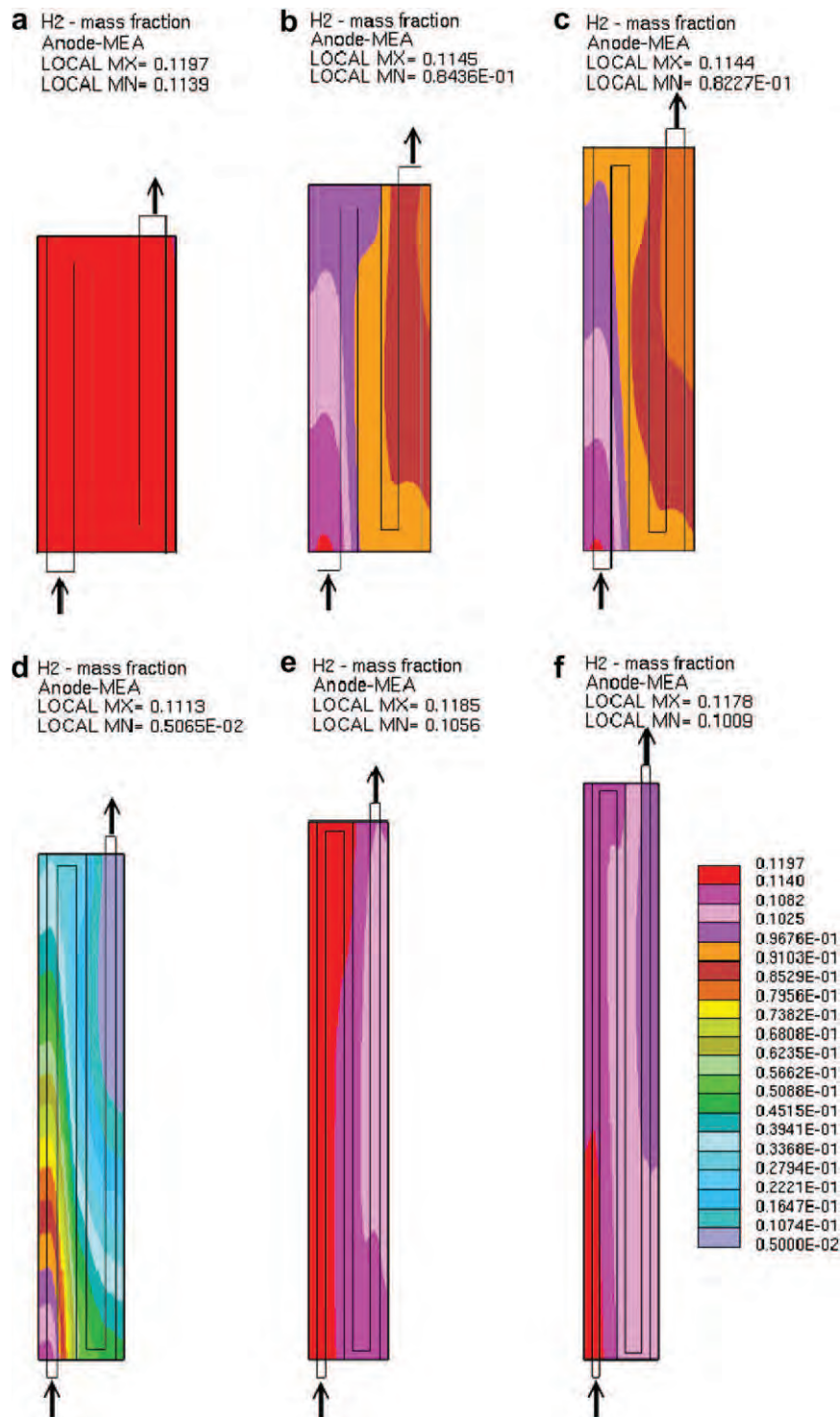


Fig. 9 – Distribution of mass fraction of hydrogen and max and min values in the anodic GDL: a) Model 04/15, ($V_{avg} = 0.53$ V); b) Model 05/12, ($V_{avg} = 0.55$ V); c) Model 06/10, ($V_{avg} = 0.57$ V); d) Model 10/06, ($V_{avg} = 0.59$ V); e) Model 12/05, ($V_{avg} = 0.59$ V); f) Model 15/04, ($V_{avg} = 0.59$ V). $I_{avg} = 0.6$ A cm⁻².

that the diffusing flow from the cathode to the anode, making the membrane's net water content (λ) drop and generating a drop in current density throughout the channel [6,22,23]. In these cases, although the concentration of hydrogen and oxygen is very uniform throughout the reactive surface, lack of appropriate membrane hydration prevents proton flow. In

the three cases, 04/15, 05/12 and 06/10, along the flow channel, there are “dead” zones where direction changes with reduced velocity profile. This causes the evacuation of the heat produced in these zones to be more complicated, causing increases in local temperature (values between 114.5 °C and 125 °C) that create small areas of dehydration in the

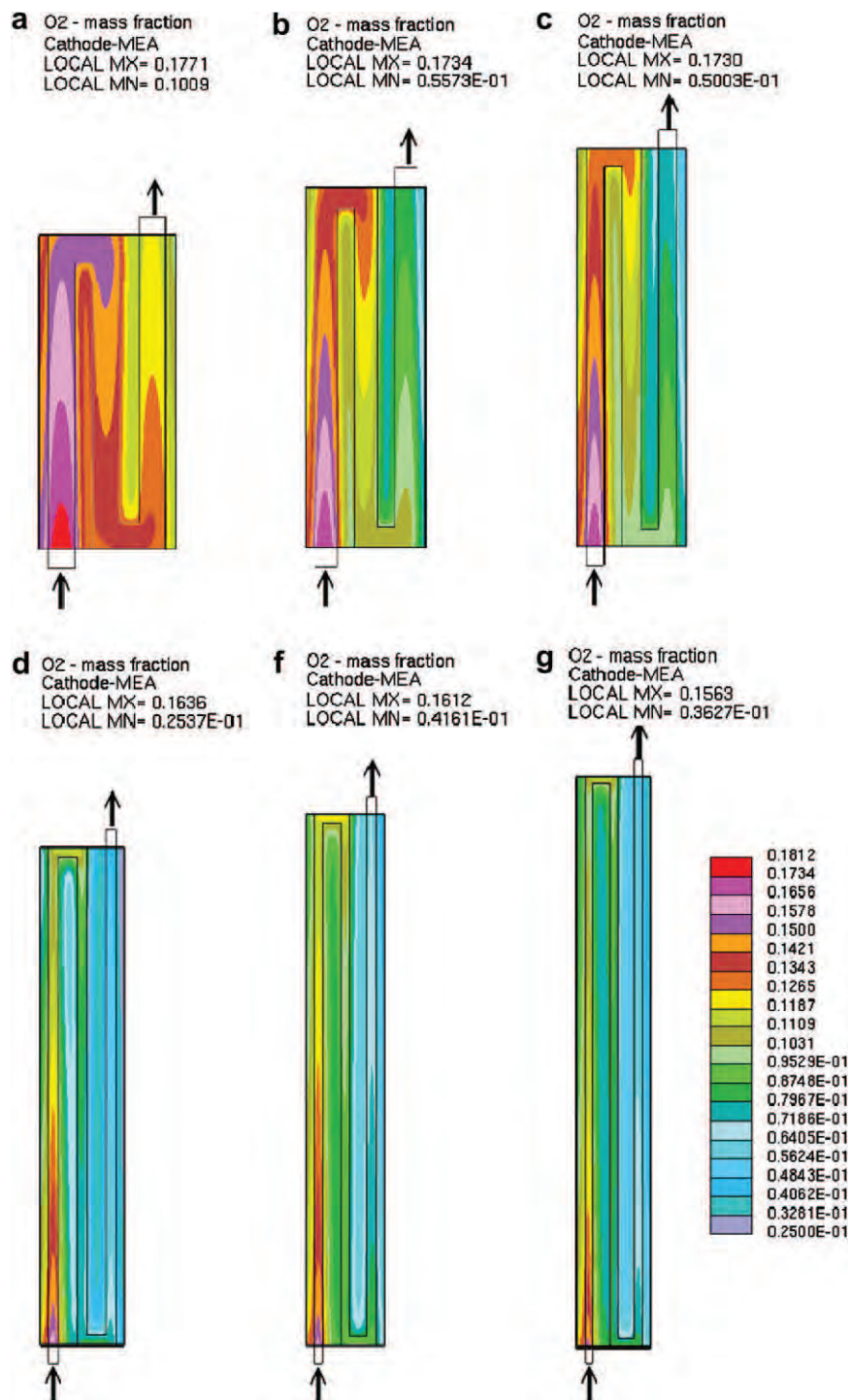


Fig. 10 – Distribution of mass fraction of oxygen and max and min values in the cathodic GDL: a) Model 04/15, ($V_{avg} = 0.53$ V); b) Model 05/12, ($V_{avg} = 0.55$ V); c) Model 06/10, ($V_{avg} = 0.57$ V); d) Model 10/06, ($V_{avg} = 0.59$ V); e) Model 12/05, ($V_{avg} = 0.59$ V); f) Model 15/04, ($V_{avg} = 0.59$ V). $i_{avg} = 0.6$ A cm⁻².

membrane ($\lambda < 2.6$). In these areas, proton conductivity is very low, increasing ohmic resistance and, as a consequence, reducing the cell's performance. It is also seen that the hydrogen and oxygen concentration in these areas does not fall, as no current is generated. In addition to the drop in the cell's overall performance, the appearance of these hot spots could lead to tensions in the membrane and reduce its

lifespan. As the channel cross section gets narrower and higher, the aforementioned effect wanes.

Regarding models with cross sections that are higher than they are wide ($C_H > C_W$), in general the current distributions are more uniform with higher max and min values, temperature distributions present gentler gradients and lower max and min values (between 3% and 8%), and the water content

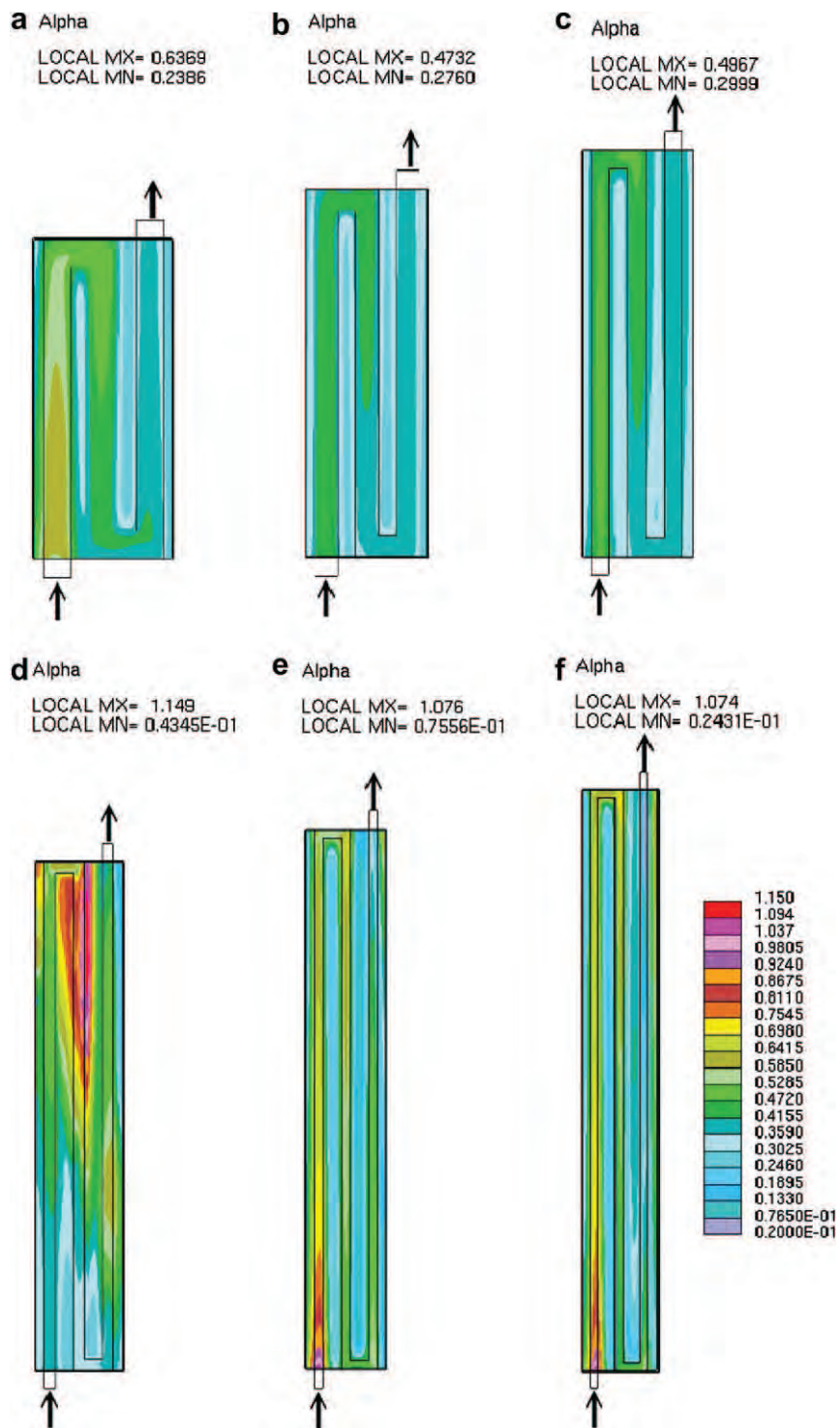


Fig. 11 – Distribution of net water flux per proton (α) and max and min values in the membrane: a) Model 04/15, ($V_{avg} = 0.53$ V); b) Model 05/12, ($V_{avg} = 0.55$ V); c) Model 06/10, ($V_{avg} = 0.57$ V); d) Model 10/06, ($V_{avg} = 0.59$ V); e) Model 12/05, ($V_{avg} = 0.59$ V); f) Model 15/04, ($V_{avg} = 0.59$ V). $I_{avg} = 0.6$ A cm⁻².

distributions in the membranes remain higher ($3.3 < \lambda < 12.8$) compared to the 04/15, 05/12 and 06/10 models.

Out of the three models analysed: 10/06, 12/05 and 15/04, the 10/06 model presents the highest current values, although the value drops along the channel as the concentration of reagents falls. The temperatures over the membrane are

higher, reaching 110 °C in the hotter spots (changes of direction). The net water content in the membrane remains around: $3.3 < \lambda < 8.4$.

The 12/05 and 15/04 models display very similar behaviour to each other, with more uniform current distributions but with values between 15% and 20% lower than the 10/06 model;

the temperature in the membrane remains near 90 °C and the membrane water content ($5 < \lambda < 12.8$) is higher and displays more uniform distribution. These two models present higher concentrations of reagents at the cell output than in the 10/06 model, which indicates a loss of efficiency in the use of oxygen. This might be because, due to the geometry of their higher and narrower channels, the 12/05 and 15/04 models present greater difficulty in transporting reagents to the catalytic layer, reducing the electrochemical reaction and, consequently, the current density and the overall performance of the cell. On the other hand, this reduction in the electrochemical reaction favours appropriate membrane hydration and a lower temperature gradient, which would help to prolong its useful life.

Finally, the pressure drop is a further factor to take into account to achieve an efficient PEMFC design, given that the more energy required to drive the reagents effectively, the lower the net performance obtained from the PEMFC [24]. As shown in Fig. 3 the 06/10 model has the geometry causing the least drop in pressure, whilst this is the 10/06 model among the models with the best overall performance.

4. Conclusions

This work has studied the influence of the flow channel's cross section geometric parameters on how a PEMFC works. It has analysed the distributions of velocity, current density, hydrogen and oxygen concentrations, temperature and membrane water content for the 10 variants of the model corresponding to a fuel cell with a reactive area of 256 mm², using bipolar plates with SSF (Serpentine Flow Field) flow channels: 02/30, 03/20, 04/15, 05/12, 06/10, 10/06, 12/05, 15/04, 20/03 and 30/02.

The results have been used to discuss some of the most remarkable aspects affecting the design of a PEMFC, with the aim of improving this design and optimising its performance.

Models with low channel cross-section aspect ratio ($C_H < C_W$) present current distributions that are less uniform, with lower max and min current values, temperature distributions with higher gradients and higher values, and low water content in the membrane, that determine a lower overall performance.

On the other hand, models with high channel cross-section aspect ratio ($C_H > C_W$) display more uniform current distributions, with higher max and min current values, temperature distributions with gentler gradients and lower values, and higher water content in the membrane, which gives better performance. From these models the 10/06 and 12/05 present the best combination of variables, as shown by their polarisation curves.

In practice, the design of a PEMFC is often reduced to designing the bipolar plates that, in turn, basically involves designing flow channels. Improvements in flow channel design for the bipolar plates can help to achieve the targets set for costs and operation to commercialise PEMFC.

Acknowledgements

The authors would like to thank the Polytechnic University School of San Sebastián as part of the University of the Basque

Country and the Gipuzkoa Local Government (OF 94/2008) for economic funding provided to carry out this work. Thanks must also go to the General Computing Service Applied to Research (SGI/IZO-SGIker) at the UPV/EHU for the computer resources available to develop this work (licences for the STAR-CD 3.26 software and Arina cluster). Authors are indebted to the Reviewers. The points and concern addressed during the reviewing process have helped to improve the final quality of the paper.

REFERENCES

- [1] Gregor Hoogers. Fuel cells technology handbook. USA; 2003.
- [2] Li Xianguo, Sabir Imran. International Journal of Hydrogen Energy 2005;30:359–71.
- [3] Yoon Young Gi, Lee Won Yong, Park Gu Gon, Yang Tae Hyun, Kim Chang Soo. Effects of channel and rib widths of flow field plates on the performance of a PEMFC. International Journal of Hydrogen Energy 2005;30:1363–6.
- [4] Ferng Yuh Ming, Su Ay. A three-dimensional full-cell CFD model used to investigate the effects of different flow channel designs on PEMFC performance. International Journal of Hydrogen Energy 2005;30:4466–76.
- [5] Shimpalee S, Greenway S, Spuckler D, Van Zee JW. Predicting water and current distributions in a commercial size PEMFC. Journal of Power Sources 2004;135:79–87.
- [6] Shimpalee S, Greenway S, Van Zee JW. The impact of channel path length on PEMFC flow-field design. Journal of Power Sources 2006;160:398–406.
- [7] Shimpalee S, Van Zee JW. Numerical studies on rib & channel dimension of flow-field on PEMFC performance. International Journal of Hydrogen Energy 2007;32:842–56.
- [8] Jeon DH, Greenway S, Shimpalee S, Van Zee JW. The effect of serpentine flow-field designs on PEM fuel cell performance. International Journal of Hydrogen Energy 2008;33:1052–66.
- [9] Lee Sungho, Jeong Heeseok, Ahn Byungki, Lim Taewon, Son Youngjin. Parametric study of the channel design at the bipolar plate in PEMFC performances. International Journal of Hydrogen Energy 2008;33:5691–6.
- [10] Choi Kap-Seung, Kim Hyung-Man, Moon Sung-Mo. Numerical studies on the geometrical characterization of serpentine flow-field for efficient PEMFC. International Journal of Hydrogen Energy 2011;36:1613–27.
- [11] Morin Arnaud, Xu Feina, Gebel Gérard, Diat Olivier. Influence of PEMFC gas flow configuration on performance and water distribution studied by SANS: evidence of the effect of gravity. International Journal of Hydrogen Energy 2011;36:3096–109.
- [12] Valiño Luis, Mustata Radu, Gil María Isabel, Martín Jesús. Effect of the relative position of oxygen–hydrogen plate channels and inlets on a PEMFC. International Journal of Hydrogen Energy 2010;35:11425–36.
- [13] Shyam Prasad KB, Jyanti S. Effect of channel-to-channel cross-flow on local flooding in serpentine flow-fields. Journal of Power Sources 2008;180:227–31.
- [14] Xu C, Zhao TS. A new flow field design for polymer electrolyte-based fuel cells. Electrochemistry Communications 2007;9:497–503.
- [15] Feser JP, Prasad AK, Advani SG. On the relative influence of convection in serpentine flow fields of PEM fuel cells. Journal of Power Sources 2006;161:404–12.
- [16] Manso AP, Marzo FF. Design optimization of a polymer electrolyte membrane fuel cell, PEMFC. Journal of New Materials for Electrochemical Systems 2009;12:133–7.

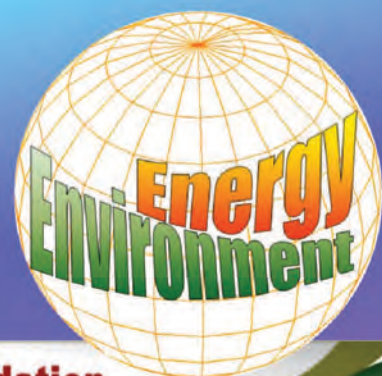
-
- [17] Shimpalee S, Beuscher U, Van Zee JW. *Journal of Power Sources* 2006;163(1):480.
- [18] Lee Wk, Shimpalee S, Van Zee JW. Verifying predictions of water and current distributions in a serpentin flow field PEMFC. *Journal of the Electrochemical Society* 2003;150: A341–8.
- [19] Star-CD 3.2 Methodology, CD adapco Group, <http://www.adapco.com>.
- [20] ES-PEMFC Methodology and Tutorial Manual, CD adapco Group, <http://www.adapco.com>.
- [21] Oosthuizen PH, Sun L, McAuley KB. The effect of channel-to-channel gas crossover on the pressure and temperature distribution in PEM fuel cell flow plates. *Applied Thermal Engineering* 2005;25:1083–96.
- [22] Buchi FN, Scherer GG. *Journal of the Electrochemical Society* 2001;148:A183–8.
- [23] Buchi FN, Srinivasan S. *Journal of the Electrochemical Society* 1997;144:2767–72.
- [24] Cha SW, O'Hayre R, Saito Y, Prinz FB. *Journal of Power Sources* 2004;134:57–71.

Computational Fluid Dynamics Modeling in Development of Renewable Energy Applications

Contributors

H. Alighanbari
Mohammed J. Al-Khawaja
M.R. Amiralaei
J. Barranco
Torsten Berning
Agnimitra Biswas
J. Chang
H. Chen
P.J. Costa Branco
M. Dennis
J.A. Dente
Chaouki Ghenai
R. Gupta
S.M. Hashemi
A. Iranzo
Isam Janajreh
Søren K. Kær
Petra A. López-Jiménez
A.P. Manso
Abdulhamid Marafia
F.F. Marzo
M. Garmendia Mujika
Meng Ni
Madeleine Odgaard
P. Pei
Helena M. Ramos
F. Rosa
Armen Sargsyan
Mohamed Selmi
Y. Yang
K. Zhang

Maher A.R. Sadiq Al-Baghdadi
Editor



International Energy and Environment Foundation

**COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS MODELING
IN DEVELOPMENT OF RENEWABLE ENERGY
APPLICATIONS**

**MAHER A.R. SADIQ AL-BAGHDADI
EDITOR**



International Energy and Environment Foundation

2011

Copyright © 2011 by International Energy and Environment Foundation.

All rights reserved. No part of this book may be reproduced, stored in a retrieval system or transmitted in any form or by any means: electronic, electrostatic, magnetic, tape, mechanical photocopying, recording or otherwise without the written permission of the Publisher.

NOTICE TO THE READER

The Publisher has taken reasonable care in the preparation of this book, but makes no expressed or implied warranty of any kind and assumes no responsibility for any errors or omissions. No liability is assumed for incidental or consequential damages in connection with or arising out of information contained in this book. The Publisher shall not be liable for any special, consequential, or exemplary damages resulting, in whole or in part, from the readers' use of, or reliance upon, this material. Any parts of this book based on government reports are so indicated and copyright is claimed for those parts to the extent applicable to compilations of such works.

Independent verification should be sought for any data, advice or recommendations contained in this book. In addition, no responsibility is assumed by the publisher for any injury and/or damage to persons or property arising from any methods, products, instructions, ideas or otherwise contained in this publication.

This publication is designed to provide accurate and authoritative information with regard to the subject matter covered herein. It is sold with the clear understanding that the Publisher is not engaged in rendering legal or any other professional services. If legal or any other expert assistance is required, the services of a competent person should be sought.

Computational Fluid Dynamics Modeling in Development of Renewable Energy Applications / Maher A.R. Sadiq Al-Baghdadi (editor).

ISBN-13: 978-1466231313

ISBN-10: 1466231319

International Energy and Environment Foundation.
www.IEEFoundation.org

INTERNATIONAL
ENERGY AND ENVIRONMENT
FOUNDATION



*Computational Fluid Dynamics Modeling in
Development of Renewable Energy Applications*

Editor: Maher A.R. Sadiq Al-Baghdadi

www.IEEFoundation.org

CONTENTS

Preface

List of contributors

Chapter 1	A Multi-fluid Model to Simulate Heat and Mass Transfer in a PEM Fuel Cell. <i>Torsten Berning, Madeleine Odgaard, Søren K. Kær</i>	1
Chapter 2	CFD Modeling of a Planar Solid Oxide Fuel Cell (SOFC) for Clean Power Generation. <i>Meng Ni</i>	57
Chapter 3	Hydrodynamics and Hydropower in the New Paradigm for a Sustainable Engineering. <i>Helena M. Ramos, Petra A. López-Jiménez</i>	83
Chapter 4	Opportunities for CFD in Ejector Solar Cooling. <i>M. Dennis</i>	155
Chapter 5	Three Dimensional Modelling of Flow Field Around a Horizontal Axis Wind Turbine (HAWT). <i>Chaouki Ghenai, Armen Sargsyan, Isam Janajreh</i>	179
Chapter 6	Scaling Rules for Hydrodynamics and Heat Transfer in Jetting Fluidized-Bed Biomass Gasifiers. <i>K. Zhang, J. Chang, P. Pei, H. Chen, Y. Yang</i>	195

Chapter 7	Investigation of Low Reynolds Number Unsteady Flow around Airfoils in Pitching, Plunging and Flapping Motions. <i>M.R. Amiralaei, H. Alighanbari, S.M. Hashemi</i>	261
Chapter 8	Justification of Computational Fluid Dynamics Simulation for Flat Plate Solar Energy Collector. <i>Mohamed Selmi, Mohammed J. Al-Khawaja, Abdulhamid Marafia</i>	289
Chapter 9	Comparative Performance of a 3-Bladed Airfoil Chord H-Darrieus & a 3-Bladed Straight Chord H-Darrieus Turbines using CFD. <i>R. Gupta, Agnimitra Biswas</i>	301
Chapter 10	Computational Fluid Dynamics for PEM Fuel Cell Modelling. <i>A. Iranzo, F. Rosa</i>	317
Chapter 11	Analysis of the Performance of PEM Fuel Cells: Tutorial of Major Functional and Constructive Characteristics using CFD Analysis. <i>P.J. Costa Branco, J.A. Dente</i>	349
Chapter 12	Application of Techniques of Computational Fluid Dynamics in the Design of Bipolar Plates for PEM Fuel Cells. <i>A.P. Manso, F.F. Marzo, J. Barranco, M. Garmendia Mujika</i>	377



Chapter Twelve

APPLICATION OF TECHNIQUES OF COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS IN THE DESIGN OF BIPOLAR PLATES FOR PEM FUEL CELLS

A.P. Manso¹, F.F. Marzo², J. Barranco², M. Garmendia Mujika¹

¹ Graphic Expression and Engineering Projects Department, University of the Basque Country, UPV-EHU, Plaza de Europa 1, 20018 San Sebastián, Spain.

² Chemical Engineering and Environment Department, University of the Basque Country, UPV-EHU, Plaza de Europa 1, 20018 San Sebastián, Spain.

Abstract

The first step in the design of a complete fuel cell system is to design the fuel cell itself. When designing a fuel cell, there are different parameters to consider. Some parameters, like the size of the fuel cell, flow channel configuration, and the optimum thickness of electrode, electrolyte and catalyst layers, must be chosen before the fuel cell is even built. Other parameters, like the operating temperature, the fuel and oxidant stoichiometry, the humidification level of the fuel or oxidant streams, and the operating voltage can be tuned (to some extent) after the fuel cell is built. Some simplified mathematical models of fuel cell that are used to explore some of these parameters in fuel cell design can be insufficient. Numerous simplified assumptions are made in these fuel cell models and these simplifications can reduce the accuracy of these models. As opposed to these models, three-dimensional CFD models can address critical issues such as thermal stress distribution, an important consideration related to cell useful life. Such a model accounts for the distribution of fuel consumption throughout the cell; distribution which, in turn, depends upon the complex flow patterns within the cell. For these reasons, CFD simulation is expected to play a major role in the development of lower-cost, higher-efficiency fuel cell designs.

Copyright © 2011 International Energy and Environment Foundation - All rights reserved.

Keywords: PEMFC; Fuel cell; Flow-field design; Simulation; CFD.

1. Introduction

The polymer electrolyte membrane fuel cells (PEMFCs) and hydrogen technologies are considered as one of the most promising alternatives for sustainable energy systems due to their very low or even inexistent carbon monoxide emissions. Nevertheless different obstacles still exist ingenieriles and scientific (as well as economic and socio-political) that must be overcome before these technologies are implanted in a definitive way [1]. For this reason the technology of fuel cells is submitted to an intense development. The combination of more and more optimized new materials, the new architectures of computer systems, the study of more efficient mass transfer processes and the most optimized designs, are thought to improve, in addition to other factors, the efficiency of the fuel cells. There exists an extensive recognition of the use of the fuel cells as efficient and clean energy conversion devices. The fuel cells can be adapted to many different needs, have a high theoretical efficiency and, opposite to the batteries, they can produce electricity in a continued form while the necessary fuel is continuously supplied. When they are fed with hydrogen, the only reaction products are water and heat. In addition to the problems related to the infrastructure necessary for the distributed supply of the hydrogen [2], the principal obstacles for the development and commercialization of the PEMFCs are principally the cost, the durability and the yield of operation [3].

In this sense, the new computational fuel cell engineering technologies (CFCE) can allow systematical simulation, design and optimization of systems of fuel cells, allowing a minor dependency on the prototypes of hardware and reducing this way the development cycles. The CFCE needs a robust integration of models representative of a wide variety of processes and with different time scales in which integrate the fluid dynamic, ionic, electronic and thermal transport with electrochemical reactions.

A PEMFC is fundamentally constituted by seven components. The anode flow channel, the anode gas diffusion layer (GDL_A) and the anode catalysts layer (CL_A), in the anodic part. Separating the anodic part of the cell with the cathodic part there is the polymeric electrolyte membrane (PEM). In the cathodic part are placed the cathodic catalyst layer (CL_C), the cathode gas diffusion layer (GDL_C) and the cathode flow channels. The multi layer structure form by $GDL_A-CL_A-PEM-CL_C-GDL_C$ components is defined as the five-layer MEA (Membrane Electrode Assembling) meanwhile the GDL_A-CL_A and CL_C-GDL_C constitute the fuel cell's electrodes [1]. The correct assembly of these components is of great importance for the final performance of the PEMFC. Figure 1 shows a diagram of operation and the components of a single PEMFC.

The operational principles of the PEMFC are quite simple. The hydrogen feeds in the cell, across the anode flow channel, spreads in GDL_A and reaches the catalyst layer CL_A , where it oxidizes and liberates electrons and protons. The protons that are generated in the plate behave across the polymer electrolyte membrane (PEM) towards the cathode. As the membrane is not an electronic driver, the electrons liberated in the anodic catalyst layer, flow across the anodic plate to an external circuit, generating useful electrical power. At the same time oxygen (or air) feeds across the cathode flow channel and spreads in GDL_C . The oxygen reaches the cathodic catalyst layer CL_C , where it reacts with the protons and electrons to generate water. The full mixture reaction is:



Is split into the anode and cathode half-reactions, respectively the hydrogen oxidation and the oxygen reduction reaction:

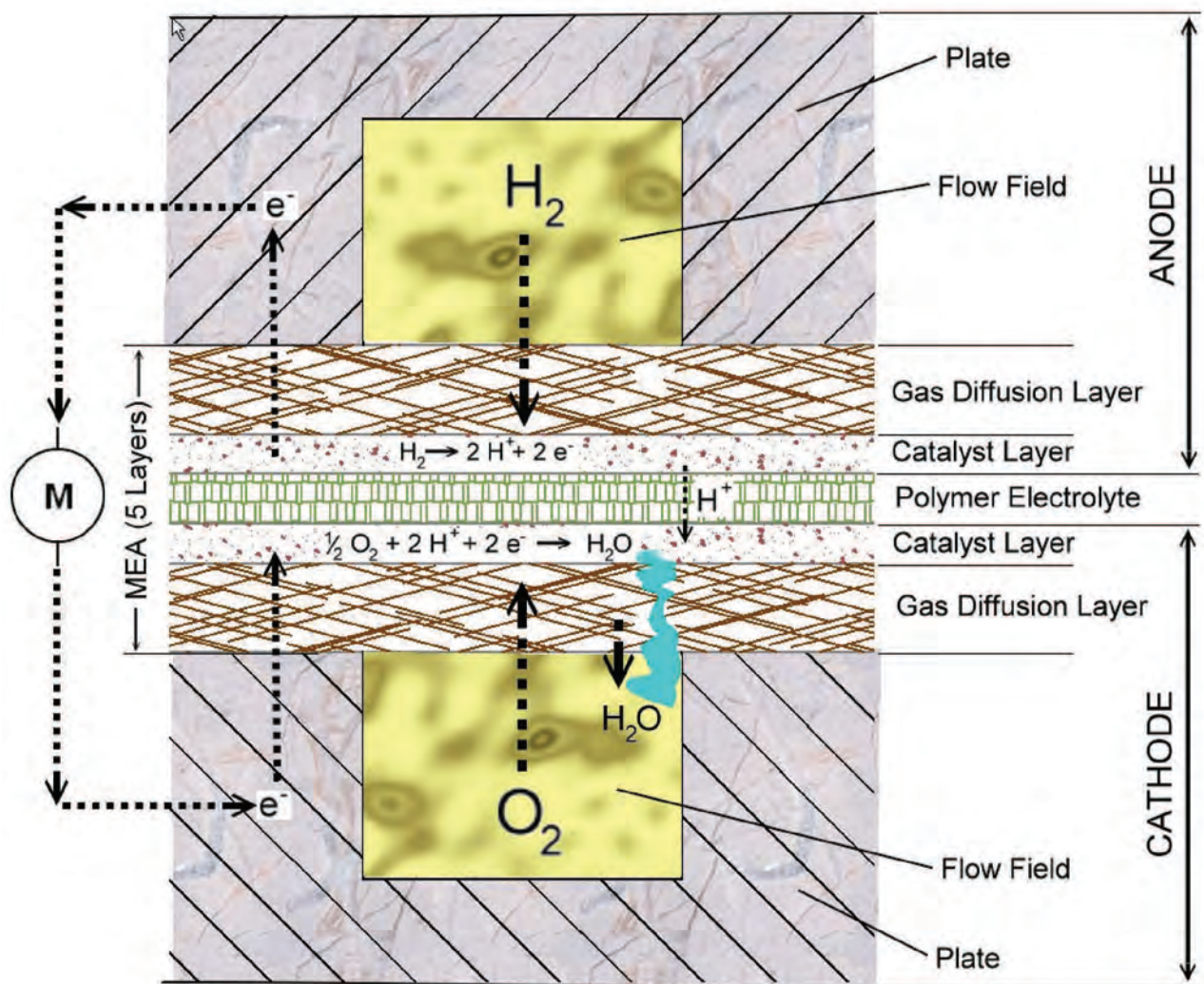
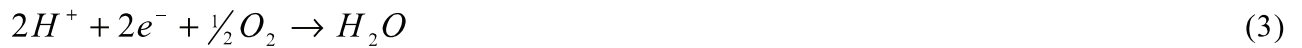


Figure 1. Diagram of operation and the components of a single PEM fuel cell.

The enhance of PEMFCs performance can be reached increasing so much the transport and/or reaction rates, as well as the relation surface/volume of the interfacial areas where the reaction/transport takes place. Thus, it is necessary to identify all the possible limitations and their origins. The In-situ measurements carried out to detect these anomalies are very difficult due to the reduced space where the electrochemical reactions

take place in the PEMFC and the complexity in including the different transport phenomena due to its transitory nature. The mathematical models for PEMFCs based on fundamental physical-chemical processes, together with the experimental observation are, therefore, a fundamental tool for understanding the global functioning of a fuel cell.

Connecting the PEMFCs mathematical models with computational fluid dynamic modern methods (CFD) creates a powerful hardware of CFCE that can provide the necessary way to reduce the time and development costs in the PEMFCs design. Thus, it could be possible to have, on the one side, the necessary capacities for the numerical discretization and solution of conservation equations, and on the other hand, a CFCE hardware associated with specific transport processes in PEMFCs, including multiphase flows in porous media, electrochemical reactions and transport of loaded species and water in the polymeric membrane. These processes, properly connected, constitute the bases for the success of solving the design, management of the heat and water generated problems, as well as in the progress of the performance and cost reduction in PEMFCs [4, 5].

2. Modelling

The modelling process is a very important phase in the design and development of fuel cells. Therefore, modelling is initiated early into a fuel cell development cycle [6]. Figure 2 shows a diagram of a typical procedure in fuel cell development, where the process begins with a set of specifications. These specifications include power and energy requirements, environmental operating conditions, size and volume limitations, safety specifications, and others. Along with the specifications, knowledge of materials, processes, and material interactions is necessary to properly construct a fuel cell stack. Once several designs are down selected, modelling of the designs is performed to determine which is better suited to the specifications. The modelling helps the designer in the next phase in the selection of designs to manufacture and test. The tests performed on the final designs can either result in a final prototype or result in an iteration of existing designs for improvement. Reliable diagnostics are needed not only to find out what is wrong with the existing design so that it can be improved, but also to calibrate and verify the models and assumptions used in developing them. This design iteration loop can be quite lengthy. On the other hand, improvements in modelling capability can help the designer find and improve on existing designs that satisfy stringent requirements. Therefore, modelling has a critical role in the fuel cell design and development process.

The modelling will be an effective tool if the model is able to predict the performance of fuel cells in a wide range of operating conditions with sufficient accuracy.

It should be mentioned here that accuracy does not necessarily mean that a model should accurately predict the absolute value of all the physical phenomena being modelled at any operation point. But a model should accurately predict the relative values or the trends. Accuracy can be attributed to using the correct assumptions, using the correct properties and other numerical input parameters, predicting the correct physical phenomena by using the correct governing equations, and being able to validate the model's results with the experimental data. However, enhancing model robustness and accuracy often reduces the computational efficiency. Thus, the designer must find a solution that maximizes the robustness and accuracy of the model and computational efficiency.

In general, physical phenomena occurring within a PEM fuel cell can be represented by the solution of conservation equations for mass, momentum, energy, species, and current transport. Also, some empirical equations can be used in modelling, when there are no equations that describe the real physical phenomena. The models are as good as the assumptions used. Assumptions are needed to simplify the model. It is important to understand the assumptions in order to understand the model's limitations and to accurately interpret its results. Some common assumptions used in modelling of fuel cells can be:

- Ideal gas properties
- Ideal gas mixtures
- Incompressible flow
- Laminar flow
- Isotropic and homogeneous membrane and electrode structures
- Negligible ohmic potential drop in solid components

One-dimensional and two-dimensional models may be very useful and may provide abundance of information with sufficient accuracy if the boundary conditions are properly selected. Three-dimensional models are more comprehensive, particularly if the thermal effects are included; however, these models may be very complex and may require a longer computation time. When a fuel cell designer decides on a solution procedure or software, care must be taken in using the model properly. Strong emphasis needs to be placed on properly validating the model before usage. Comparison with numerical results obtained elsewhere is acceptable, but it is highly recommended to validate model predictions to experimental data as close as possible to the designer's system of interest.

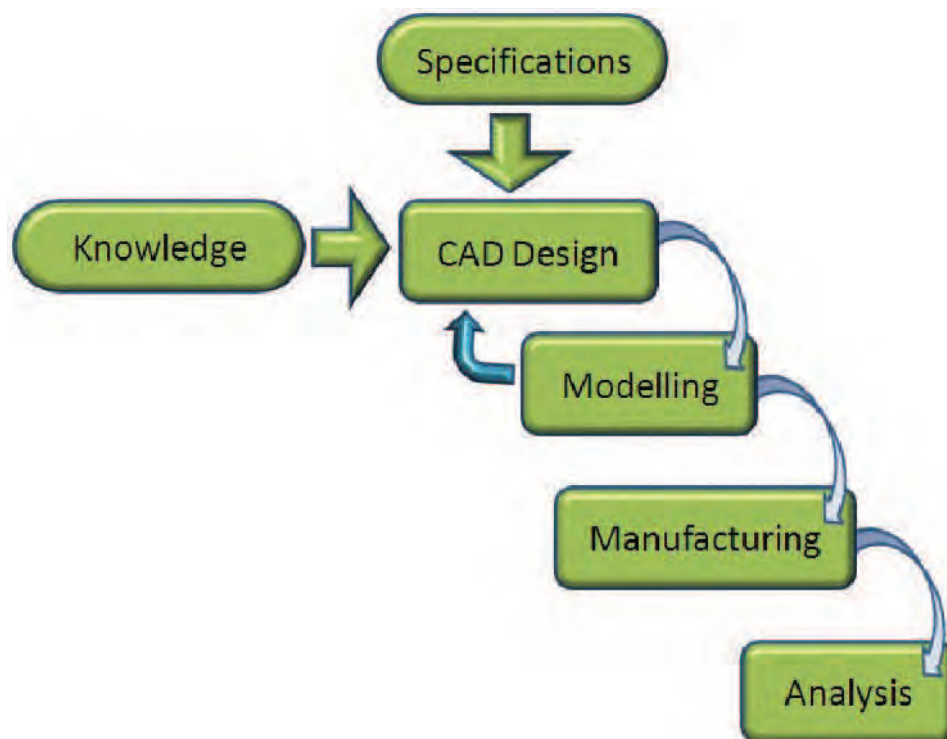


Figure 2. Diagram of procedure in fuel cell development.

2.1 Computational models

Computational models are useful for conducting tests at various operating conditions and involving various materials in a search for optimal design performance. Computational models enable preliminary investigations without the need to construct and operate demonstration-scale equipment, which is both costly and time-consuming. They enable researchers to predict cell performance as multiple operating conditions are changed, such as temperature, pressure, and gas composition [7]. A fuel cell model may fall into one of three categories: analytic, semi-empirical, or mechanistic (theoretical) [8].

2.1.1 Analytical models

Many simplifying assumptions were made concerning internal processes within the cell in order to develop an approximate analytical voltage versus current density relationship [9, 10]. These models are only approximate and do not give an accurate idea of transport processes occurring within the cell. They are limited to predicting voltage losses and water management requirements for simple designs. They may be useful if quick calculations are required for simple systems.

2.1.2 Semi-empirical models

Semi-empirical modelling combines theoretically derived differential and algebraic equations with empirically determined relationships. Empirical relationships are employed when the physical phenomena are difficult to model or the theory governing the phenomena is not well understood [11-13].

2.1.3 Mechanistic models

In mechanistic modelling, differential and algebraic equations are derived based on the physics and electro-chemistry governing the phenomena internal to the cell. These equations are solved using some sort of computational method [14, 15].

Mechanistic modelling has been utilized to study a wide range of phenomena including polarization effects (activation, ohmic and concentration overpotentials), water management, thermal management and flow field geometry. One of the advantages of computational modelling over experimentation to study the performance of a fuel cell is the ability to evaluate innovative designs. One area where this is evident is in the consideration of flow field geometry.

3. Design of flow-fields in bipolar plates for PEM fuel cells

PEMFC performance depends on many factors, including the operating conditions, transport phenomena inside the cell, kinetics of the electrochemical reaction, MEA assembly and flow channel geometry [16]. PEMFC flow channels, used to supply the fuel (hydrogen) to the anode, and the oxygen to the cathode, are integrated in the bipolar plates. These are one of the key components for a fuel cell, as they perform different essential functions for the system to operate correctly: acting as a mechanical support for the stack, keeping the different reactants apart, distributing the reactants over the catalysing surface area, driving the electrical current that is generated or managing the water and heat produced inside the cell. Some of these functions are better associated with the material's

physical-chemical properties. Others, on the other hand, are intricately linked to flow channel geometry [17].

An appropriate design for PEMFC flow channels will strengthen the reactive transport velocities in the channel itself and in the GDL before reaching the catalytic layer, where the reaction takes place. It will also be beneficial in terms of managing the cathode's water, so that it is eliminated properly. In addition, uniform distribution of the gas in the flow channel will in turn supply a uniform current density throughout the reactive area, therefore giving a uniform temperature distribution that will cause less mechanical tension in the MEA, prolonging the PEMFC's useful life.

3.1 State of the art

A variety of studies have been done on the impact of the flow channels' different geometric variables on different operating aspects of the PEMFC. Yoon et al. analysed the effect of different configurations of rib and channel on the performance of a PEMFC [18]. Ferng et al. analysed the effect of different flow-field patterns in a 25 cm² single-PEMFC [19]. Shimpalee et al. analysed a 3D model with flow channels in 480 cm² coil [20] and another 200 cm² model with a different number of channels and lengths [21]. Shimpalee and Van Zee [22] ran a numerical study on how flow channels with different channel/rib cross sections (space between channels) affect the performance and species distribution in different PEMFC operating systems. D.H. Jean et al. [23] analysed different flow channel configurations (single channel, double channel, single cyclical channel and single symmetrical channels) and their influence on how the PEMFC operates. Sungho Lee et al. [24] studied the effect of different configurations of geometric parameters on how a PEMFC operates with a single right channel configuration. Recent studies analyse the influence of cross-sectional configuration of the flow channel [25] and the effect of the relative position of the anode and cathode flows [26, 27].

Moreover, some researchers observed that with an innovating design for new flow channels, it is also possible to increase the flow of gas by convection under the ribs of the cell [28-30], thereby making it possible to both transport the mass to the electrode and eliminate the water due to flooding problems. Therefore, strengthening the gases' convective processes through the Gas Diffusion Layer by means of optimising the flow channel is also an effective way of reducing flooding in the cathode, increasing mass transport and therefore improving performance and PEMFC operation stability.

3.2 Case study

An example of the application of CFD techniques in the design of bipolar plates can be shown in a project initiated in 2008 at the University of the Basque Country. The objective of this project was to increase the overall performance of the PEMFC by presenting an optima geometry of the flow channels. This project consisted of four phases as shown in Figure 3.

3.2.1 Mathematical model

It is necessary to note that fuel cell with PEM represents complex systems which characteristics are determined by parameters of each component. In this connection, the

most practical value is represented with the mathematical models in which processes in components of the systems are considered combined.

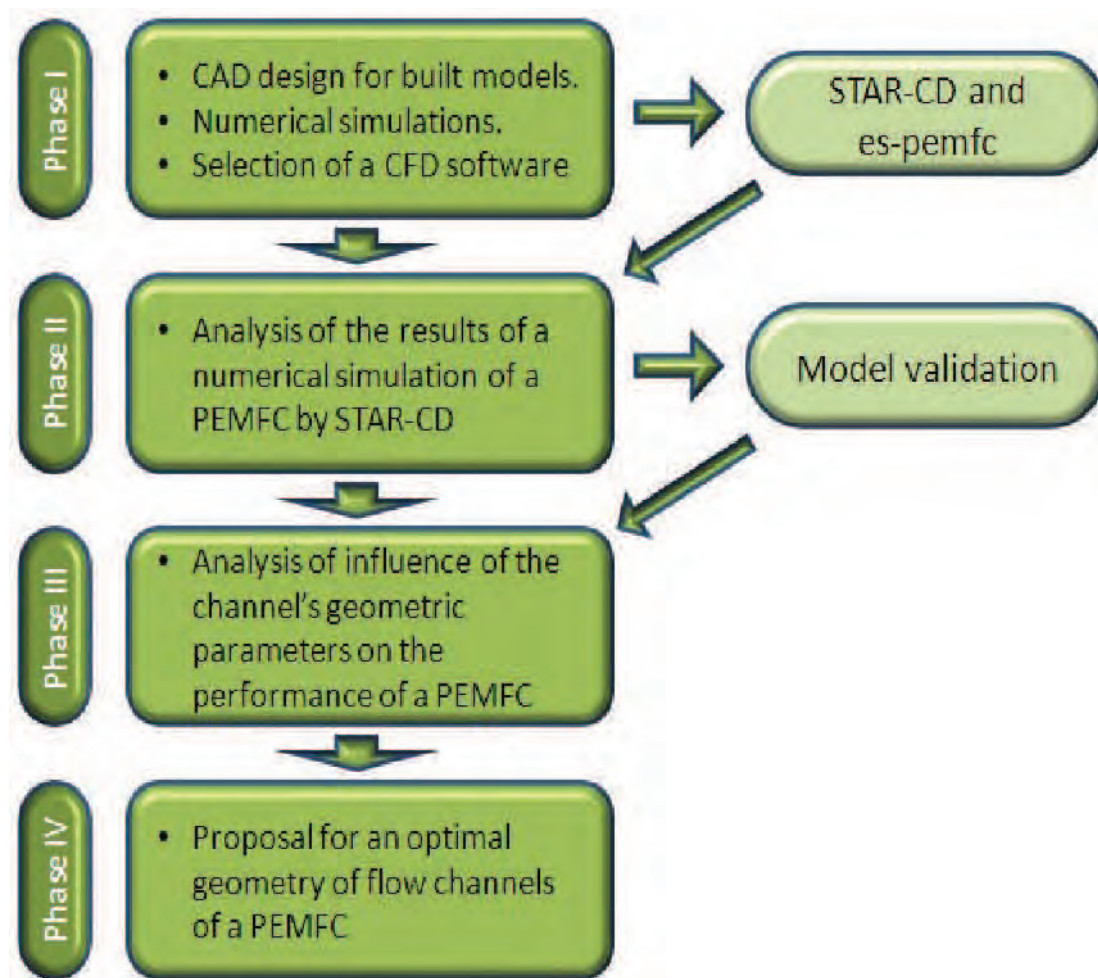


Figure 3. Phases developed in the project.

In the design process for PEMFC bipolar plates that will be shown all along the text as an example of mathematical model, the commercial software STAR-CD (version 3.26) [31] together with an expert module for PEMFC (es-pemf version 2.2) [32] was used. The three-dimensional CFD model used resolves a representative model of the PEMFC that includes the mass conservation equations, Navier-Stokes equations, species transport equations, the energy equation, and the model to change the water phase. The model assumes a steady state, ideal gas properties, and homogeneous two-phase flows. These equations are developed and validated in the works by S. Shimpalee et al. [20, 22, 33, 34]. The water phase change model takes into account the presence of a film of water on the surface of the MEA for the anode and cathode. When the water's local activity exceeds the unit, there is liquid in the control volume and a film of liquid water forms. The thickness of this film of liquid depends on the velocity of condensation/evaporation and water production by electrochemical reaction. H_2 and O_2 solubility is included in the model using Henry's Law

to account for the diffusion of reactive gases towards the MEA surface through the film of surface water. Therefore, the local current drops as the water is condensed. Tables 1, 2 and 3 present the governing equations, the source terms for these governing equations and constitutive equations for modelling the electrochemical effects.

A control volume technique was used based on this commercial program, STAR-CD along with the expert module for PEMFC (es-pemf) to resolve the mathematical model based on coupling the equations for fluid-dynamics (CFD) and specific transport processes and electrochemical reactions of the PEMFC. This software requires source terms to be specified for the species transport and heat generation equations due to electrical losses [22, 31-33].

There are also additional sub-routines in the standard es-pemfc module to calculate the overpotential, permeability and effective diffusivity of gas. Figure 4 schematically illustrates the typical computational domain for CFD-based PEMFC simulation, which consists of two identical flow-field patterns separated by GDLs and a MEA. This figure shows the various components of the fuel cell. At the anode, are the anode flow channels and the anode gas diffusion layer (GDL_A) that includes the anode catalysts layer. Separating the anodic part of the cell with the cathodic part there is the polymeric electrolyte membrane (PEM). At the cathode are the cathodic gas diffusion layer (GDL_C) that includes the cathodic catalyst layer, and the cathode flow channels.

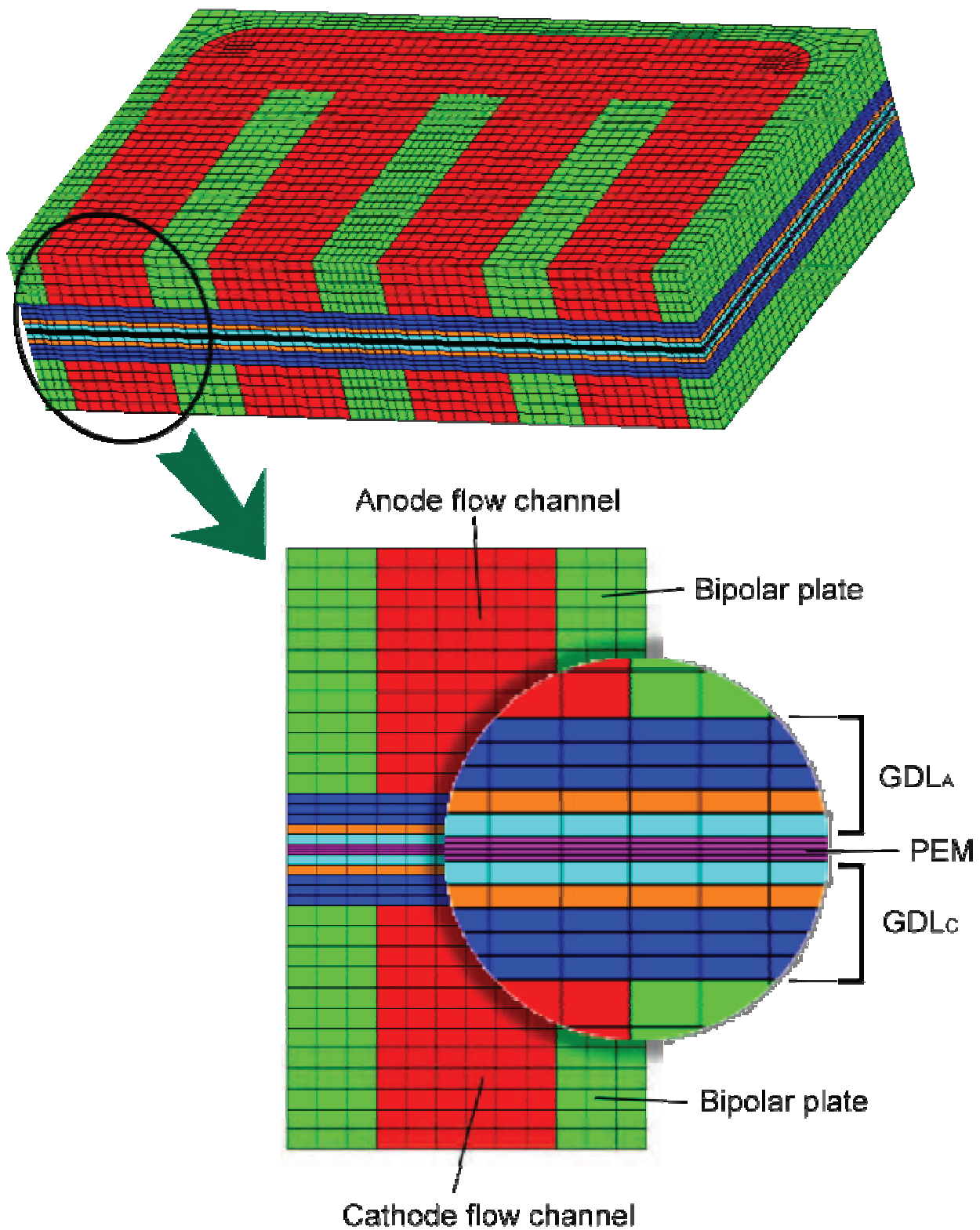


Figure 4. Typical computational domain for PEMFC simulation.

3.2.2 Model equations

Table 1. Governing equations [22, 32].

Governing equations	Mathematical expressions
Conservation of mass	$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho v) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho w) = S_m \quad (4)$
Momentum transport	$u \frac{\partial}{\partial x} (\rho u) + v \frac{\partial}{\partial y} (\rho u) + w \frac{\partial}{\partial z} (\rho u) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial z} \right) + S_{px} \quad (5)$
	$u \frac{\partial}{\partial x} (\rho v) + v \frac{\partial}{\partial y} (\rho v) + w \frac{\partial}{\partial z} (\rho v) = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial z} \right) + S_{py} \quad (6)$
	$u \frac{\partial}{\partial x} (\rho w) + v \frac{\partial}{\partial y} (\rho w) + w \frac{\partial}{\partial z} (\rho w) = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial z} \right) + S_{pz} \quad (7)$
H2 transport (anode side)	$\frac{\partial}{\partial t} (\rho m_{H_2}) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho m_{H_2}) + v \frac{\partial}{\partial y} (\rho m_{H_2}) + w \frac{\partial}{\partial z} (\rho m_{H_2}) = \frac{\partial}{\partial x} (J_{x,H_2}) + \frac{\partial}{\partial y} (J_{y,H_2}) + \frac{\partial}{\partial z} (J_{z,H_2}) + S_{H_2} \quad (8)$
Water vapor transport	$\frac{\partial}{\partial t} (\rho m_{wv}) + u \frac{\partial}{\partial x} (\rho m_{wv}) + v \frac{\partial}{\partial y} (\rho m_{wv}) + w \frac{\partial}{\partial z} (\rho m_{wv}) = \frac{\partial}{\partial x} (J_{x,wv}) + \frac{\partial}{\partial y} (J_{y,wv}) + \frac{\partial}{\partial z} (J_{z,wv}) + S_{wv,p} + S_{a,wv,e} + S_{c,wv,e} \quad (9)$
Liquid water transport	$\frac{\partial}{\partial t} (\rho m_{wl}) + u \frac{\partial}{\partial x} (\rho m_{wl}) + v \frac{\partial}{\partial y} (\rho m_{wl}) + w \frac{\partial}{\partial z} (\rho m_{wl}) = \frac{\partial}{\partial x} (J_{x,wl}) + \frac{\partial}{\partial y} (J_{y,wl}) + \frac{\partial}{\partial z} (J_{z,wl}) + S_{wl,p} \quad (10)$
O2 transport (cathode side)	$\frac{\partial}{\partial t} (\rho m_{O_2}) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho m_{O_2}) + v \frac{\partial}{\partial y} (\rho m_{O_2}) + w \frac{\partial}{\partial z} (\rho m_{O_2}) = \frac{\partial}{\partial x} (J_{x,O_2}) + \frac{\partial}{\partial y} (J_{y,O_2}) + \frac{\partial}{\partial z} (J_{z,O_2}) + S_{O_2} \quad (11)$
Energy equation	$\frac{\partial}{\partial t} (\rho h) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u h) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho v h) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho w h) = \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) + S_{h,p} + S_{h,e} \quad (12)$
Electron transport	$\int_S D_\phi \nabla \phi \cdot dS + \int_V S_\phi dV \quad (13)$

Table 2. Source terms for governing equations of Table 1 (GDL_A: Anode Gas Diffusion Layer, GDL_C: Cathode Gas Diffusion Layer, PEM: Polymer Electrolyte Membrane) [22, 32].

Description	Non-zero volumetric source terms		Location	
Conservation of mass	$S_m = S_{H_2} + S_{wv_p} + S_{wl_p} + S_{awv_e}$	(14)	GDL _A /PEM interface	
	$S_m = S_{O_2} + S_{wr_p} + S_{wl_p} + S_{awv_e}$	(15)	GDL _C /PEM interface	
Momentum transport	$S_{px} = -\frac{\mu u}{\beta_x} S_{py} = -\frac{\mu v}{\beta_y} S_{pz} = -\frac{\mu w}{\beta_z}$	(16)	GDL _A GDL _C	
H2 transport (anode side)	$S_{H_2} = -\frac{I(x,y)}{2F} M_{H_2} A_{cv}$	(17)	GDL _A /PEM interface	
Water vapor transport	$S_{wv_p} = \frac{M_{H_2O} \sum_{no\,fv}^{mass\,no\,fv} M_{no\,fv} \left[\frac{p_{wv}^{sat} - p_{wv}}{p} \right] r}{\left(1 - \frac{p_{wv}^{sat}}{p} \right)}$	(18)	Fluid Entire Domain	
	$S_{awv_e} = -\frac{\alpha(x,y)}{F} I(x,y) M_{H_2O} A_{cv}$	(19)	GDL _A /PEM interface	
	$S_{cwv_e} = -\frac{1+2\alpha(x,y)}{2F} I(x,y) M_{H_2O} A_{cv}$	(20)	GDL _C /PEM interface	
Liquid water transport	$S_{wl_p} = -S_{wv_p}$	(21)	Entire Fluid Domain	
O2 transport (cathode side)	$S_{O_2} = -\frac{I(x,y)}{4F} M_{O_2} A_{cv}$	(22)	GDL _C /PEM interface	
Energy equation	Heat source by energy losses	$S_{h_e} = h_{rxn} \left[\frac{1}{2F} I(x,y) A_{cv} \right]_{z=z_2} - (I(x,y) V_{cell} A_{cv})_{z=z_2}$	(23)	GDL _C /PEM interface
	Heat source by phase change	$S_{h_p} = S_{wl_p} h_{fg}$	(24)	Entire Fluid Domain
Electron transport	$S_\Phi =$ source term of phase potential ($A\ m^{-3}$)			
	at anode catalyst layer: $S_\Phi = -\nabla \cdot \mathbf{i}$	(25)		
	at anode catalyst layer: $S_\Phi = \nabla \cdot \mathbf{i}$	(26)		
\mathbf{i} = current density ($A\ m^{-2}$)				

Table 3. Constitutive equations for modelling electrochemical effects [22, 32].

Description	Mathematical expressions
Diffusion mass flux of species n in ξ direction	$J_{\xi,n} = -\rho D_{\xi,n} \frac{\partial m_{K,n}}{\partial \xi}$ (27)
Binary diffusion coefficient	$\frac{PD_{n,i}(x,y)}{(P_{e-n}P_{e-i})^{1/2}(T_{e-n}T_{e-i})^{5/12}\left(\frac{1}{M_n} + \frac{1}{M_i}\right)^{1/2}} = 3.64 \times 10^{-8} \left(\frac{T(x,y)}{\sqrt{T_{e-n}T_{e-i}}}\right)^{2.334}$ (28)
Net water transfer coefficient per proton	$x(x,y) = n_d(x,y) - \frac{F}{I(x,y)} D_w(x,y) \left(\frac{C_{we}(x,y) - C_{wb}(x,y)}{\tau_m}\right)$ (29)
Water content in the membrane	$\lambda = B1 + B2a_K + B3a_K^2 + B4a_K^3 + B5a_K^4 \quad 0 < a_K \leq 1$ (30)
	$\lambda = B6 + B7(a_K - 1) \quad 1 < a_K \leq 3$ (31)
	$a_K = a_d$ as default $B1 = 0.043, B2 = 17.81, B3 = -39.85, B4 = 36.0, B5 = 0.0, B6 = 14.0, B7 = 1.4$
Electro-osmotic drag coefficient	$n_d = E3\lambda^3 + E2\lambda^2 + E1\lambda + E4$ (32) $E1 = 0.05, E2 = 0.0029, E3 = 0.0, E4 = -3.4 \times 10^{-19}$
Water diffusion coefficient	$D_w = D_\lambda \exp\left(G0\left(\frac{1}{\sigma_d} - \frac{1}{\tau(x,y)}\right)\right)$ (33)
	$D_\lambda = G1 \quad \lambda < L2$ (34)
	$D_\lambda = G1(1 + L2(\lambda - L2)) \quad L2 \leq \lambda \leq L3$ (35)
	$D_\lambda = G2(L3 - L1(\lambda - L3)) \quad L3 < \lambda < L4$ (36)
	$D_\lambda = G3 \quad \lambda \geq L4$ (37)
	$G0 = 2416 \text{ K}, G1 = 1 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}, G2 = 1 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s},$ $G3 = 1.25 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}, G4 = 303 \text{ K}$ $L1 = 1.67, L2 = 2.0, L3 = 3.0, L4 = 4.5$
Water vapor concentration for anode and cathode surfaces of the MEA	$C_{wK}(x,y) = \frac{\rho_{m,dry}}{M_{m,dry}} \lambda$ (38)
Water activity	$a_K = \frac{X_{w,K} P(x,y)}{P_{w,K}^{sat}}$ (39)
Local current density	$I(x,y) = \frac{\sigma_m(x,y)}{\tau_m} (V_{oc} - V_{cell} - \eta(x,y))$ (40)

Description	Mathematical expressions
Local membrane conductivity	$\sigma_m(x,y) = \left(H1 \frac{M_{m,dry}}{\rho_{m,dry}} C_{wa2}(x,y) - H2 \right) \exp \left(\left(H3 \left(\frac{1}{H4} - \frac{1}{T(x,y)} \right) \right) + H0 \right) \quad (41)$ <p>H1 = 0.514 S/m, H2 = 0.326 S/m, H3 = 1268 K, H4 = 303 K, H0 = 0 S/m</p>
Local overpotential	$\eta(x,y) = \frac{RT(x,y,z_2)}{\alpha_c F} \left(\ln \left[\frac{I(x,y)P(x,y,z_2)}{I_{0,O_2} P_{O_2}(x,y,z_2)} \right] \right) + \frac{RT(x,y,z_2)}{\alpha_a F} \left(\ln \left[\frac{I(x,y)P(x,y,z_2)}{I_{0,H_2} P_{H_2}(x,y,z_2)} \right] \right) \quad (42)$
Water film thickness	$t_{f,k} = \frac{m_{wvl}(\Sigma mass_n)}{\rho_{wvl} Area_{ev}} \quad (43)$
Gas solubility	$P_{O_2}(x,y,z_2) = X_{O_2}(x,y,z_2)P(x,y,z_2) \quad (44)$
	$-\frac{I(x,y)}{4F} M_{O_2} = \rho_{O_2} D_{O_2,l} \left[\frac{X_{O_2}(x,y,z_2 - t_{f,c})P(x,y,z_2 - t_{f,c})H_{O_2,l}^{-1} - X_{O_2}(x,y,z_2)}{t_{f,c}} \right] \quad (45)$
	$P_{H_2}(x,y,z_2) = X_{H_2}(x,y,z_2)P(x,y,z_2) \quad (46)$
	$-\frac{I(x,y)}{2F} M_{H_2} = \rho_{H_2} D_{H_2,l} \left[\frac{X_{H_2}(x,y,z_2 - t_{f,a})P(x,y,z_2 - t_{f,a})H_{H_2,l}^{-1} - X_{H_2}(x,y,z_2)}{t_{f,a}} \right] \quad (47)$

4. Results

In the first phase, an optimal procedure for the numerical simulation of different models generated by CAD applications was analyzed [35]. In addition, several CFD software were analysed to select the most appropriate for the study of PEMFC. Figure 5 shows different stages of the proceeding. In these firsts tests only fluid dynamics aspects of systems were considered.

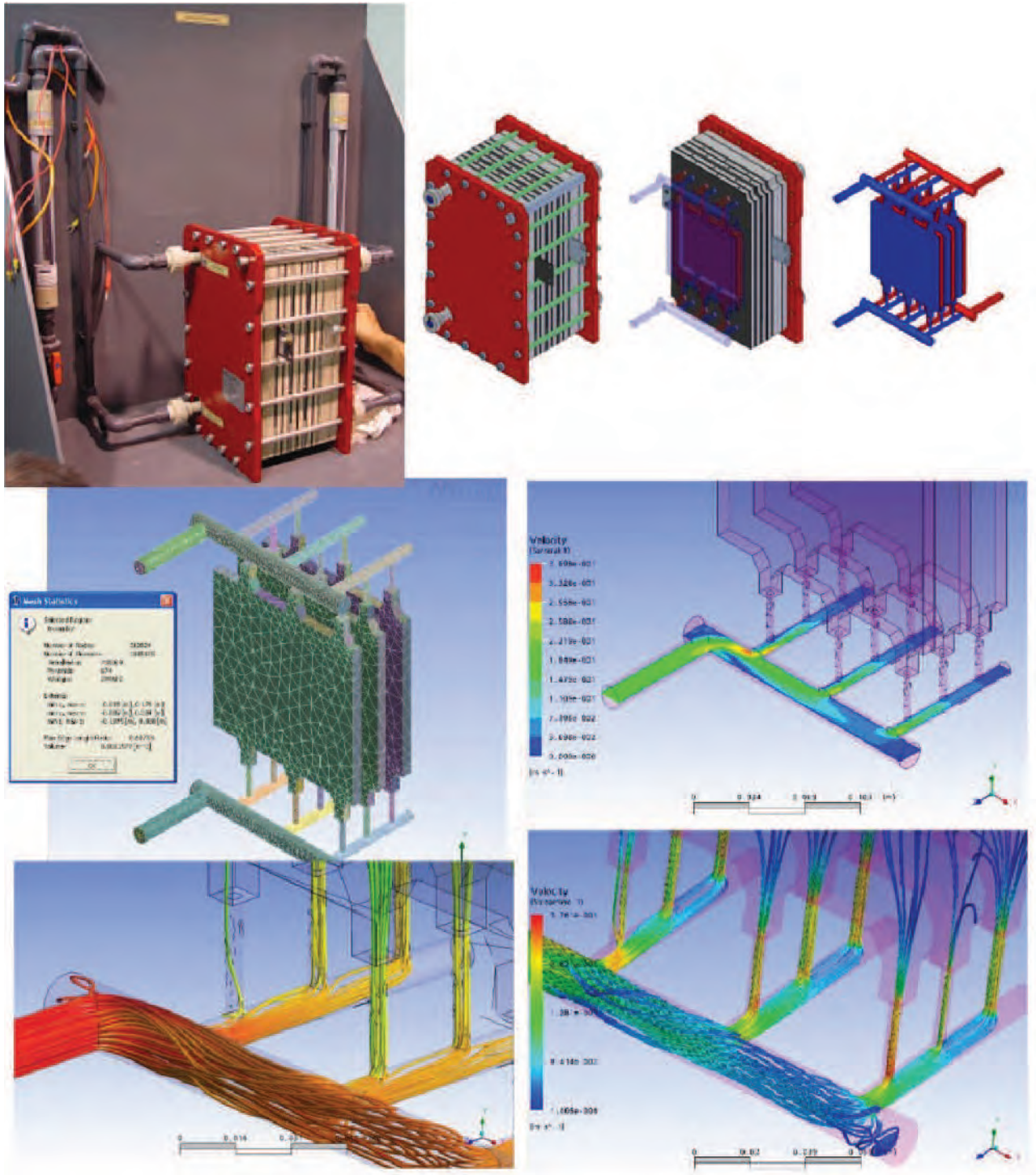


Figure 5. Different stages of the proceeding for the analysis and numerical simulation of models already built.

The second phase was devoted to analyze the selected three dimensional model to resolve a representative model of a PEMFC. This model should include the equations of fluid dynamics as well as those associated with the electrochemical processes that occur inside the PEMFC. F. F. Marzo [36] and A. P. Manso [37] developed a three-dimensional numerical simulation of the performance of a polymer electrolyte membrane fuel cell (PEMFC) combining computational fluid dynamics (STAR-CD version 3.26, ADAPCO) with an expert module (es-pemfc version 2.2, ADAPCO) which comprises a computational fluid dynamic solver, specific mass transfer process and electrochemical performance in PEMFCs.

In these works the geometric design, meshing and numerical simulation processes of the PEMFC in steady operating conditions were described. In accordance with these results, the most relevant aspects affecting the PEMFC design were discussed in order to optimize the performance of the cell. Thus, in practice, the design of a PEMFC is often reduced to designing the bipolar plates which, in turn, involves the flow channels. Figures 6 and 7 show some of the most representative results obtained.

Thus, in the third phase of this project the influence of the channel cross-section aspect ratio (defined as the ratio height/width) on the performance of a PEM fuel cell with serpentine flow field (SFF) design was investigated [38].

The local current densities, velocity distributions, liquid water concentration in the membrane, hydrogen and oxygen concentrations and temperature were analyzed in the PEM fuel cell for 10 different aspect ratios, varying between 0.07 and 15, to understand the channel cross-section aspect ratio effect. The area of the channel cross-section ($1,06 \text{ mm}^2$) and the total effective reactive area of the PEM fuel cell (256 mm^2) were maintained constant in all cases. The obtained results show that at low operating voltages the cell performance is independent of the channel cross-section aspect ratio. At high operating voltages, where the influence of mass transport velocity is predominant, as the channel cross-section aspect ratio increases the PEM fuel cell performance is improved.

The models with high aspect ratio show, in general, more uniform current distributions, with the higher maximum and minimum intensity values, temperature distributions with smaller gradients and a higher contain of water in the membrane, which allows obtaining a higher performance. From these models the 10/06 and 12/05 aspect ratio present the best combination of variables, as shown by their polarization curves. The results obtained in this research may be helpful to develop universal heuristics and dimensionless number correlations in the design of flow-fields and stacks. Figure 8 shows some of the most representative results obtained.

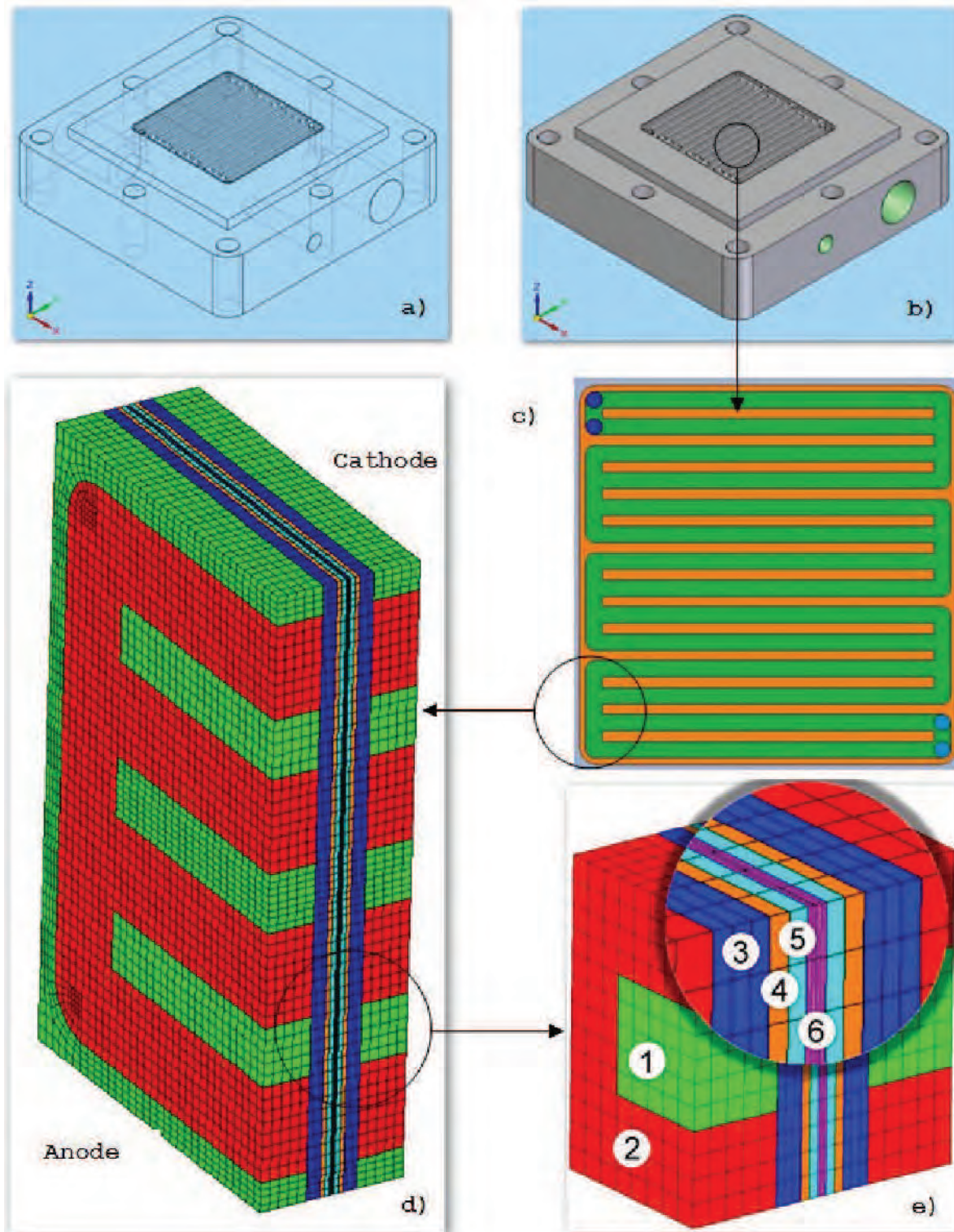


Figure 6. (a) and (b): Hydrogen PEMFC current collectors and graphite bipolar plates with the flow channels. The same geometry for both anode and cathode are shown. (c) Detail of the PEMFC flow channels. (d) Geometry surface mesh used for CFD calculation, (e): surface mesh components: (1) solid domain; (2) anodic and cathodic flow channels (fluid domain); (3, 4, 5) anodic and cathodic diffusion layer (GDL, Gas diffusion Layer); (6) polymer electrolyte membrane.

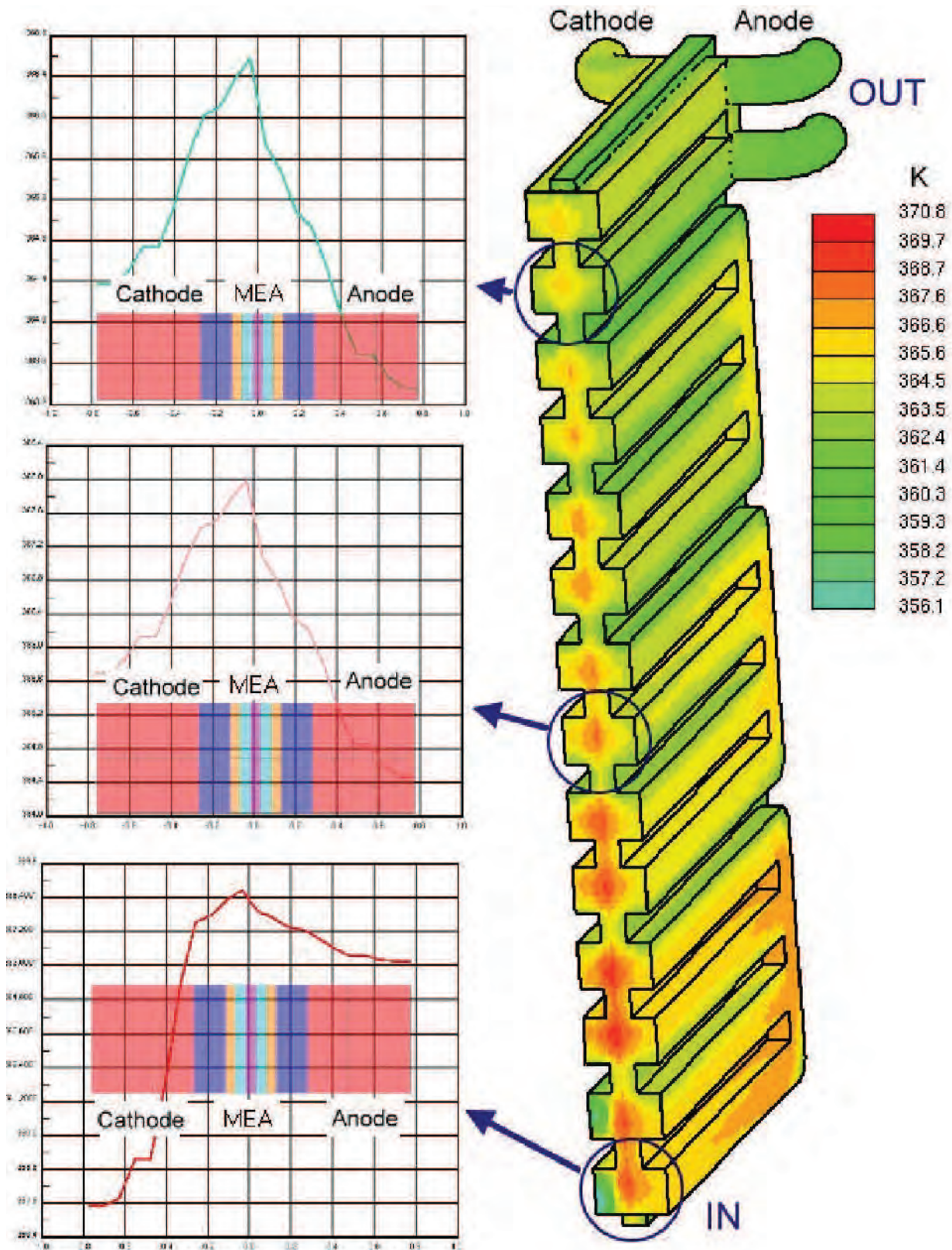


Figure 7. Temperature distribution in the PEMFC (in the plane of symmetry of the single-PEMFC) and temperature profiles in cross sections of various locations of the channel.

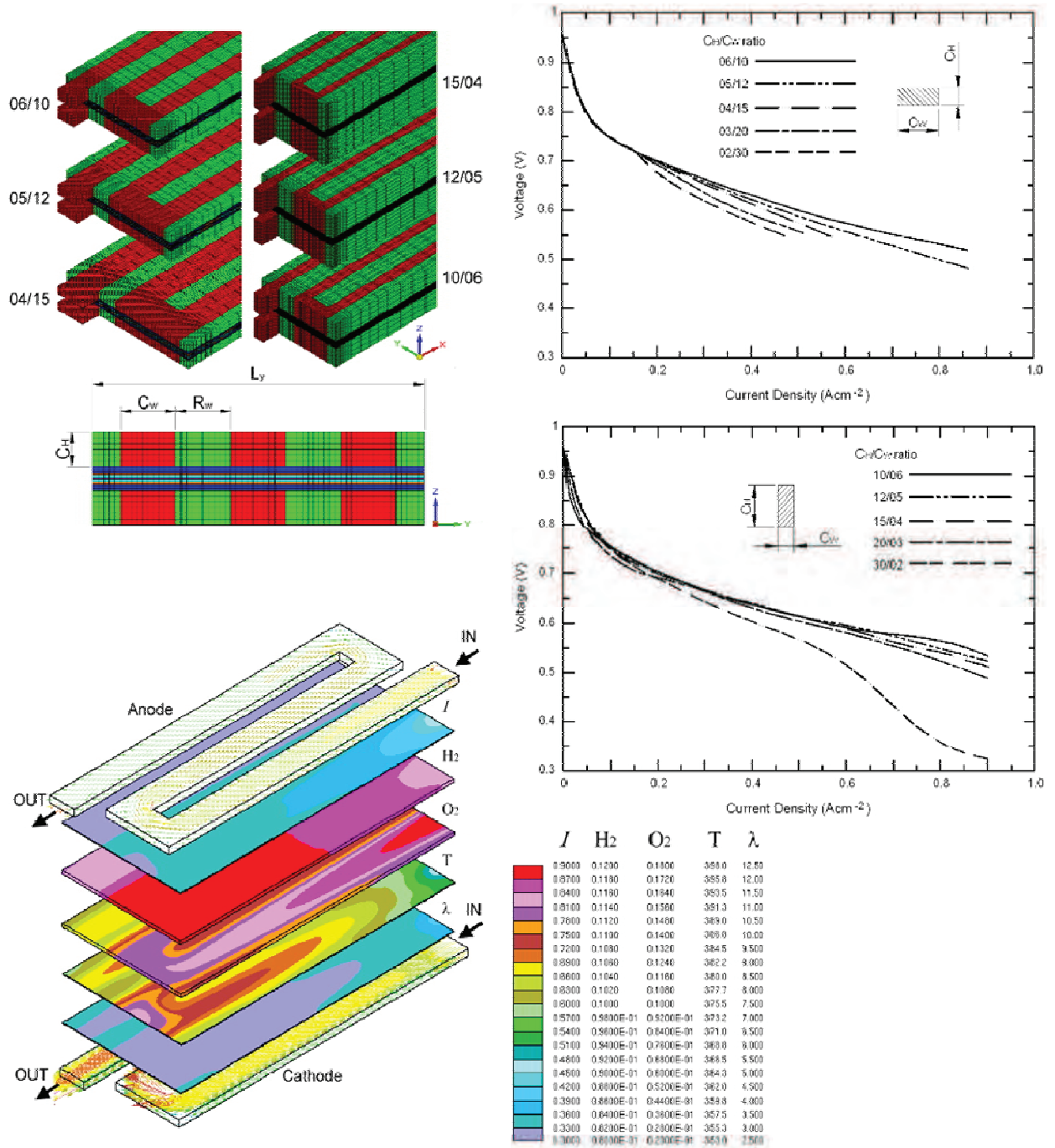


Figure 8. Some of the most representative results obtained: geometric configuration of the models analysed, polarization curves and distributions of different variables.

At this point, it is ready to tackle the four phase of this project: The proposal of an optimum geometry of the flow channels for a PEM fuel cell system, in order to improve its overall performance. A preliminary three-dimensional geometric model of flow channels was developed, including geometric features based on earlier studies. Iterative simulation procedure using CFD techniques and subsequent analysis of the results obtained allowed

the adjustment of the geometry of three-dimensional model to obtain an optimal model. Figure 9 shows different stages of this procedure.

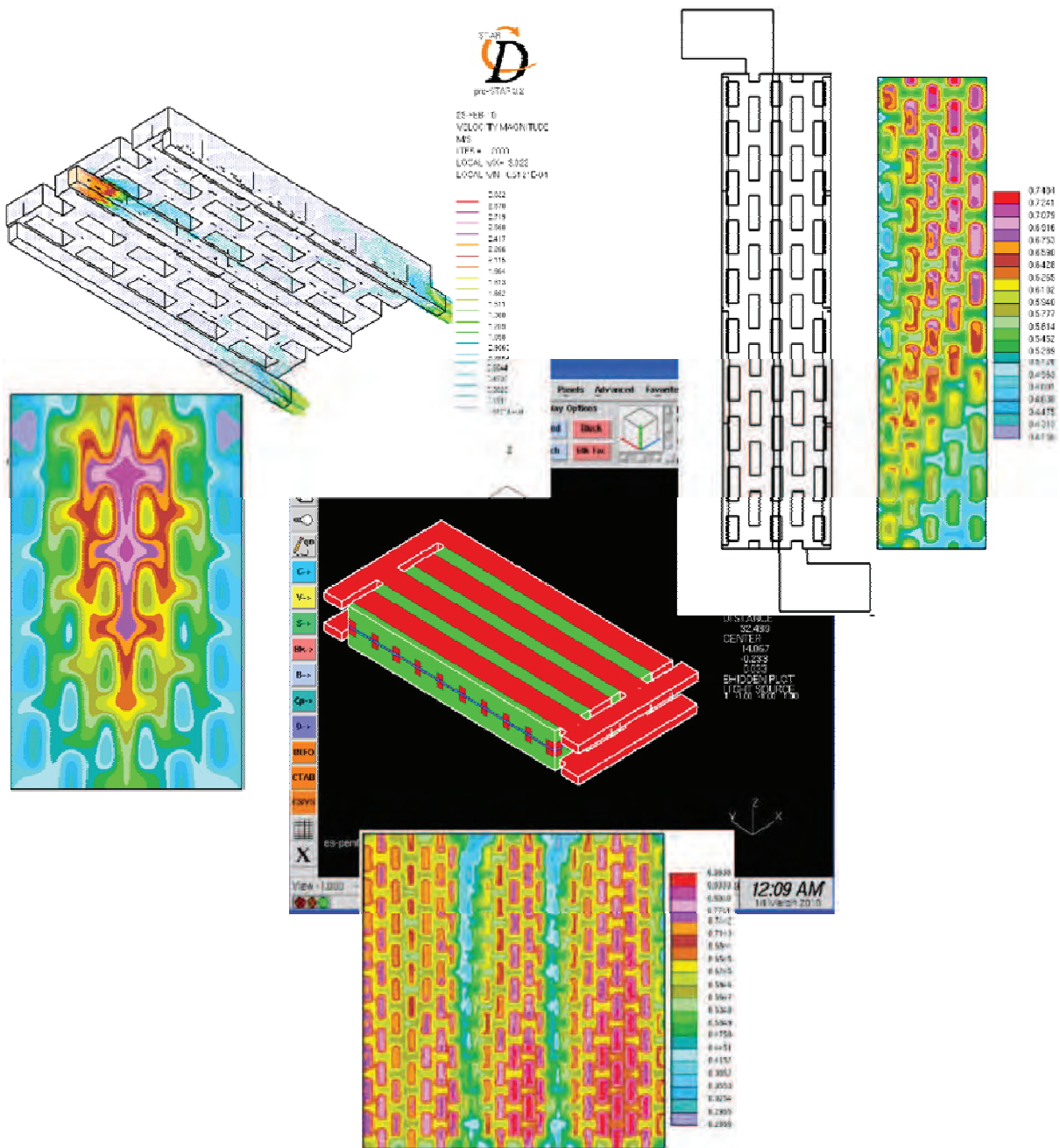


Figure 9. Iterative simulation procedure using CFD techniques and subsequent analysis of the results obtained.

The main results obtained with this new geometric model were:

- The enhancement of the reactive transport velocities in the channel itself and in the GDL (Gas Diffusion Layer).
- A correct managing of the cathode's water.

- An uniform distribution of the gases in the flow channels which provides an uniform current density throughout the reactive area.
- A more uniform temperature distribution on the MEA

All these results contributed to a more homogeneous performance of the MEA, avoiding mechanical stress and prolonging the PEMFC's useful life. Figure 10 shows some of the most representative results.

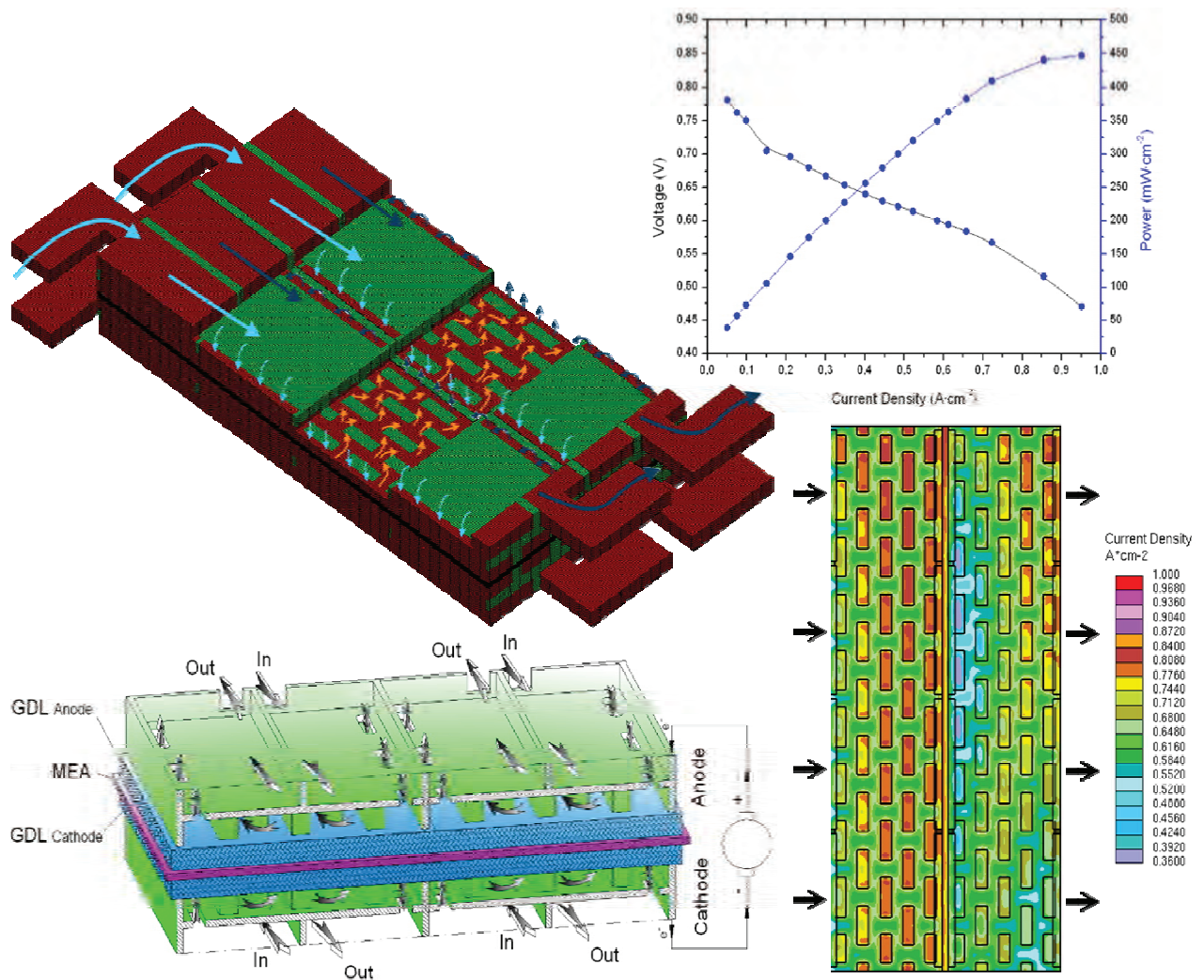


Figure 10. Model designed with the optimum geometry and some results.

5. Conclusion

Computational fluid dynamics (CFD) modelling provides a powerful design tool for improving the performance of the fuel cell. As presented, this technique can be used to investigate the multiphase flow in the porous gas diffusion layer or to investigate the effects of material properties on the performance of the cell, as well as the nature of multiphase flow in the gas flow channels. Some CFD software distributors have already developed fuel cell modules that can be used in conjunction with the original CFD codes. However, the problem of simulating a PEMFC is extremely complicated due to the huge number of

processes occurring inside the fuel cell. So, in the modelling of fuel cells there are two important issues to consider:

1. The user must select the most appropriate model that offers the best combination of capabilities, robustness and accuracy.
2. The accuracy of the mathematical model depends on the experimental validity.

In this chapter, the project used as case study was developed in four phases. In the first phase an optimal procedure for the numerical simulation of models generated by CAD applications was analyzed. Also, various CFD software were analysed in order to select the most appropriate for the study of PEMFC performance.

The second phase was devoted to analyze a three dimensional model to resolve a representative model of a PEMFC. This model should include the equations of fluid dynamics as well as those associated with all the electrochemical processes that occur inside the PEMFC.

In the third phase of this project the influence of the channel cross-section aspect ratio (defined as the ratio height/width) on the performance of a PEM fuel cell with serpentine flow field (SFF) design was investigated. The local current densities, velocity distributions, liquid water concentration in the membrane, hydrogen and oxygen concentrations and temperature were analyzed in the PEM fuel cell for 10 different aspect ratios to understand the channel cross-section aspect ratio effect on the PEMF fuel cell performance.

In the fourth phase a proposal for an optimum geometry for the flow channels of a PEMFC to improve its overall performance was presented.

All the results have been used to discuss some of the most remarkable aspects affecting the design of a PEMFC, with the aim of improving this design and optimising its performance. In practice, the design of a PEMFC is often reduced to designing the bipolar plates that, in turn, basically involves designing flow channels. Improvements in flow channel design for the bipolar plates can help to achieve the targets set for costs and operation to commercialise PEMFC. In this sense, computational fluid dynamics (CFD) has become an indispensable tool for the design and analysis of new prototypes, reducing time and costs to develop new and more efficient models of PEMFC.

Acknowledgements

The authors would like to thank the Polytechnical University College of Donostia-San Sebastián as part of the University of the Basque Country for economic funding provided to carry out this work. Thanks must also go to the General Computing Service Applied to Research (SGI/IZO-SGIker) at the UPV/EHU for the computer resources available to develop this work (licences for the STAR-CD 3.26 software and Arina cluster).

References

- [1] N. Djilali., Computational modelling of polymer electrolyte membrane (PEM) fuel cells: Challenges and opportunities, *Energy* 32, 2007, 269-280.
- [2] Sperling D. Cannon JS, (editors). *The hydrogen energy transition*. Elsevier, 2004
- [3] Stone C., Morrison A.E., From curiosity to power to change the world, *Solid State Ionics*, 2002, 152, 1-13.

- [4] K. Z. Yao et al., A review of Mathematical Models for Hydrogen and Direct Methanol Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cells, *Fuel Cells*, 2004, 4, No 1-2.
- [5] Weber AZ., Newman J., Modelling transport in polymer-electrolyte fuel cells, *Chem. Rev.* 2004, 104, 4679-726.
- [6] F. Barbir, *PEM Fuel Cells: Theory and Practice*, 2005.
- [7] G. Hoogers, *Fuel cell technology handbook*, 2003.
- [8] Denver Cheddie, Norman Munroe, Review and comparison of approaches to proton exchange membrane fuel cell modeling, *Journal of Power Sources*, 147, 1-2, 2005, 72-84.
- [9] F. Standaert, K. Hemmes and N. Woudstra, Analytical fuel cell modeling, *Journal of Power Sources*, 63, 1996, 212–234.
- [10] F. Standaert, K. Hemmes and N. Woudstra, Analytical fuel cell modelling, non-isothermal fuel cells, *Journal of Power Sources*, 70, 1998, 181–189.
- [11] T.E. Springer, T.A. Zawodzinski and S. Gottesfeld, Polymer electrolyte fuel cell model, *Journal of The Electrochemical Society*, 138, 1991, 2334–2342.
- [12] J.C. Amphlett, R.M. Baumert, R.F. Mann, B.A. Peppley and P.R. Roberge, Performance modeling of the Ballard Mark IV solid polymer electrolyte fuel cell I. Mechanistic model development, *Journal of The Electrochemical Society*, 142 (1), 1995, 1–8.
- [13] L. Pisani, G. Murgia, M. Valentín and B. D’Aguanno, A new semi-empirical approach to performance curves of polymer electrolyte fuel cells, *Journal of Power Sources*, 108, 2002, 192–203.
- [14] D.M. Bernardi and M.W. Verbrugge, Mathematical model of a gas diffusion electrode bonded to a polymer electrolyte, *American Institute of Chemical Engineers Journal (AIChE J.)*, 37 (8), 1991, 1151–1163.
- [15] D.M. Bernardi and M.W. Verbrugge, A mathematical model of the solid–polymer–electrolyte fuel cell, *Journal of The Electrochemical Society*, 139 (9), 1992, 2477–2491.
- [16] Hoogers Gregor: *Fuel Cells technology handbook*, 2003.
- [17] Xianguo Li, Imran Sabir, Review of bipolar plates in PEM fuel cells: Flow-field designs, *International Journal of Hydrogen Energy*, 30, 2005, 359-371.
- [18] Yoon, Young Gi; Lee, Won Yong; Park, Gu Gon; Yang, Tae Hyun; Kim, Chang Soo, Effects of channel and rib widths of flow field plates on the performance of a PEMFC, *International Journal of Hydrogen Energy*, 30, 2005, 1363–1366.
- [19] Yuh Ming Ferng, Ay Su, A three-dimensional full-cell CFD model used to investigate the effects of different flow channel designs on PEMFC performance, *International Journal of Hydrogen Energy*, 30, 2005, 4466-4476.
- [20] S. Shimpalee, S. Greenway, D. Spuckler, J.W. Van Zee, Predicting water and current distributions in a commercial-size PEMFC, *Journal of Power Sources*, 135, 2004, 79-87
- [21] S. Shimpalee, S. Greenway, J.W. Van Zee, The impact of channel path length on PEMFC flow-field design, *Journal of Power Sources*, 160, 2006, 398–406.
- [22] S. Shimpalee, J.W. Van Zee, Numerical study on rib and channel dimension of flow-field on PEMFC performance, *International Journal of Hydrogen Energy*, 32, 2007, 842-856.

- [23] D. H. Jeon, S. Greenway, S. Shimpalee, J.W. Van Zee, The effect of serpentine flow-field designs on PEM fuel cell performance, *International Journal of Hydrogen Energy*, 33, 2008, 1052 - 1066.
- [24] Sungho Lee, Heeseok Jeong, Byungki Ahn, Taewon Lim, Youngjin Son, Parametric study of the channel design at the bipolar plate in PEMFC performances, *International Journal of Hydrogen Energy*, 33, 2008, 5691 - 5696.
- [25] Kap-Seung Choi, Hyung-Man Kim, Sung-Mo Moon, Numerical studies on the geometrical characterization of serpentine flow-field for efficient PEMFC, *International Journal of Hydrogen Energy*, 36, 2011, 1613-1627.
- [26] Arnaud Morin, Feina Xu, Gérard Gebel, Olivier Diat, Influence of PEMFC gas flow configuration on performance and water distribution studied by SANS: Evidence of the effect of gravity, *International Journal of Hydrogen Energy*, 36, 2011, 3096-3109.
- [27] Luis Valiño, Radu Mustata, María Isabel Gil, Jesús Martín, Effect of the relative position of oxygen-hydrogen plate channels and inlets on a PEMFC, *International Journal of Hydrogen Energy*, 35, 2010, 11425-11436.
- [28] K. B. Shyam Prasad, S. Jyanti, Effect of channel-to-channel cross-flow on local flooding in serpentine flow-fields, *Journal of Power Sources*, 180, 2008, 227-231.
- [29] C. Xu. T. S. Zhao, A new flow field design for polymer electrolyte-based fuel cells, *Electrochemistry Communications*, 9, 2007, 497-503.
- [30] J. P. Feser, A. K. Prasad, S. G. Advani, On the relative influence of convection in serpentine flow fields of PEM fuel cells, *J. of Power Sources*, 161, 2006, 404-412.
- [31] Star-CD 3.2 Methodology, CD adapco Group, <http://www.adapco.com>.
- [32] ES-PEMFC Methodology and Tutorial Manual, CD adapco Group, <http://www.adapco.com>.
- [33] S. Shimpalee, U. Beuscher, J.W. Van Zee, Investigation of gas diffusion media inside PEMFC using CFD modelling, *J. of Power Sources*, 163 (1), 2006, 480-489.
- [34] W.k. Lee, S. Shimpalee, J.W. Van Zee, Verifying predictions of water and current distributions in a serpentine flow field PEMFC, *Journal of The Electrochemical Society*, 150, 2003, A341-8.
- [35] Pérez Manso, Angel. "Expresión Gráfica en el diseño de pilas de combustible (PEMFC)". En: *Actas del XII Congreso Iberoamericano de Gráfica Digital SIGRADI 2008*, (La Habana, 1-5 de diciembre de 2008). P. 67-72.
- [36] F. F. Marzo, A. Pérez. "Modelado Computacional de una pila de combustible de membrana de intercambio protónico, PEMFC". En: *Actas del III Congreso Nacional de Pilas de Combustible CONAPPICE 2008*, (Zaragoza, 24-26 de septiembre de 2008). P. 211-214.
- [37] A. P. Manso, F. F. Marzo, A. R. Pierna, J. Barranco, A. Lorenzo and J. Barroso, Design Optimization of a Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cell, PEMFC, *Journal of New Materials for Electrochemical Systems*, 12, 2009, 133-137.
- [38] A.P. Manso, F.F. Marzo, M. Garmendia, J. Barranco, Numerical analysis of the influence of the channel cross-section aspect ratio on the performance of a PEM fuel cell with serpentine flow field design, *International Journal of Hydrogen Energy*, 36, 2011, 6795-6808.



Ángel Pérez Manso received his Diploma degree in Industrial Technical Engineering in Mechanics (1993) and B.S. degree in Industrial Organization Engineering (2003) from the University of Basque Country, Spain. He is pursuing for his Ph.D. in Engineering Design from the University of Basque Country.

His scientific research interests include the hydrogen energy and the production of green energy from renewable resources such as photovoltaic, wind and sea. His work covers various topics, but the main work focuses on the design of bipolar plates for PEM fuel cells. Mr. Pérez is currently a professor in the Department of Graphic Expression and Engineering Projects in the Polytechnical University College of Donostia-San Sebastián, at University of Basque Country.

E-mail address: angel.perez@ehu.es



Florencio Fernández Marzo received the Chemical Sciences degree in 1991 and the PhD degree in Chemical Sciences in 2002, both at the University of Basque Country. Currently he is a professor of Chemical Engineering at the Polytechnical University College of Donostia-San Sebastián, at University of Basque Country. Areas of interest are electrochemical techniques for characterization and study of the electrochemical behaviour of materials, amorphous metallic alloys and fuel cells.

E-mail address: iapfemaf@sp.ehu.es



José E. Barranco Riveros received the Bachelor degree in Chemical Science (Speciality in Macromolecules) at the Faculty of Chemical Sciences (2000), and the Doctor of Philosophy in Chemical Science at the Polytechnic College of San Sebastián (University of the Basque Country) in 2008.

As a Post-Doctoral researcher, he is in charge of the electrochemical PEM fuel cells research line in the Laboratory for Research in Combustion Technology (LITEC-CSIC) Zaragoza. His interests are focused in the study of different compositions of commercial catalyst inks as well as the synthesis of amorphous catalysts in order to improve the effectiveness of PEM fuel cells, by studying of an efficient deposition of such catalysts in the membrane or gas diffusion layers. Also, in order to enhance the

performance of PEMFC stacks for long-term experiments, his efforts are focused on the effect that different coatings have on the corrosion resistance properties of metallic bipolar plates.

E-mail address: jose_barranco0@hotmail.com



Mikel Garmendia Mujika received the Industrial Engineering degree in Mechanics (six year course) in 1991, and the PhD degree in Engineering Design in 2004, in the Polytechnical University College of Donostia-San Sebastián, University of the Basque Country.

Areas of interest are new technologies, engineering design and engineering education. Dr. Garmendia is currently a professor in the Department of Graphic Expression and Engineering Projects in the Polytechnical University College of Donostia-San Sebastián, University of the Basque Country.

E-mail address: mikel.garmendia@ehu.es



EXPRESIÓN GRÁFICA EN EL DISEÑO DE PILAS DE COMBUSTIBLE (PEMFC)

Resumen. La tecnología de celdas de combustible está sometida en la actualidad a un intenso desarrollo, y la combinación de nuevos y optimizados materiales, nuevas arquitecturas, procesos de transporte más eficientes y diseños más optimizados se espera que mejoren, además de otros factores, la eficiencia de las celdas de combustible.

En este sentido, las herramientas de Ingeniería de Celdas de Combustible Computacional (CFCE, Computational Fuel Cell Engineering) puede permitirnos la simulación sistemática, diseño y optimización de sistemas de celdas de combustible para la integración de los distintos avances que se van incorporando a este campo, permitiendo una menor dependencia de los prototipos y reduciendo así los ciclos de desarrollo. La CFCE requiere una robusta integración de modelos representativos de una amplia variedad de procesos y con escalas de tiempo diferentes, en los que se integran fluidodinámica, iónica, transporte electrónico y térmico con reacciones químicas.

El grupo de "Vidrios Metálicos y Nanotecnologías" del Laboratorio de Química Industrial e Ingeniería Electroquímica (<http://www.sc.ehu.es/iaweb/ESP/esp.htm>) de la Universidad del País Vasco, lleva desde 1991 desarrollando diversas líneas de investigación relacionadas con el comportamiento electroquímico y resistencia a la corrosión de materiales metálicos amorfos y nanocristalinos.

Este trabajo se enmarca dentro de la principal línea de investigación que sigue el grupo, denominada: ELECTROCATÁLISIS Y PILAS DE COMBUSTIBLE (DMFC, DEFC y PEMFC), destacando la importancia de lo que el Área de Expresión Gráfica en la Ingeniería aporta al grupo multidisciplinar encargado del desarrollo de la misma.

Palabras Claves. Fuel Cell, CFD, Simulación Computacional.

I. INTRODUCCIÓN

El desarrollo de esta línea de investigación se realiza mediante un grupo multidisciplinar en el que toman parte las siguientes áreas de conocimiento:

- Ingeniería Química y del Medio Ambiente, desarrollando nuevos materiales para las membranas protónicas PEM.
- **Expresión Gráfica en la Ingeniería**, desarrollando nuevos diseños para las celdas de combustible y validándolos.
- Organización de Empresas, estudiando la viabilidad del proceso de producción industrial de los nuevos modelos.

Es de destacar la importancia de la parte gráfica dentro de este proceso interdisciplinar (modelado sólido, modelado de superficies, análisis de resultados, ...), y su determinante influencia en una de las partes que más directamente está implicada en el desarrollo de los nuevos diseños: el modelo virtual.

Este modelo virtual consiste en un entorno integrado de simulación de los diferentes escenarios que se pueden dar en los nuevos diseños de las PEMFC, a todos los niveles de detalle (características geométricas, de los materiales, de los fluidos, condiciones de contorno,...).

Su objetivo principal es la optimización global del funcionamiento de la PEMFC bajo estudio, mediante el análisis por simulación de las distintas posibilidades de combinación de las diferentes variables que pueden tomar parte en el proceso, como pueden ser: tipo de combustible a utilizar (metanol, etanol o hidrógeno), características físicas y químicas del combustible (temperatura o concentración de la disolución entre otras), condiciones de entrada y salida del combustible a la celda (presión, velocidad, ...), para cada una de las variantes geométricas predefinidas.

Aunque el paso previo a este proceso de optimización global del diseño de una celda de combustible es el desarrollo y validación de un modelo matemático equivalente al modelo real, con el que se puedan simular todas las diferentes situaciones de funcionamiento de la PEMFC.

II. OBJETIVOS

Establecimiento de modelos matemáticos generalizados para celdas de combustible de membrana de intercambio protónico PEMFC, y en especial para pilas de oxidación directa de metanol (DMFC) y de hidrógeno, siguiendo dos líneas de trabajo paralelas:

- Análisis de un prototipo físico existente (Reactor electroquímico P-300)
- Diseño y fabricación de un nuevo prototipo físico (Minicelda de hidrógeno)

Los pasos seguidos en cada una de las líneas han sido los siguientes:

⇒ Análisis de un prototipo físico existente (Reactor electroquímico P-300)

- Técnicas de ingeniería inversa -> Creación de un modelo tridimensional digital (CAD)
- Comunicación CAD-CAE -> Formatos de intercambio (IGES (*Initial Graphics Exchange Specification*) -Primer estándar de intercambio de datos de producto entre diferentes sistemas de CAD/CAM-, STEP (*Standar for the Exchange of Product model data*) ...)
- Simulación dinámica del modelo matemático -> Optimización del diseño
- Tratamiento gráfico de los resultados

⇒ Diseño y fabricación de un nuevo prototipo físico (Minicelda de hidrógeno)

- Desarrollo de la geometría espacial
- Representación normalizada del diseño para la fabricación
- Desarrollo de la documentación gráfica del proyecto, como medio ideal para describir y transmitir el diseño.
- Comunicación CAD-CAE
- Simulación dinámica del modelo matemático -> Optimización del diseño
- Tratamiento gráfico de los resultados.

Estos modelos matemáticos, una vez comprobada su validez, por comparación de los resultados teóricos con los resultados experimentales obtenidos en la estación de pilas de que dispone el Grupo, servirán para predecir el

comportamiento futuro de distintos diseños de celdas de combustible con el objetivo final de mejorar la eficiencia de las mismas.

Para la optimización del diseño en ambos casos, **la simulación computacional es una herramienta indispensable.**

Determinada la necesidad de adquirir un software para la elaboración y optimización del modelo matemático que describa todos los procesos que se dan en el funcionamiento de una celda de combustible, el siguiente paso ha sido el de revisar la amplia oferta existente de software CFD (Computational Fluid Dynamics).



Figura 1. Estación de pilas de combustible del grupo.
(<http://www.sc.ehu.es/iaweb/IMAGENES/FOTOSLAB/DSCN2682.jpg>)

III. SELECCIÓN DEL SOFTWARE

Hasta no hace mucho tiempo, las herramientas para la simulación dinámica de sistemas existentes en el mercado, carecían de una buena interfaz con el usuario; de forma que, la creación y definición de las diferentes geometrías a estudiar se convertía en una tediosa labor al tener que generar un archivo con la definición de la geometría mediante coordenadas y otros parámetros numéricos. Algo similar ocurría con el análisis de los resultados, dado que éstos se reflejaban mediante largas tablas numéricas incluidas en un archivo de texto.

Hoy día, gracias al espectacular avance que la informática ha experimentado en los últimos años, prácticamente la totalidad de los paquetes informáticos dirigidos al cálculo por elementos finitos y la simulación dinámica de sistemas multifísicos, incluyen de base un sistema de CAD más o menos desarrollado o, en su defecto, están dotados de las rutinas necesarias para la importación e interpretación de los datos de las geometrías a estudiar, a partir de archivos estándar de intercambio de datos (IGES, STEP, ...), generados a su vez mediante paquetes específicos de CAD.

Además, gracias a la utilización de entornos con gran potencia de resolución gráfica, también el estudio de los resultados obtenidos durante la simulación dispone de una mayor potencia de análisis.

En esta parte del estudio se han considerado las características más destacadas de los siguientes paquetes de software:

- Fluent v6.2
- Femlab 3.1
- Comsol Multiphysic 3.2
- ANSYS CFX v10

Para la evaluación de los diferentes programas se ha utilizado la geometría tridimensional de un reactor electroquímico perteneciente al **Laboratorio de Química Industrial e Ingeniería Electroquímica** de la Escuela Universitaria Politécnica de San Sebastián (<http://www.sc.ehu.es/iaweb/>). Este reactor se ha modelizado utilizando el paquete de diseño asistido por ordenador Solid Edge v18.

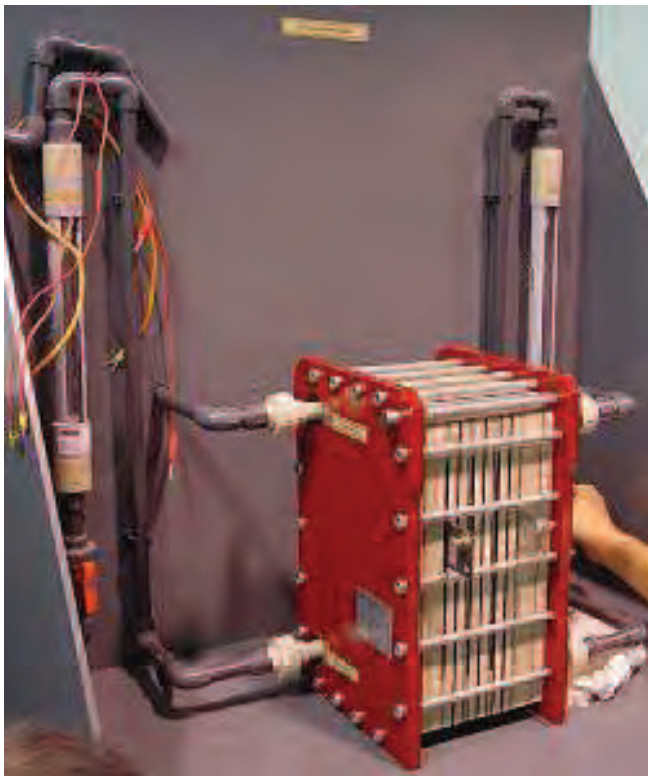


Figura 2. Reactor electroquímico P-300 en el banco de pruebas. (<http://www.sc.ehu.es/iaweb/ESP/esp.htm>)

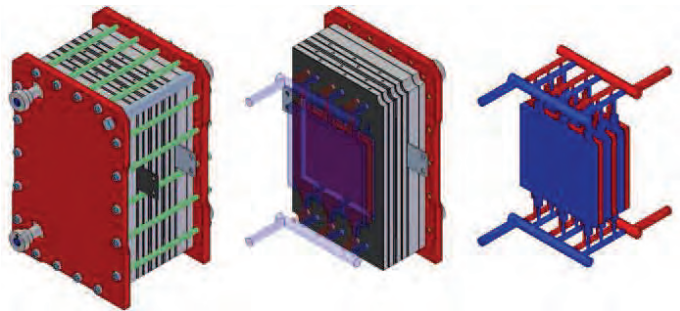


Figura 3. Modelado tridimensional del reactor electroquímico P-300 en Solid Edge v18.

IV. CONCLUSIONES

Después de un estudio previo de toda la información disponible sobre los paquetes de software: Fluent v6.2, Femlab 3.1, Comsol Multiphysic 3.2 y ANSYS CFX 10.0; y de realizar diferentes pruebas, las conclusiones obtenidas con respecto al software ANSYS CFX 10.0 han sido las siguientes:

- Entorno gráfico potente e intuitivo, muy similar al de cualquier programa de CAD 3D. Además, dispone de algoritmos para la importación de geometrías en formatos estandarizados DXF, IGES, etc...
- La importación de geometrías en 3D en formato IGES (a partir de Solid Edge v18) se hacen correctamente.
- El tiempo de cálculo para un modelo simple es de minutos, mucho menor que el empleado con otros programas.
- Los módulos de pre-procesado (desarrollo de la geometría, mallado y definición de condiciones de contorno), solver (resolución matemática del modelo) y post-procesado (presentación de resultados) están incluidos en un único entorno, ANSYS Workbench, que permite integrar en una sola herramienta desde los análisis preliminares más simples hasta los más complejos estudios de detalle y validación.
- El coste anual por licencia no se carga a los presupuestos del grupo de investigación, gracias al Servicio General de Informática (SGI-IZO).
- Existe un centro de formación homologado en Madrid.

Por todo ello, se ha decidido adoptar ANSYS CFX 10.0 como software de simulación CFD para su aplicación en las investigaciones sobre celdas de combustible, que el **Laboratorio de Química Industrial e Ingeniería Electroquímica** de la Escuela Universitaria Politécnica de San Sebastián está desarrollando.

V. DESARROLLO DEL TRABAJO

• ESTUDIO DEL REACTOR ELECTROQUÍMICO P-300

Inicialmente, como medio de aprendizaje de utilización del software ANSYS-CFX, se simuló el comportamiento fluidodinámico del Reactor Electroquímico P-300.

El procedimiento seguido en cada simulación ha sido el siguiente:

1. Crear o importar la geometría (ANSYS DesignModeler)
2. Generar y refinar la malla de elementos finitos (CFX Mesh)
3. Especificar las propiedades físicas y definir condiciones iniciales y de contorno (Advanced CFX-Pre)
4. Ejecutar la simulación (Advanced CFX-Solver)
5. Visualizar los resultados (Advanced CFX-Post)

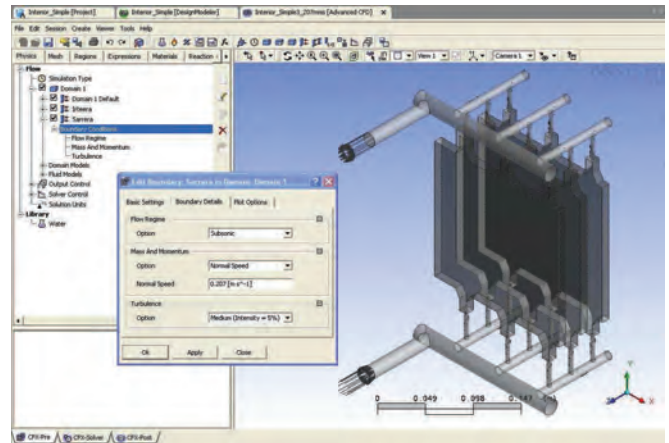


Figura 6. Asignación de características físicas y condiciones de contorno en CFX-Pre.

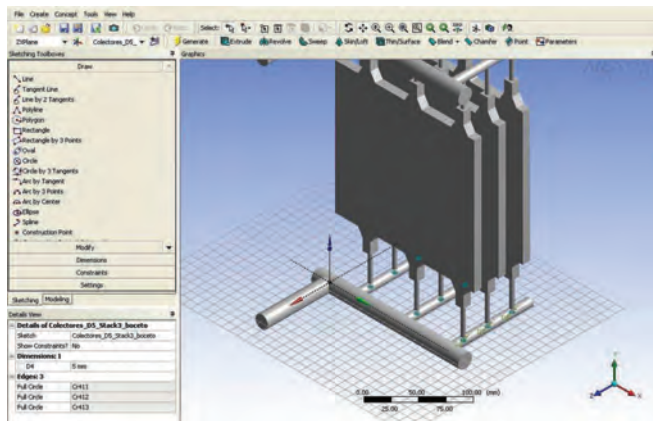


Figura 4. Generación de la geometría en DesignModeler.

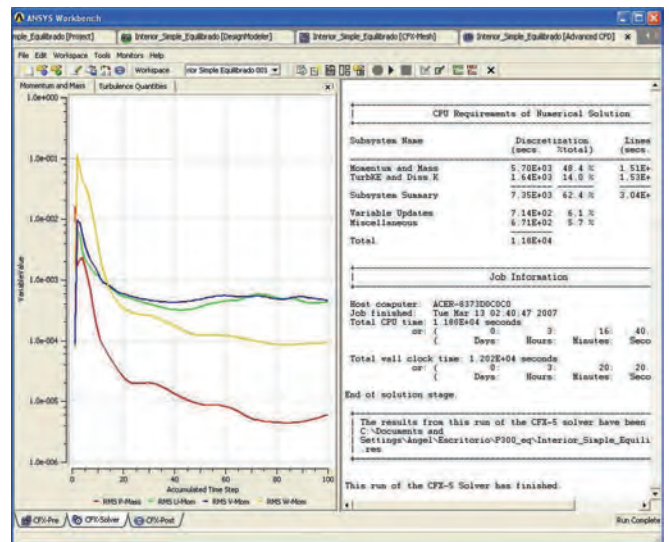


Figura 7. Resolución del problema y control del proceso en CFX-Solver.

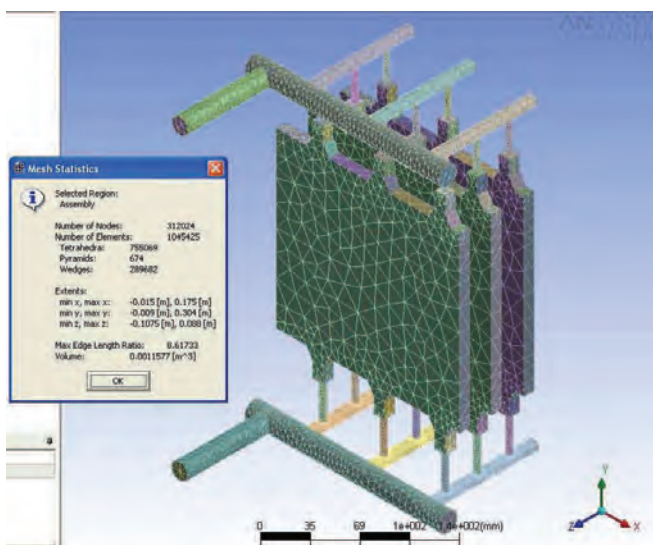


Figura 5. Generación del mallado con CFX Mesh

Una vez resuelto el modelo mediante **Advanced CFX-Solver**, el módulo de postprocesado nos ofrece de una forma gráfica el resultado del cálculo. Entre los resultados obtenidos, en la figura adjunta se presentan los siguientes:

- Perfil de velocidades en los colectores de entrada
- Perfil de velocidades en los stacks
- Líneas de flujo a lo largo del modelo completo

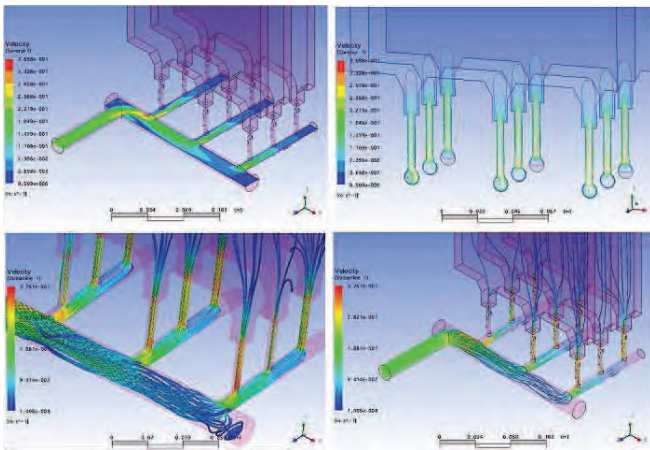


Figura 8. Presentación de resultados en CFX-Post.

• **ESTUDIO DE LA CELDA DE COMBUSTIBLE DE HIDRÓGENO**

Para este estudio se ha diseñado y fabricado un prototipo de celda de hidrógeno.

El procedimiento seguido para el análisis del comportamiento fluidodinámico de la celda ha sido similar al seguido anteriormente.

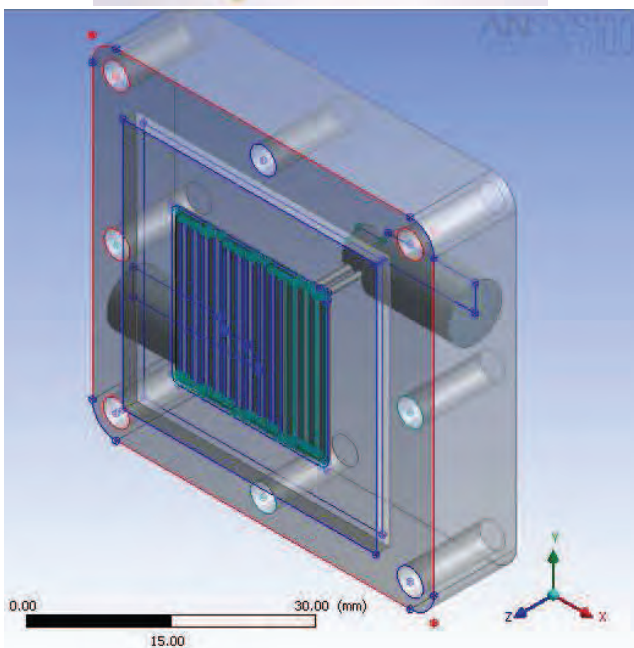


Figura 9. Modelado de una semicelda (Circuito de H₂).

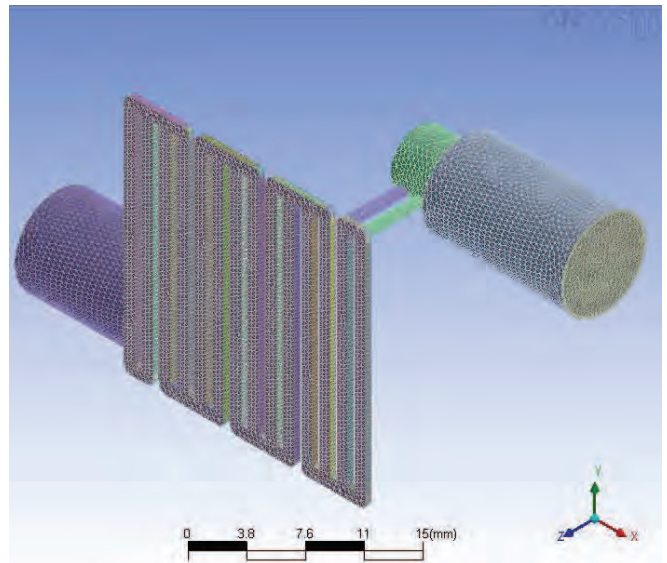


Figura 10. Generación del mallado.

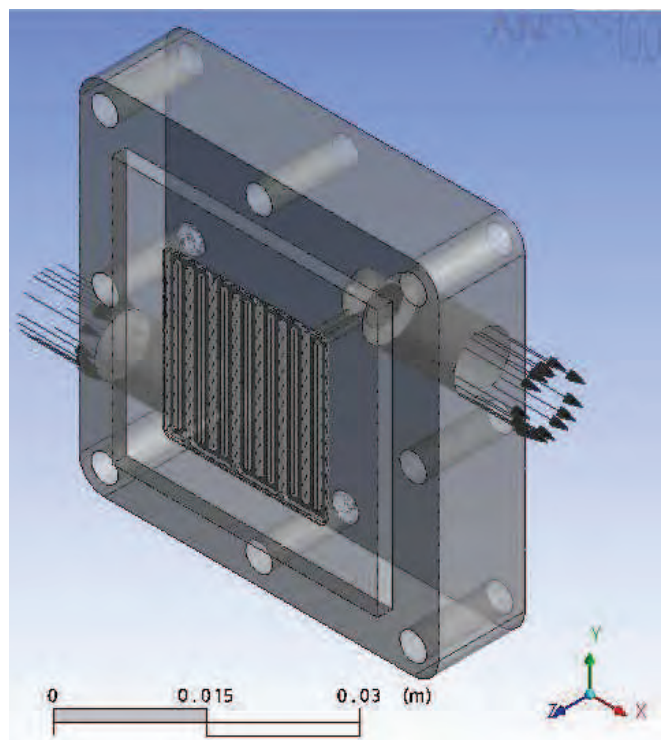


Figura 11. Asignación de características físicas y condiciones de contorno en CFX-Pre.

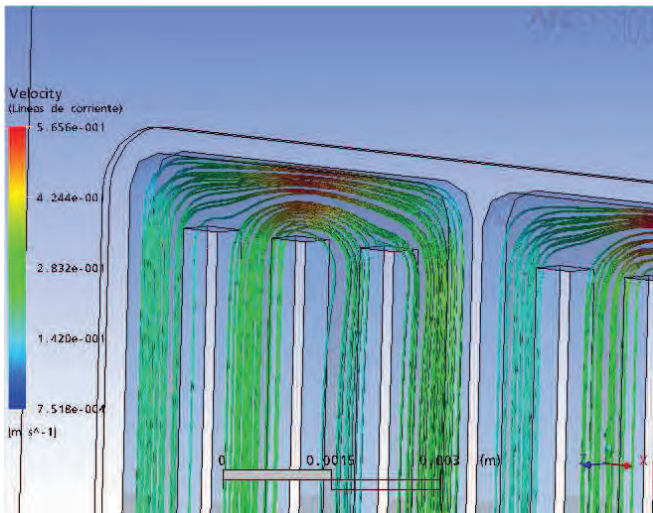


Figura 12. Detalle de las líneas de flujo (streamline) en una zona de la celda, en CFX-Post.

VI. TRABAJOS FUTUROS

Este trabajo no ha sido más que el comienzo de una serie de trabajos, cuyo objetivo global, el de esta primera línea de investigación, es el de establecer un modelo matemático generalizado completo para celdas de combustible de membrana de intercambio protónico, y en especial para las pilas de oxidación directa de metanol y de hidrógeno que se van a experimentar en el **Laboratorio de Química Industrial e Ingeniería Electroquímica** de la Escuela Universitaria Politécnica de San Sebastián.

Una vez definido el comportamiento fluidodinámico de las celdas, el siguiente paso debe ser la implementación de un modelo matemático que sea representativo del comportamiento electroquímico de la celda.

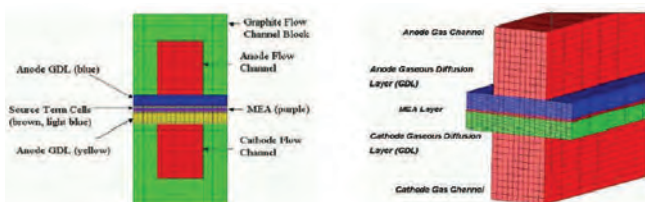


Fig.13. Modelizado de las diferentes zonas de una pila de combustible.

Estos modelos, una vez que se haya comprobado su validez, por comparación de los resultados teóricos con los resultados experimentales obtenidos en la estación de pilas de que dispone el Grupo, servirán para predecir el comportamiento futuro de distintos diseños de celdas de combustible con el objetivo final de mejorar la eficiencia de las mismas.

REFERENCES

- [1] J. Barranco and A.R. Pierna. Bifunctional amorphous alloys more tolerant to carbon monoxide. *Journal of Power Sources*, Volume 169, Issue 1, 10 June 2007, Pages 71-76
- [2] J. Barranco and A.R. Pierna. Amorphous $Ni_{59}Nb_{40}Pt_{(1-x)}Y_x$ ($Y = Sn, Ru; x = 0\%, 0.4\%$) modified carbon paste electrodes and their role in the electrochemical methanol deprotonation and CO oxidation process. *Journal of Non-Crystalline Solids*, Volume 353, Issues 8-10, 15 April 2007, Pages 851-854
- [3] M. Sistiaga and A. R. Pierna. Application of amorphous materials for fuel cells. *Journal of Non-Crystalline Solids*, Volume 329, Issues 1-3, 1 November 2003, Pages 184-187
- [4] A.R Pierna, M Sistiaga, C Navascués and A Lorenzo. Electrochemical treatment of toxic compounds on the surface of amorphous Ni-Nb-Pt-Sn alloys *Journal of Non-Crystalline Solids*, Volume 287, Issues 1-3, July 2001, Pages 432-436
- [5] A. R. Pierna, M. Sistiaga, C. Navascués, A. Altube, A. Lorenzo and F. F. Marzo. Influence of glass diaphragms and anionic membranes in the electrochemical oxidation of aromatic aqueous solutions. *Electrochimica Acta*, Volume 46, Issues 2-3, 1 November 2000, Pages 315-322
- [6] M. Sistiaga, A. Cuesta, A. R. Pierna and C. Gutiérrez. Characterization by electrolyte electroreflectance and X-ray photoelectron spectroscopy of amorphous $Ni_{59}Nb_{40}Pt_{1-x}Sn_x$ alloys and their activation by HF solutions. *Surface Science*, Volume 410, Issues 2-3, 1 August 1998, Pages 312-320
- [7] M. Sistiaga, A. R. Pierna, F. F. Marzo, A. Altube and A. Lorenzo. Electrooxidation of phenol on amorphous $Ni-40Nb-(1-x)Pt-xSn$ alloys *Applied Surface Science*, Volume 133, Issues 1-2, May 1998, Pages 124-128
- [8] *Handbook of Fuel Cells: Fundamentals, Technology and Applications*, Edited by Wolf Vielstich, Hubert A. Gasteiger, Arnold Lamm, vol. 1: Fundamentals and survey of systems
- [9] James Larminie, Andrew Dicks, *Fuel Cell Systems Explained*, Ed. Wiley, Second Edition
- [10] Frano Barbiv, *PEM Fuel Cells; Theory and Practice*, Ed. Elsevier Academic Press
- [11] Djilali N. Computational modelling of polymer electrolyte membrane (PEM) fuel cells: Challenges and opportunities. *Energy* 32 (2007) 269-280
- [12] Agnolucci P. Economics and market prospects of portable fuel cells. *Int J Hydrogen Energy* (2007), doi: 10.1016/j.ijhydene.2007.03.042
- [13] Neburchilov et al. / *Journal of Power Sources* 169 (2007) 221-238
- [14] S. Shimpalee, J.W. Van Zee, *International Journal of Hydrogen Energy* 32 (2007) 842 - 8

OPTIMIZACIÓN DEL DISEÑO DE UNA CELDA DE COMBUSTIBLE DE MEMBRANA DE INTERCAMBIO PROTÓNICO, PEMFC.

A. Pérez^{a*}, F. F. Marzo^b, A. R. Pierna^b, J. Barranco^b,
A. Lorenzo^b y J. Barroso^b.

^aDepartamento de Expresión gráfica y Proyectos de Ingeniería, Universidad del País Vasco, UPV-EHU, Plaza de Europa 1, 20018 San Sebastián, España. ^bDepartamento de Ingeniería Química y del Medio Ambiente, Universidad del País Vasco, UPV-EHU, Plaza de Europa 1, 20018 San Sebastián, España

Resumen

Se ha realizado una simulación de un modelo 3-D del funcionamiento de una celda de combustible de membrana de intercambio protónico (PEMFC, Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cell), combinando métodos de dinámica de fluidos computacional (CFD, Computational Fluid Dynamics; STAR-CD versión 3.26, ADAPCO) con un módulo experto (es-pemfc versión 2.2, ADAPCO) que permite el acoplamiento de fluidodinámica (CFD) y procesos específicos de transporte y reacciones electroquímicas en PEMFCs. Se describe el proceso de diseño geométrico con técnicas de CAD, mallado y simulación numérica de una PEMFC en condiciones estacionarias de funcionamiento. Con los resultados obtenidos, se discuten los aspectos más importantes que afectan al diseño de una PEMFC, con el objetivo de optimizar el rendimiento de la pila.

1. Introducción

Tanto las celdas de combustible de membrana de electrolito polimérico (PEMFCs, Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cells), como las tecnologías del hidrógeno, ofrecen hoy en día un camino prometedor hacia sistemas de energía sostenible. Ofrecen unas perspectivas de muy baja o emisión cero en un amplio rango de potencias y con distintas aplicaciones (automoción, portables, energía). Sin embargo existen todavía distintos obstáculos ingenieriles y científicos (así como económicos y sociopolíticos) que se deben superar antes de que estas tecnologías se implanten de manera definitiva[1].

Por esta razón la tecnología de celdas de combustible está sometida en la actualidad a un intenso desarrollo, y la combinación de nuevos y optimizados materiales, nuevas arquitecturas, procesos de transporte más eficientes y diseños más optimizados se espera que mejoren, además de otros factores, la eficiencia de las celdas de combustible.

En este sentido, las herramientas de Ingeniería de Celdas de Combustible Computacional (CFCE, Computational Fuel Cell Engineering) puede permitirnos la simulación sistemática, diseño

* E-mail: angel.perez@ehu.es; Fax: (+34) 943017130

y optimización de sistemas de celdas de combustible para la integración de los distintos avances que se van incorporando a este campo, permitiendo una menor dependencia de los prototipos de hardware y reduciendo así los ciclos de desarrollo. La CFCE requiere una robusta integración de modelos representativos de una amplia variedad de procesos y con escalas de tiempo diferentes, en los que se integran fluidodinámica, iónica, transporte electrónico y térmico con reacciones electroquímicas.

Existe un extenso reconocimiento del uso de las celdas de combustible como dispositivos para una conversión energética eficiente y limpia. Las celdas de combustible se adaptan a distintas necesidades, tienen una eficiencia teórica elevada y, a diferencia de las baterías, pueden producir electricidad de forma continuada mientras se suministre el combustible necesario de forma continua. Cuando se alimentan con hidrógeno, los únicos productos de la reacción son el agua y el calor. Además de los problemas relacionados con la infraestructura necesaria para el aprovisionamiento distribuido del hidrógeno [2], los principales obstáculos para el desarrollo y la comercialización de las PEMFCs, son principalmente el coste, durabilidad y rendimiento de operación [3].

Una PEMFC está constituida fundamentalmente por siete componentes, el canal de flujo anódico (AF, Anode Flow channel), la capa de difusión anódica (AD, Anode Difusion Layer), la capa catalítica anódica (AC, Anode Catalyst layer), la membrana (M), la capa catalítica del cátodo (CC, Cathode Catalyst layer), la capa de difusión catódica (CD, Cathode Difusion Layer) y el canal del flujo catódico (CF, Cathode Flow channel). A la estructura multicapa formada por (AD-AC-M-CC-CD) se le denomina MEA (Membrane Electrode Assembly), mientras que el conjunto (AD-AC; ánodo) y (CC-CD; cátodo) constituyen respectivamente los electrodos de la pila [1]. El correcto ensamblaje de estos componentes, es una más de las variables que afectan al rendimiento final de una PEMFC.

El principio de funcionamiento general de una PEMFC es relativamente simple. El hidrógeno se alimenta en la celda, a través del AF, se difunde en el AD y alcanza el catalizador, donde se oxida y libera electrones y protones. Los protones que se generan en el ánodo se conducen a través de la membrana de electrolito polimérico (PEM, polymer electrolyte membrane) hacia el cátodo. Como la membrana no es un conductor electrónico, los electrones liberados en el ánodo fluyen a través de un circuito externo, generando potencia eléctrica útil. Al mismo tiempo oxígeno (o aire) se alimenta a través del CF. El oxígeno alcanza la CC, donde reacciona con los protones y electrones para generar agua.

En general la mejora del rendimiento de una PEMFC se puede alcanzar incrementando tanto las velocidades de transporte y/o reacción, así como la relación superficie/volumen de las áreas interfaciales donde tiene lugar la reacción/transporte. En cualquiera de los casos, es necesario identificar las

limitaciones predominantes y su localización, y conocer el origen de las mismas. Las medidas in-situ que se quieran llevar a cabo para detectar estas anomalías son muy dificultosas, debido al confinamiento en un espacio muy reducido del proceso electroquímico que tiene lugar en la PEMFC, la complejidad de los acoplamientos entre los distintos fenómenos de transporte y la naturaleza transitoria de dichos procesos. Los modelos matemáticos que se disponen para PEMFCs basados en procesos físico-químicos fundamentales, junto con la observación experimental son, por lo tanto, una herramienta fundamental para tratar de comprender el funcionamiento global de una pila de combustible.

Acoplando los modelos matemáticos de PEMFCs con modernos métodos de dinámica de fluidos computacional (CFD, Computational Fluid Dynamics) se pueden configurar potentes herramientas de CFCE que proporcionan el medio necesario para reducir el tiempo y los costes de desarrollo en el diseño de PEMFCs. De esta forma, en el marco de una rigurosa CFD, se puede disponer por un lado de las capacidades necesarias para la discretización numérica y la solución de ecuaciones de conservación, y por otro, de herramientas de CFCE asociadas a procesos específicos de transporte en PEMFCs, incluyendo flujos multifásicos en medios porosos, reacciones electroquímicas y transporte de especies cargadas y agua en la membrana polimérica. Estos procesos, convenientemente acoplados, son la base del éxito en la resolución de problemas de diseño, gestión del calor y agua generados, mejora del rendimiento y reducción de costes en PEMFCs [4, 5].

El rendimiento de una PEMFC, depende de diversos factores, entre los que se incluyen las condiciones de operación, los fenómenos de transporte en la celda, la cinética de la reacción electroquímica, el ensamblaje de la MEA y la geometría de los canales de flujo.

En una PEMFC, los canales de flujo se utilizan para aportar el combustible (hidrógeno) al ánodo y el oxígeno al cátodo. Cuando una PEMFC se conecta en serie para conseguir mayores potencias, constituyen un stack, el cual se conecta por medio de placas bipolares. Una placa bipolar es un componente multifuncional de la PEMFC, ya que tiene la función de recolectar y conducir la corriente de una celda a otra, separar los gases, y hacer llegar los gases reaccionantes a los electrodos de la PEMFC. En ausencia de placas refrigerantes, las placas bipolares facilitan también la eliminación del calor generado.

El diseño de canales de flujo en placas bipolares es uno de los factores clave que afectan al rendimiento de una PEMFC. Tanto el diseño de la geometría de la sección como del canal de flujo tienen influencia sobre el transporte de reactivo, la gestión del agua y la eficiencia en la utilización del reactivo. Un diseño apropiado de los canales de flujo de una PEMFC permitirá potenciar las velocidades de transporte de reactivo en el propio canal así como en la capa de difusión gaseosa (anódica o catódica; GDL, Gas Diffusion Layer) antes de alcanzar la capa

catalítica, donde tiene lugar la reacción. Un diseño adecuado también será beneficioso en la gestión de agua del cátodo, con el fin de que se elimine de forma adecuada. Además, una distribución homogénea del gas en el canal de flujo, proporcionará a su vez, una distribución uniforme de la temperatura y ocasionará menos tensiones mecánicas en la MEA, extendiendo la vida útil de la PEMFC.

Se han realizado diversos estudios del efecto de la sección geométrica y del diseño de los canales de flujo en distintos aspectos del funcionamiento de una PEMFC. Shimpalee et al. [6,7] estudiaron un modelo 3D de canales de flujo en forma de serpentín de 200 cm² con diferente número de canales y longitudes. Los resultados que obtuvieron indicaron que la temperatura local, el contenido de agua y la distribución de corriente es más uniforme en diseños con serpentines cortos y con mayor número de canales. Shimpalee y Van Zee [8] comprobaron que la distribución en la concentración de especies reactivas en una PEMFC provoca distribuciones en la densidad de corriente local, temperatura y agua sobre la superficie de la PEMFC. Esto puede conducir a efectos de inundación (flooding) o secado de la membrana en distintas zonas de la PEMFC y ocasionar tensiones en diferentes regiones de la pila de combustible. Modificando la configuración del flujo, incluyendo la longitud, anchura, o altura del canal para distribuir el gas más uniformemente, se consiguen minimizar estas tensiones. En este trabajo se estudió numéricamente cómo los canales de flujo con diferentes secciones transversales de canal/rib (espacio entre canales) afectan al rendimiento y distribución de especies en diferentes regímenes de funcionamiento de la PEMFC. Con la innovación en el diseño de nuevos canales de flujo se está consiguiendo también incrementar el flujo de gas por convección bajo los ribs de la pila [9,10,11], facilitando así tanto el transporte de masa al electrodo como la eliminación del agua por problemas de flooding. Por lo tanto, potenciando los procesos convectivos de gases a través de las capas de difusión (GDL, Gas Diffusion Layer) optimizando el canal de flujo es una manera efectiva también de reducir el flooding en el cátodo, incrementar el transporte de masa, y por lo tanto mejorar el rendimiento y la estabilidad de operación de las PEMFC.

El objetivo de este trabajo se centra en el diseño, mediante técnicas de CAD, y la simulación de una PEMFC de hidrógeno con serpentín de flujo de gases (de tipo SSF, Serpentine Flow Field), mediante técnicas de CFD, con el objetivo de 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 fluidodinámica (CFD; STAR-CD versión 3.26, ADAPCO) y procesos específicos de transporte y reacciones electroquímicas en una PEMFC mediante el módulo experto es-pemfc (versión 2.20, ADAPCO) [12].

2. Simulación numérica

La simulación numérica está basada en un modelo CFD 3-D de una PEMFC de hidrógeno completa, función tanto de la temperatura como del cambio de fase que pueda experimentar el agua en el interior de la pila. En la **Fig. 1 a)** y **b)** se muestra el diseño de la PEMFC utilizada en este estudio. El canal de flujo es un serpentín de doble canal con una superficie total de 319,44 mm² y un volumen de 159,72 mm³. La sección transversal del canal es de 1 mm de ancho con una profundidad de 0.5 mm. Ánodo y cátodo presentan la misma geometría. En la **Fig. 1 c)** se detalla la geometría de la canalización de la pila. La MEA se sitúa entre las capas de difusión del ánodo y cátodo (GDLs). Estas GDLs tienen una microestructura en la región próxima a la MEA, la cual consiste en una membrana y dos electrodos compuestos de polvo de carbón en el que se soporta Pt como catalizador. Se han utilizado un total de 931456 celdas para el mallado y definición de los dominios computacionales necesarios para modelizar la PEMFC completa. En la **Fig. 1 d)** y **e)** se muestran detalles del mallado tridimensional utilizado en los cálculos de CFD.

En el proceso de generación del mallado (**Fig. 2**), se hizo un estudio previo de la geometría de la celda en 2D y se subdividió la misma en regiones específicas que fueran posteriormente susceptibles de generar mallados en 2D coherentes. Posteriormente se extruyeron para obtener un mallado 3D. En función de este estudio previo se generó un archivo de vértices. Este archivo, constituye el conjunto de coordenadas de los vértices 3D (x, y, z) característicos de la PEMFC. Con este archivo, una vez exportado a un entorno de STAR-CD, se creó la malla con los pasos siguientes: 1) lectura del archivo de vértices; 2) generación de polilíneas y mallas bidimensionales; 3) creación del mallado tridimensional por extrusión; 4) homogeneización del mallado generando los acoplamientos necesarios; 5) refinamiento de malla. A cada componente (MEA, GDL y fluido) se le asignó un espesor y número de capas determinado (MEA: 0.05 mm/4; GDL: 0.25 mm/5; fluido: 0.5 mm/5); 6) asignación de propiedades a las celdas. Se generaron 10 tipos diferentes de celdas (**Fig. 1 e)**): fluido ánodo (rojo), GDL ánodo (azul oscuro, naranja y ciano); fluido cátodo (rojo), GDL cátodo (azul oscuro, naranja y ciano); MEA (rosa); sólido (ciano).

3. 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 S. Shimpalee et al. [13,14,15,16]. 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 H_2 y O_2 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.

Se ha utilizado una técnica de volumen de control basada en un programa comercial, STAR-CD (versión 3.26) [17] junto con el módulo experto para PEMFC (es-pemf versión 2.2) [18] para resolver el modelo matemático basado en el acoplamiento de fluidodinámica (CFD) y procesos específicos de transporte y reacciones electroquímicas de la PEMFC. Este software requiere especificar los términos fuente para las ecuaciones de transporte de especies, de generación de calor originadas por pérdidas eléctricas [13, 16, 18]. Se dispone también de subrutinas adicionales en el módulo standard de es-pemf para calcular el sobrepotencial, permeabilidad y difusividad efectiva de gas.

Las propiedades de los materiales utilizados en la simulación de la PEMFC con la geometría de canales de flujo de tipo serpentín de la **Fig. 1 c)** se detallan en la **Tabla 1** [18]. En la **Tabla 2** se representan las condiciones de operación de ánodo y cátodo para un potencial de celda de 0.5 V.

4. Resultados y discusión

En la **Fig. 3** se representa la distribución de densidad de corriente local de la superficie de la MEA, la fracción másica de oxígeno, el sobrepotencial y la fracción másica de agua líquida en la MEA (cátodo) para las condiciones de operación indicadas en la **Tabla 2**. Se puede observar en esta figura que la densidad de corriente, **Fig. 3.a)**, disminuye de la entrada a la salida de la pila, como consecuencia de la reducción de la concentración de los gases reaccionantes. La fracción másica de oxígeno en la superficie de la MEA del cátodo, **Fig.3.b)** está relacionada íntimamente con la distribución de densidad de corriente, disminuyendo a medida que se reduce la densidad de corriente. Esta reducción de la concentración de oxígeno provoca también un incremento del sobrepotencial superficial en el cátodo, **Fig.3.c)**.

Por otra parte, la fracción másica de agua líquida en la MEA (cátodo), **Fig. 3.d)**, presenta bajos valores, con pequeñas variaciones de la entrada a la salida de la pila. El flujo de agua a través de la MEA se incluye como término fuente tanto en el cátodo como en el ánodo teniendo en cuenta el flujo neto de agua por protón (escalar α), el contenido de agua en la membrana y el coeficiente de difusión del agua tal como se definen en [18].

En la **Fig. 4** se representa la distribución de conductividad de la MEA (cátodo) **a)**, el flujo neto de agua por protón (distribución α , **b)** y la distribución de temperatura **c)**.

Los valores de conductividad de la membrana, son relativamente bajos, y disminuyen de la entrada a la salida de la pila. Los valores de α proporcionan información sobre el proceso dominante en el transporte de agua a través de la membrana. Valores positivos indican predominio de arraste electroosmótico de moléculas de agua desde el ánodo hacia el cátodo, por contra, valores negativos indican la existencia de un transporte por difusión de moléculas de agua desde el cátodo al ánodo. Valores próximos a cero indican un correcto balance de agua en la pila [13]. En este caso el descenso de la conductividad de la membrana viene acompañado de un descenso de los valores de α , siempre positivos (max. 0.85; min. 0.29). El máximo valor de la conductividad se obtiene a la entrada de la pila, en la que las condiciones de elevada humedad proporcionan una buena hidratación inicial de la membrana. Los puntos de rocío de las corrientes de entrada (ánodo/cátodo; 80/70 °C) son inferiores a la temperatura de la pila, que presenta una distribución uniforme de temperatura, **Fig. 4.c**). La temperatura de la pila al mantenerse por encima de la temperatura de rocío, no facilita la condensación de agua líquida, reduciendo la fracción de agua líquida en la MEA, **Fig. 3.c**), y los valores de conductividad de la membrana, **Fig. 4.a**).

5. Conclusiones

Se ha simulado el comportamiento de una PEMFC combinando herramientas de diseño CAD y técnicas de CFD, utilizando un modelo 3-D en el que se han combinado las ecuaciones de conservación de masa, momento y energía con los procesos electroquímicos que tienen lugar en los electrodos de la pila. Los resultados se han utilizado para discutir algunos de los aspectos más destacados que afectan al diseño de una PEMFC, con el objetivo de mejorar dicho diseño y optimizar su rendimiento.

La metodología que se ha utilizado en este proceso de diseño y simulación se aplicará en el futuro a nuevos prototipos de PEMFC de tipo SFF, con el fin de estudiar la influencia de la geometría de los canales de flujo y de nuevos materiales (MEA, electrocatalizadores, GDLs) en el rendimiento de la pila.

Tabla 1. Propiedades de los materiales: GDL (Gas difusión Layer) y MEA (Membrane Electrode Assembly).

Anchura del canal (mm):	1 mm
Altura del canal (mm):	0.5 mm
Longitud del canal (mm):	165 mm
Espesor de GDL (μm):	0.25 μm
Conductividad térmica de GDL ($\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$):	0.25
Espesor de la MEA (incluyendo la capa de catalizador; μm):	50
Conductividad térmica de la MEA ($\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$):	0.15
Conductividad térmica de las placas bipolares ($\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$):	5.7
Densidad de la membrana seca (g cm^{-3}):	2
Peso equivalente de la membrana seca (g mol^{-1}):	1100

Tabla 2. Condiciones de operación para la simulación de la PEMFC

Condiciones de entrada en el canal anódico

Flujo másico de H₂ (kg s⁻¹): 1.39E-08
Velocidad de entrada (m/s): 0.33
Fracción másica de H₂: 0.115
Fracción másica de H₂O: 0.885
Temperatura de entrada (°C): 80

Condiciones de entrada en el canal catódico

Flujo másico de O₂ (kg s⁻¹): 1.092E-06
Velocidad de entrada (m/s): 0.98
Fracción másica de O₂: 0.183
Fracción másica de H₂O: 0.215
Fracción másica de N₂: 0.602
Temperatura de entrada (°C): 70

Condiciones de operación

Potencial de circuito abierto (V): 0.96
Presión de salida (kPa): 101
Densidad de corriente de intercambio de H₂ (A cm⁻²): 0.2
Densidad de corriente de intercambio de O₂ (A cm⁻²): 0.02
Temperatura de la pila (°C): 70

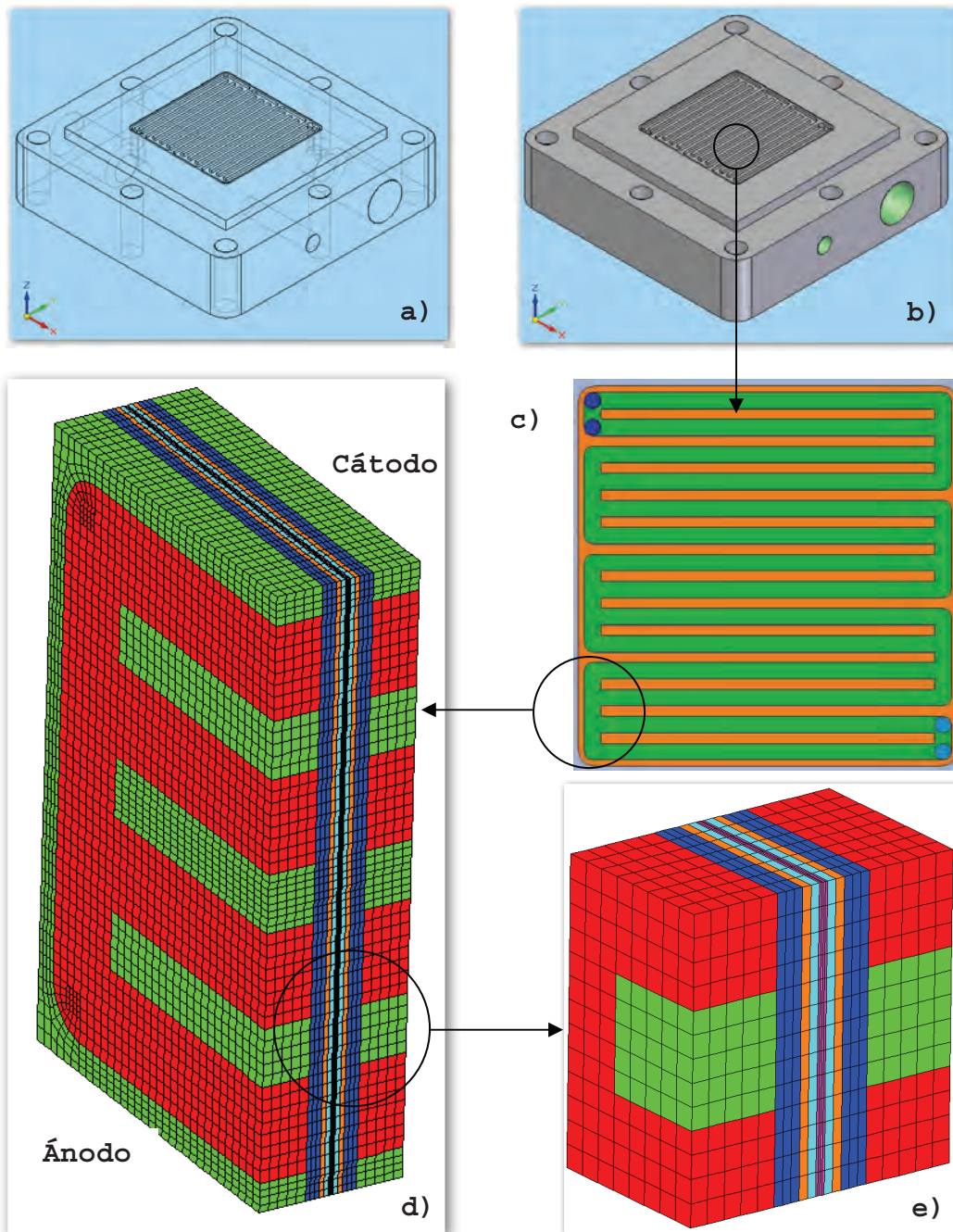


Fig. 1. a), b): PEMFC de hidrógeno. Se detalla el colector de corriente y la placa bipolar de grafito con los canales de flujo. Ánodo y cátodo presentan la misma geometría. c) Detalle de los canales de flujo de la placa de grafito utilizada para la distribución de gas (hidrógeno y oxígeno) en la PEMFC. d) mallado de la geometría utilizada para los cálculos de CFD, e): detalle de los componentes del mallado: ■ dominio sólido; ■ canal de flujo anódico y catódico (dominio fluido); ■ capa de difusión anódica y catódica (GDL, Gas diffusion Layer); ■ membrana.

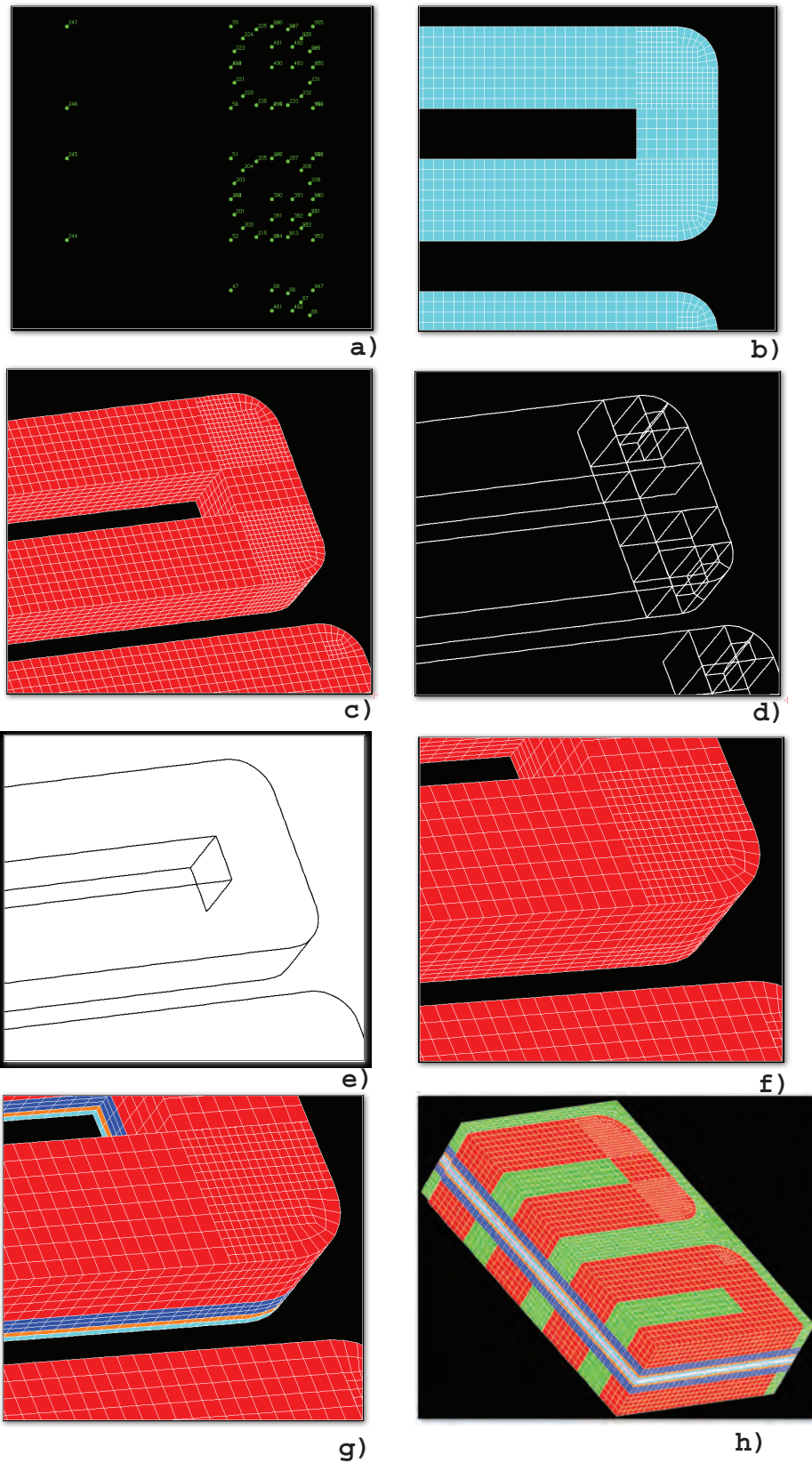


Fig. 2. Proceso de Mallado de una PEMFC para utilizarla en los cálculos de CFD. **a)** Archivo de vértices; **b)** Generación de polilíneas y mallas bidimensionales; **c)** creación del mallado tridimensional por extrusión; **d,e)** homogeneización del mallado, acoplamiento; **f)** refinamiento de malla. Cada componente (MEA, GDL y fluido) tiene asignado en la malla un espesor y número de capas determinado (MEA: 0.05 mm/4; GDL: 0.25 mm/5; fluido: 0.5 mm/5); **g)** asignación de propiedades a las celdas.

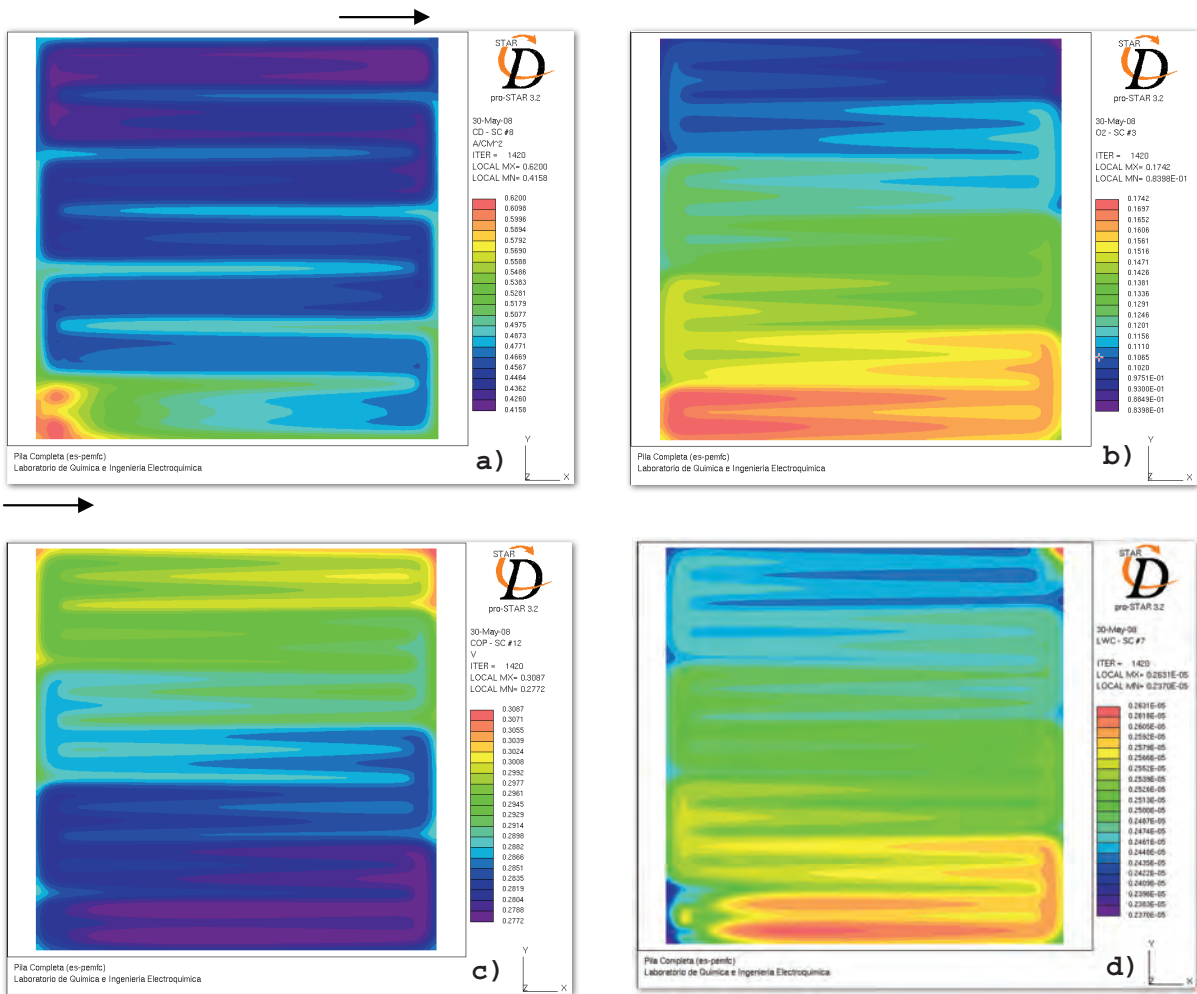


Fig. 3. Distribución de densidad de corriente local ($A\ cm^{-2}$) **a)**, fracción másica de oxígeno **b)**, sobrepotencial (V), **c)**, y fracción de agua líquida en la MEA **d)**; cátodo.

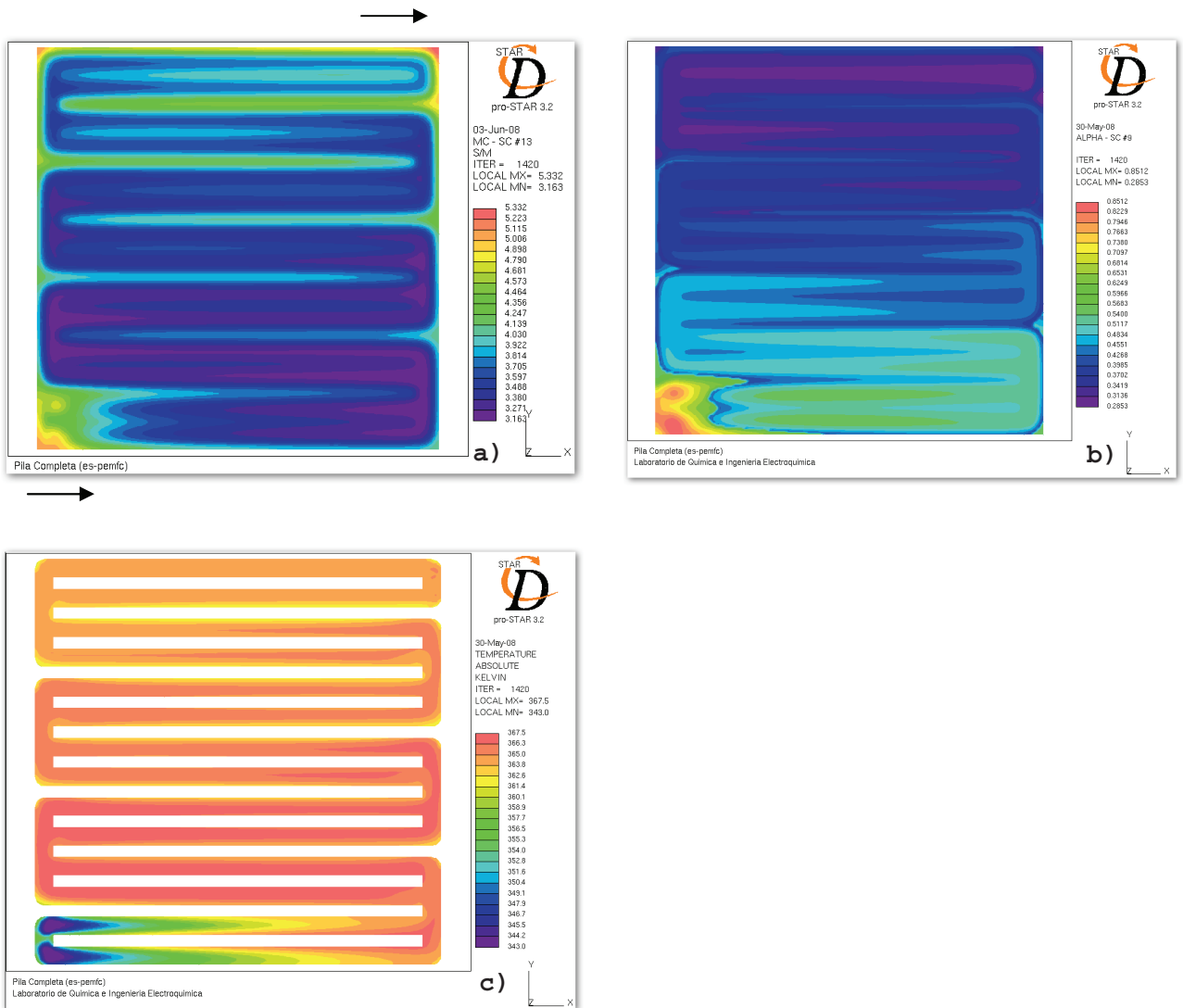


Fig. 4. Distribución de conductividad de la MEA: **a)**; flujo neto de agua por protón, distribución de α : **b)**; distribución de valores de temperatura: **c)**; cátodo.

Agradecimientos

Los autores de este trabajo agradecen al Gobierno Vasco (Dpto. de Educación, Universidades e Investigación; RC-2008-1-36) a la U.P.V./E.H.U. (Proyecto GIU2006/2008) y al MEC (Proyecto CTQ2006-13163/BQU, fondos FEDER), la ayuda económica prestada para la realización de este trabajo.

Referencias

- 1 N. Djilali. Computational modelling of polymer electrolyte membrane (PEM) fuel cells: Challenges and opportunities. *Energy* 32 (2007) 269-280.
- 2 Sperling D. Cannon JS, (editors). *The hydrogen energy transition*. Elsevier, 2004.
- 3 Stone C., Morrison AE. From curiosity to power to change the world. *Solid State Ionics* 2002; 152:1-13.
- 4 K. Z. Yao et al. A review of Mathematical Models for Hydrogen and Direct Methanol Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cells. *Fuel Cells* 2004, 4, No 1-2.
- 5 Weber AZ., Newman J. Modelling transport in polymer-electrolyte fuel cells. *Chem Rev* 2004; 104:4679-726.
- 6 Shimpalee S., Greenway S., Spuckler D., Van Zee J. Predicting water and current distributions in a commercial size PEMFC. *J Power Sources* 2004;135:79-87.
- 7 Shimpalee S, Greenway S, Van Zee J. The impact of channel path length on PEMFC flow-field design. *J Power Sources*. 2006;160:398-406.
- 8 S. Shimpalee, J.W. Van Zee. Numerical studies on rib&channel dimension of flow-field on PEMFC performance. *International Journal of Hydrogen Energy* 32 (2007) 842 - 856
- 9 K. B. Shyam Prasad, S. Jyanti. Effect of channel-to-channel cross-flow on local flooding in serpentine flow-fields. *Journal of Power Sources* 180 (2008) 227-231.
- 10 C. Xu. T. S. Zhao. A new flow field design for polymer electrolyte-based fuel cells. *Electrochemistry Communications* 9 (2007) 497-503.
- 11 J. P. Feser, A. K. Prasad, S. G. Advani. On the relative influence of convection in serpentine flow fields of PEM fuel cells. *Journal of Power Sources* 161 (2006) 404-412.
- 12 ES-PEMFC methodology and tutorial manual: CD adapco Group, <http://www.adapco.com>.
- 13 S. Shimpalee, U. Beuscher, J.W. Van Zee, *J. Power Sources* 163 (1) (2006) 480.
- 14 W-k. Lee, S. Shimpalee, J.W. Van Zee, *J. Electrochem. Soc.* 150 (2003) A341.
- 15 S. Shimpalee, S. Greenway, D. Spuckler, J.W. Van Zee, *J. Power Sources* 135 (2004) 79.
- 16 S. Shimpalee, J.W. Van Zee, *Int. J. Hydrogen Energy* 32 (7) (2007) 842.
- 17 Star-CD 3.2 Methodology, CD adapco Group, <http://www.adapco.com>.
- 18 ES-PEMFC Methodology and Tutorial Manual, CD adapco Group, <http://www.adapco.com>.

MODELADO COMPUTACIONAL DE UNA PILA DE COMBUSTIBLE DE MEMBRANA DE INTERCAMBIO PROTÓNICO, PEMFC.

F. F. Marzo¹, A. Pérez², A. R. Pierna¹, J. Barranco¹, A. Lorenzo¹ y J. Barroso¹

¹Departamento de Ingeniería Química y del Medio Ambiente, Universidad del País Vasco, UPV-EHU, Plaza de Europa 1, 20018 San Sebastián, España. ²Departamento de Expresión gráfica y Proyectos de Ingeniería, Universidad del País Vasco, UPV-EHU, Plaza de Europa 1, 20018 San Sebastián, España

RESUMEN: *Se ha realizado una simulación computacional de un modelo 3-D del funcionamiento de una pila de combustible de membrana de intercambio protónico (PEMFC, Proton Exchange Membrane Fuel Cell), combinando métodos de dinámica de fluidos computacional (CFD, Computational Fluid Dynamics; STAR-CD versión 3.26, ADAPCO) con un módulo experto (es-pemfc versión 2.2, ADAPCO) que permite el acoplamiento de fluidodinámica (CFD) y procesos de transporte y reacciones electroquímicas en PEMFCs. Se describe el proceso de diseño geométrico con técnicas de CAD, mallado y simulación numérica de una PEMFC en condiciones estacionarias de funcionamiento. Los resultados obtenidos, se pueden utilizar para proporcionar información detallada de la respuesta de la pila y para analizar las características de diseño, con el objetivo de optimizar el rendimiento de la pila.*

ABSTRACT: *Three-dimensional computational simulation of a proton exchange membrane fuel cell, PEMFC, has been developed, combining Computational Fluid Dynamics (CFD, STAR-CD 3.26, Adapco) with an add-on tool called Expert System for PEMFCs (ES-PEMFC version 2.20, Adapco) that provide coupling between CFD, transport phenomena and electrochemical reactions in PEMFCs. Computer-aided design (CAD), meshing and steady-state numerical simulation processes of a PEMFC are described. The simulated results can be used to provide detailed information response of the fuel cell and to analyze design features in order to optimize the fuel cell performance.*

Palabras clave: *Dinámica de Fluidos Computacional, Modelo de Pilas de Combustible PEM, STAR-CD.*

Keywords: *Computational Fluid Dynamics, PEM Fuel Cell Model, STAR-CD.*

1. INTRODUCCIÓN

Tanto las pilas de combustible de membrana de electrolito polimérico (PEMFCs, Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cells), como las tecnologías del hidrógeno, ofrecen hoy en día un camino prometedor hacia sistemas de energía sostenible. Ofrecen unas perspectivas de muy baja o emisión cero en un amplio rango de potencias y con distintas aplicaciones (automoción, portables, energía). Sin embargo existen todavía distintos obstáculos ingenieriles y científicos (así como económicos y sociopolíticos) que se deben superar antes de que estas tecnologías se implanten de manera definitiva [1].

Por esta razón la tecnología de pilas de combustible está sometida en la actualidad a un intenso desarrollo, y la combinación de nuevos y optimizados materiales, nuevas arquitecturas, procesos de transporte más eficientes y diseños más optimizados se espera que mejoren, además de otros factores, la eficiencia de las pilas de combustible. En este sentido, las herramientas de Ingeniería de Pilas de Combustible Computacional (CFCE, Computational Fuel Cell Engineering) puede

permitirnos la simulación sistemática, diseño y optimización de sistemas de pilas de combustible para la integración de los distintos avances que se van incorporando a este campo, permitiendo una menor dependencia de los prototipos de hardware y reduciendo así los ciclos de desarrollo. La CFCE requiere una robusta integración de modelos representativos de una amplia variedad de procesos y con escalas de tiempo diferentes, en los que se integran fluidodinámica, iónica, transporte electrónico y térmico con reacciones electroquímicas.

Existe un extenso reconocimiento del uso de las pilas de combustible como dispositivos para una conversión energética eficiente y limpia. Las pilas de combustible se adaptan a distintas necesidades, tienen una eficiencia teórica elevada y, a diferencia de las baterías, pueden producir electricidad de forma continuada mientras se suministre el combustible necesario de forma continua. Cuando se alimentan con hidrógeno, los únicos productos de la reacción son el agua y el calor. Además de los problemas relacionados con la infraestructura necesaria para el aprovisionamiento distribuido del hidrógeno [2], los principales obstáculos para el

desarrollo y la comercialización de las PEMFCs, son principalmente el coste, durabilidad y rendimiento de operación [3].

Las medidas in-situ que quieran llevar a cabo para detectar anomalías de funcionamiento en una PEMFC son muy dificultosas, debido al confinamiento en un espacio muy reducido del proceso electroquímico que tiene lugar, la complejidad de los acoplamientos entre los distintos fenómenos de transporte y la naturaleza transitoria de dichos procesos. Los modelos matemáticos que se disponen para PEMFCs basados en procesos físico-químicos fundamentales, junto con la observación experimental son, por lo tanto, una herramienta fundamental para tratar de comprender el funcionamiento global de una pila de combustible.

Acoplando los modelos matemáticos de PEMFCs con modernos métodos de dinámica de fluidos computacional (CFD, Computational Fluid Dynamics) se pueden configurar potentes herramientas de CFCE que proporcionan el medio necesario para reducir el tiempo y los costes de desarrollo en el diseño de PEMFCs. De esta forma, en el marco de una rigurosa CFD, se puede disponer por un lado de las capacidades necesarias para la discretización numérica y la solución de ecuaciones de conservación, y por otro, de herramientas de CFCE asociadas a procesos específicos de transporte en PEMFCs, incluyendo flujos multifásicos en medios porosos, reacciones electroquímicas y transporte de especies cargadas y agua en la membrana polimérica. Estos procesos, convenientemente acoplados, son la base del éxito en la resolución de problemas de diseño, gestión del calor y agua generados, mejora del rendimiento y reducción de costes en PEMFCs [4, 5].

En una PEMFC, los canales de flujo se utilizan para aportar el combustible (hidrógeno) al ánodo y el oxígeno al cátodo. El diseño de estos canales de flujo en placas bipolares es uno de los factores clave que afectan al rendimiento de una PEMFC [6,7]. Tanto el diseño de la geometría de la sección como la disposición del canal de flujo tienen influencia sobre el transporte de reactivo, la gestión del agua y la eficiencia en la utilización del reactivo. Un diseño apropiado de los canales de flujo de una PEMFC permitirá potenciar las velocidades de transporte de reactivo en el propio canal así como en la capa de difusión gaseosa (anódica o catódica; GDL, Gas Diffusion Layer) antes de alcanzar la capa catalítica, donde tiene lugar la reacción. Un diseño adecuado también será beneficioso en la gestión de agua del cátodo, con el fin de que se elimine de forma adecuada. Además, una distribución homogénea del gas en el canal de flujo, proporcionará a su vez, una distribución uniforme de la temperatura y ocasionará

menos tensiones mecánicas en la MEA, extendiendo la vida útil de la PEMFC.

El objetivo de este trabajo se centra en el diseño, mediante técnicas de CAD, y la simulación de una PEMFC de hidrógeno con serpentín de flujo de gases (de tipo SSF, Serpentine Flow Field), mediante técnicas de CFD, con el objetivo de 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 fluidodinámica (CFD; STAR-CD versión 3.26, ADAPCO) y procesos específicos de transporte y reacciones electroquímicas en una PEMFC mediante el módulo experto es-pemfc (versión 2.20, ADAPCO) [8].

2. PARTE EXPERIMENTAL

2.1. SIMULACIÓN NUMÉRICA

La simulación numérica está basada en un modelo CFD 3-D de una PEMFC de hidrógeno completa, función tanto de la temperatura como del cambio de fase que pueda experimentar el agua en el interior de la pila. El canal de flujo de la PEMFC utilizada en este estudio es un serpentín de doble canal con una superficie total de 319.44 mm^2 y un volumen de 159.72 mm^3 . La sección transversal del canal es de 1 mm de ancho con una profundidad de 0.5 mm. Ánodo y cátodo presentan la misma geometría. La MEA se sitúa entre las capas de difusión del ánodo y cátodo (GDLs). Estas GDLs tienen una microestructura en la región próxima a la MEA, la cual consiste en una membrana y dos electrodos compuestos de polvo de carbón en el que se soporta Pt como catalizador.

Se han utilizado un total de 931456 celdas para el mallado y definición de los dominios computacionales necesarios para modelizar la PEMFC completa.

2.2. 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 S. Shimpalee et al. [9]. 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 H_2 y O_2 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 descende a medida que el agua se condensa.

Se ha utilizado una técnica de volumen de control basada en un programa comercial, STAR-CD (versión 3.26) [10] junto con el módulo experto para PEMFC (es-pemf versión 2.2) [8] para resolver el modelo matemático basado en el acoplamiento de fluidodinámica (CFD) y procesos específicos de transporte y reacciones electroquímicas de la PEMFC. Este software requiere especificar los términos fuente para las ecuaciones de transporte de especies, de generación de calor originadas por pérdidas eléctricas [9]. Se dispone también de subrutinas adicionales en el módulo standard de es-pemfc para calcular el sobrepotencial, permeabilidad y difusividad efectiva de gas.

La geometría de la pila, propiedades de los materiales y condiciones de operación utilizados en la simulación de la PEMFC para un potencial de trabajo de 0.5 V son los mismos que los utilizados en [11].

3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En la **FIG. 1** se representa la distribución de densidad de corriente local de la superficie de la MEA, la fracción másica de oxígeno, el sobrepotencial y la fracción másica de agua líquida en la MEA (cátodo). Se puede observar en esta figura que la densidad de corriente, **FIG. 1.A**), disminuye de la entrada a la salida de la pila, como consecuencia de la reducción de la concentración de los gases reaccionantes. La fracción másica de oxígeno en la superficie de la MEA del cátodo, **FIG. 1.B**) está relacionada íntimamente con la distribución de densidad de corriente, disminuyendo a medida que se reduce la densidad de corriente. Esta reducción de la concentración de oxígeno provoca también un incremento del sobrepotencial superficial en el cátodo, **FIG. 1.C**.

Por otra parte, la fracción másica de agua líquida en la MEA (cátodo), **FIG. 1.D**) presenta bajos valores, con pequeñas variaciones de la entrada a la salida de la pila. El flujo de agua a través de la MEA se incluye como término fuente tanto en el cátodo como en el ánodo teniendo en cuenta el flujo neto de agua por protón (escalar α , el contenido de agua en la membrana y el coeficiente de difusión del agua tal como se definen en [8]. Los valores de conductividad de la membrana, son relativamente bajos, y disminuyen de la entrada a la salida de la pila.

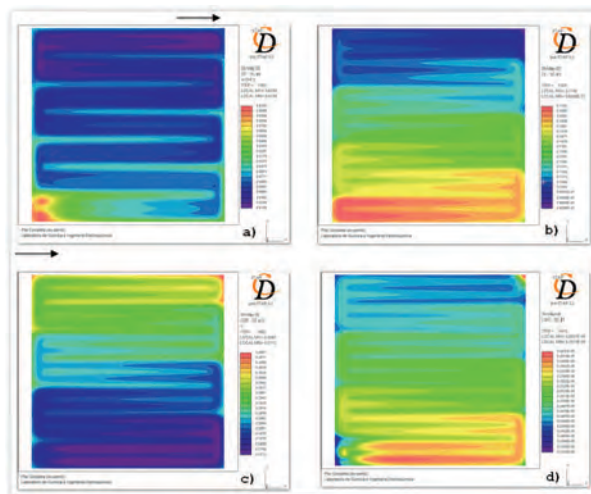


FIG. 1. Valores para el cátodo de: **A)** Distribución de densidad de corriente local ($A\ cm^{-2}$), **B)** fracción másica de oxígeno, **C)** sobrepotencial (V), y **D)** fracción de agua líquida en la MEA.

Los valores de α proporcionan información sobre el proceso dominante en el transporte de agua a través de la membrana [8]. Valores positivos indican predominio de arraste electroosmótico de moléculas de agua desde el ánodo hacia el cátodo, por contra, valores negativos indican la existencia de un transporte por difusión de moléculas de agua desde el cátodo al ánodo. Valores próximos a cero indican un correcto balance de agua en la pila.

En este caso el descenso de la conductividad de la membrana viene acompañado de un descenso de los valores de α , siempre positivos (max. 0.85; min. 0.29). El máximo valor de la conductividad se obtiene a la entrada de la pila, en la que las condiciones de elevada humedad proporcionan una buena hidratación inicial de la membrana. Los puntos de rocío de las corrientes de entrada (ánodo/cátodo; 80/70 °C) son inferiores a la temperatura de la pila, que presenta una distribución uniforme de temperatura.

En la **FIG. 2** se representa un perfil de temperatura correspondiente a la sección transversal de la pila a la salida de la PEMFC. Este perfil de temperatura se han graficado tomando un total de 20 puntos a lo largo del espesor de los canales y la MEA. La temperatura tiende a ser mayor en la entrada, ocasionada por la elevada concentración de hidrógeno y oxígeno aportados en la entrada de la pila. Esta distribución de temperatura es similar a la distribución de corriente local de la **FIG. 1 A)** ya que la velocidad de reacción electroquímica es función de la concentración de reactivos hidrógeno y oxígeno.

En la **FIG. 2** se observa como la temperatura es mayor en las cercanías del catalizador, situándose el pico máximo de temperatura en la región catódica,

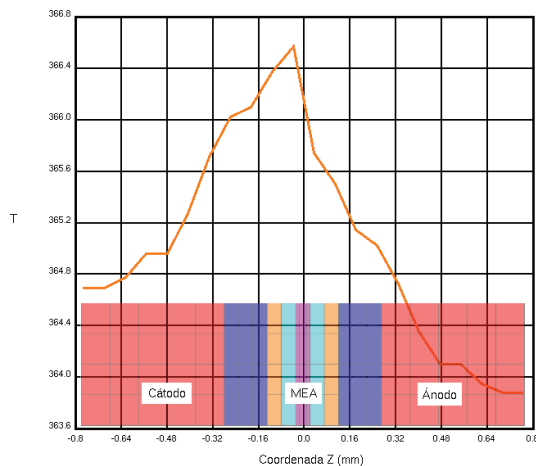


FIG. 2. Perfil de temperatura correspondiente a la sección transversal de la pila a la salida de la PEMFC

hecho relacionado con la emisión que genera la reacción de formación de agua en el cátodo. La diferencia entre la temperatura de la membrana y la máxima temperatura en el canal es de aproximadamente 2°C.

4. CONCLUSIONES

Se ha simulado el comportamiento de una PEMFC combinando herramientas de diseño CAD y técnicas de CFD, utilizando un modelo 3-D en el que se han combinado las ecuaciones de conservación de masa, momento y energía con los procesos electroquímicos que tienen lugar en los electrodos de la pila. Los resultados se han utilizado para discutir algunos de los aspectos más destacados que afectan al diseño de una PEMFC, con el objetivo de mejorar dicho diseño y optimizar su rendimiento.

La metodología que se ha utilizado en este proceso de diseño y simulación se aplicará en el futuro a nuevos prototipos de PEMFC de tipo SFF, con el fin de estudiar la influencia de la geometría de los canales de flujo y de nuevos materiales (MEA, electrocatalizadores, GDLs) en el rendimiento de la pila.

AGRADECIMIENTOS

Los autores de este trabajo agradecen al Gobierno Vasco (Dpto. de Educación, Universidades e Investigación; RC-2008-1-36) a la U.P.V./E.H.U. (Proyecto GIU2006/2008) y al MEC (Proyecto CTQ2006-13163/BQU, fondos FEDER), la ayuda económica prestada para la realización de este trabajo.

BIBLIOGRAFÍA

- 1 N. Djilali. Computational modelling of polymer electrolyte membrane (PEM) fuel cells: Challenges and opportunities. *Energy* 32 (2007) 269-280.
- 2 Sperling D. Cannon JS, (editors). *The hydrogen energy transition*. Elsevier, 2004.
- 3 Stone C., Morrison AE. From curiosity to power to change the world. *Solid State Ionics* 2002; 152:1-13.
- 4 K. Z. Yao et al. A review of Mathematical Models for Hydrogen and Direct Methanol Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cells. *Fuel Cells* 2004, 4, No 1-2.
- 5 Weber AZ., Newman J. Modelling transport in polymer-electrolyte fuel cells. *Chem Rev* 2004; 104:4679-726.
- 6 Shimpalee S., Greenway S., Spuckler D., Van Zee J. Predicting water and current distributions in a commercial size PEMFC. *J Power Sources* 2004;135:79-87.
- 7 S. Shimpalee, J.W. Van Zee. Numerical studies on rib&channel dimension of flow-field on PEMFC performance. *International Journal of Hydrogen Energy* 32 (2007) 842 – 856
- 8 ES-PEMFC methodology and tutorial manual: CD adapco Group, <http://www.adapco.com>.
- 9 S. Shimpalee, J.W. Van Zee, *Int. J. Hydrogen Energy* 32 (7) (2007) 842.
- 10 Star-CD 3.2 Methodology, CD adapco Group, <http://www.adapco.com>.
- 11 A. Pérez Manso, F. F. Marzo, A. R. Pierna, J. Barranco, A. Lorenzo and J. Barroso. Optimización de una Celda de Combustible de Membrana de Intercambio Protónico, PEMFC. *HYCELTEC* 2008 (en prensa).

ANÁLISIS NUMÉRICO DE LA INFLUENCIA DE LOS PARÁMETROS GEOMÉTRICOS DE LA SECCIÓN TRANSVERSAL DEL CANAL DE FLUJO EN UNA PEMFC

A. P. Manso¹, F. F. Marzo², M. Garmendia Mújica¹, A. lorenzo²

¹Dpto. Expresión Gráfica y Proyectos de Ingeniería, ²Dpto. Ingeniería Química y del Medio Ambiente
Universidad del País Vasco, UPV-EHU, Plaza de Europa 1, 20018, San Sebastián, España

RESUMEN: *En este trabajo se analiza de forma numérica la influencia de los parámetros geométricos de la sección transversal del canal de flujo en el funcionamiento de una PEMFC. Se han analizado las distribuciones de velocidad, densidad de corriente, concentraciones de hidrógeno y oxígeno, temperatura y contenido de agua en la membrana para 10 configuraciones geométricas diferentes de la sección transversal del canal de flujo. Se han mantenido constantes el área de la sección transversal de dicho canal (1.06 mm^2) y el área reactiva de una PEMFC (256 mm^2) con canales de flujo de tipo SSF (Serpentine Flow Field). Los resultados obtenidos muestran que el rendimiento de la pila es función de la geometría de la sección transversal de los canales de flujo, con mayor dependencia a valores bajos de potencial, donde la influencia de la velocidad de transporte de masa es predominante. Los modelos con secciones transversales más altas que anchas presentan en general distribuciones de corriente más uniformes, con valores de intensidad máximos y mínimos mayores, distribuciones de temperatura con menores gradientes y un contenido de agua en la membrana superior, lo que permite obtener un mayor rendimiento.*

ABSTRACT: *This paper analyzes the influence of geometric parameters of the cross section of the flow channel in the operation of a PEMFC. We analyze the distributions of velocity, current density, hydrogen and oxygen concentrations, temperature and water content in the membrane for 10 different geometric configurations of the cross section of the flow channel. Have remained constant the cross-sectional area of the channel (1.06 mm^2) and the reactive area of a PEMFC (256 mm^2) with flow channels SSF (Serpentine Flow Field). The results show that the fuel cell performance is a function of the geometry of the cross section of the flow channels, with greater reliance on low values of potential, where the influence of the rate of mass transport is predominant. Models with higher cross sections generally show that broad current distributions more uniform, with values of maximum and minimum intensity higher, distributions of temperature gradients lower and a water content in the membrane higher, allowing for improved performance.*

Palabras clave: PEMFC, Pilas de combustible, Diseño de canales de flujo, Simulación, es-pemfc

Keywords: PEMFC, Fuel cells, Flow-field design, Fuel cell simulation, es-pemfc

1. INTRODUCCIÓN

El rendimiento de una PEMFC depende de múltiples factores, entre los que se incluyen las condiciones de operación, los fenómenos de transporte en el interior de la pila, la cinética de la reacción electroquímica, el ensamblaje de la MEA y la geometría de los canales de flujo [1].

Los canales de flujo en una PEMFC son uno de los componentes clave de una pila de combustible, ya que realiza diferentes funciones esenciales para el buen funcionamiento del sistema: servir de soporte mecánico al stack, mantener separados los diferentes reactantes, distribuir los reactantes a lo largo de la superficie catalizadora, conducir la corriente eléctrica generada o gestionar el agua y el calor producidos en el interior de la pila [2].

Se han realizado diversos estudios sobre el impacto que tienen las diferentes variables

geométricas de los canales de flujo en distintos aspectos del funcionamiento de una PEMFC. Shimpalee et al. analizaron un modelo 3D con canales de flujo en forma de serpiente de 480 cm^2 [3] y otro modelo de 200 cm^2 con diferente número de canales y longitudes [4]. Shimpalee y Van Zee [5] estudiaron numéricamente cómo los canales de flujo con diferentes secciones transversales de canal/rib (espacio entre canales) afectan al rendimiento y distribución de especies en diferentes regímenes de funcionamiento de la PEMFC. D.H. Jean et al. [6] analizaron diferentes configuraciones de canales de flujo (canal simple, canal doble, canal simple cíclico y canales simples simétricos) y su influencia en el funcionamiento de la PEMFC. Sungho Lee et al. [7] estudiaron el efecto de diferentes configuraciones de parámetros geométricos en el funcionamiento de una PEMFC con una configuración de canal simple derecho.

2. PARTE EXPERIMENTAL

Se ha utilizado una técnica de volumen de control basada en un programa comercial, STAR-CD (versión 3.26) [8] junto con el módulo experto para PEMFC (es-pemf versión 2.2) [9] para resolver el modelo matemático basado en el acoplamiento de las ecuaciones de la fluidodinámica (CFD) y procesos específicos de transporte y reacciones electroquímicas de la PEMFC.

En este estudio, continuación de A. P. Manso et al. [10], se han analizado 10 variantes del modelo correspondiente a una pila de combustible con un área reactiva de 256 mm^2 , con placas bipolares con canales de flujo de tipo SSF (Serpentine Flow Field). En todos los casos se ha mantenido constante la sección transversal del canal de flujo (1.06 mm^2), la anchura del rib o separación entre canales (1.33 mm), el área reactiva (256 mm^2) y las condiciones de operación. La longitud del canal de flujo es diferente en cada modelo para mantener la sección reactiva constante. En la **Tabla 1** se muestran los parámetros de diseño de los diferentes modelos analizados.

Tabla 1. Parámetros de diseño de los canales de flujo. C_H : Altura del canal, C_W : Anchura del canal, C_L : Longitud del canal, L_y : Anchura del área reactiva, L_x : longitud del área reactiva.

		Canal de flujo			MEA	
Sección Transversal	Modelo	C_H (mm)	C_W (mm)	C_L (mm)	L_y (mm)	L_x (mm)
Pos. horizontal	06/10	0.80	1.33	93.3	8	32
	05/12	0.67	1.60	84.6	8.8	29.1
	04/15	0.53	2	74.1	10	25.6
	03/20	0.40	2.66	61.3	12	21.33
	02/30	0.27	4	45.3	16	16
Pos. vertical	10/06	1.33	0.80	117.3	6.4	40
	12/05	1.60	0.67	125.3	6	42.67
	15/04	2	0.53	134.5	5.6	45.72
	20/03	2.66	0.40	145	5.2	49.23
	30/02	4	0.27	157.3	4.8	53.33

En la **Tabla 2** se representan las condiciones de operación de ánodo y cátodo para una intensidad de corriente media de $I_{\text{avg}} = 0.6 \text{ A cm}^{-2}$.

Tabla 2. Condiciones de operación. $I_{\text{avg}} = 0.6 \text{ A cm}^{-2}$.

	Ánodo	Cátodo
Flujo másico (kg s^{-1})	1.769E-08	1.002E-06
Velocidad (m s^{-1})	4.424E-01	1.316
Coefficiente estequiométrico	1.2	2
Temperatura ($^{\circ}\text{C}$)	80	70
Humedad relativa (%)	100	100

3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En la **Fig. 1 a)** se muestran las curvas de polarización correspondientes a los modelos con secciones transversales de canal de flujo en posición horizontal ($C_H < C_W$). Para voltajes de operación superiores a 0.7 V , la geometría de los canales de flujo no tiene influencia significativa, ya que a estos potenciales la velocidad de reacción electroquímica es baja con poco consumo de reactivos y poca producción de agua. Sin embargo, por debajo de 0.7 V se aprecian diferencias significativas entre las curvas de polarización.

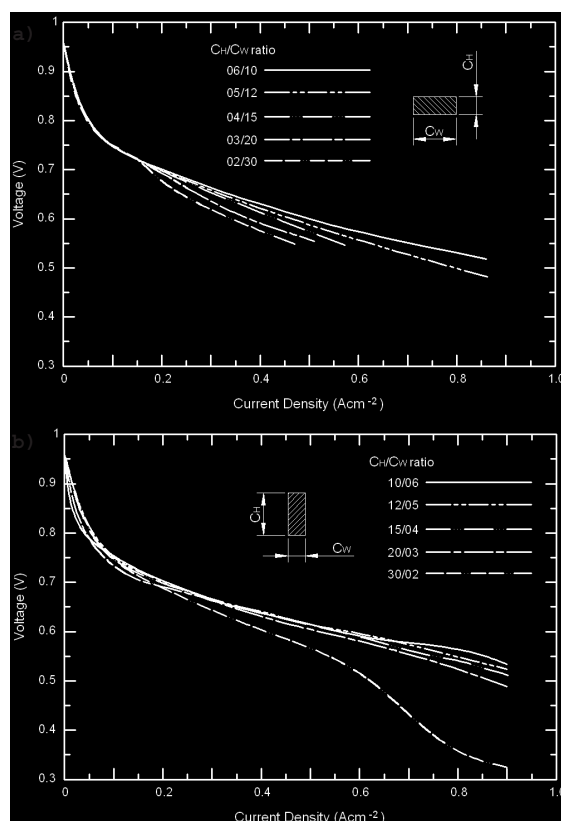


Fig. 1. Curvas de polarización: a) Modelos con sección en posición horizontal (06/10, 05/12, 04/15, 03/20 y 02/30); b) Modelos con sección en posición vertical (10/06, 12/05, 15/04, 20/03 y 30/02).

En la **Fig. 1 b)** se muestran las curvas obtenidas para los modelos con secciones transversales de canal de flujo en posición vertical ($C_H > C_W$). Se observa que en la zona de control cinético, para potenciales de operación superiores a 0.75 V , existen ligeras diferencias entre los diferentes modelos. En la zona de control óhmico, a medida que desciende el potencial de operación el comportamiento de los diferentes modelos es similar, salvo el modelo 30/02 que presenta diferencias muy significativas. En la zona limitada por la transferencia de masa, para potenciales

inferiores a 0.6 V, las diferencias entre las curvas de polarización son mayores, siendo el modelo 10/06 el que mejor comportamiento presenta.

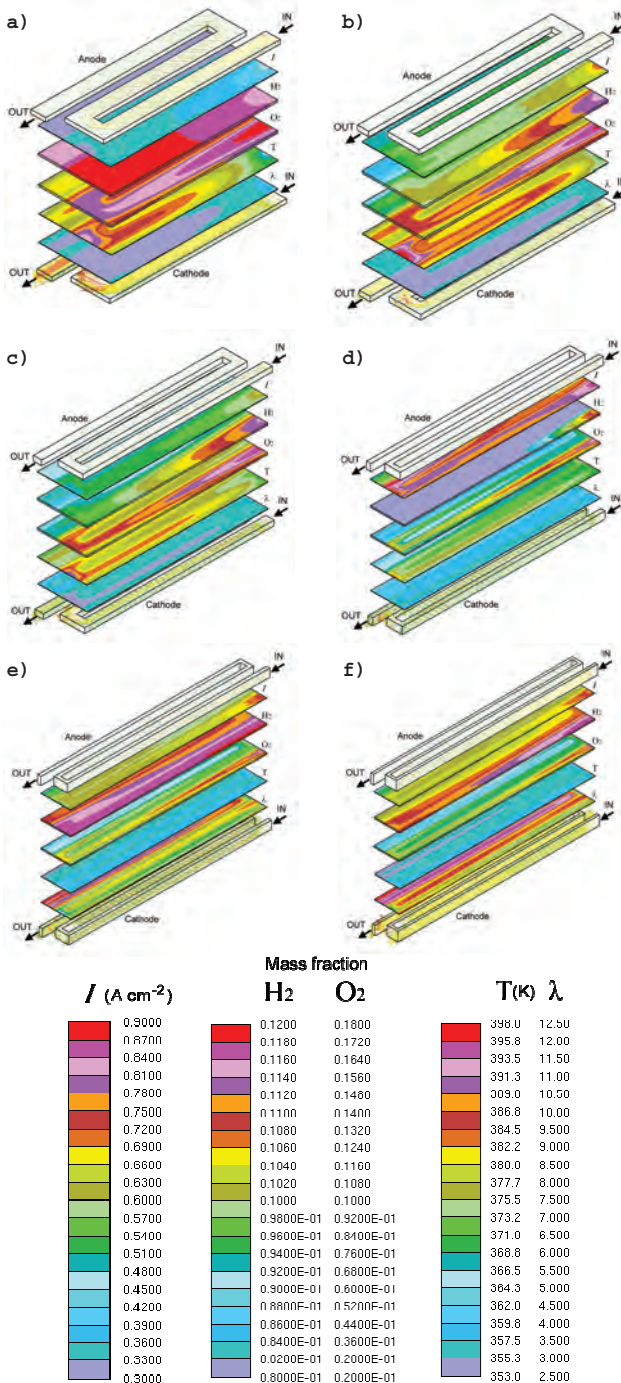


Fig. 2. Distribuciones de velocidad en los canales de flujo en ánodo y cátodo, densidad de corriente en la membrana: I (A cm⁻²), fracción molar de hidrógeno en la GDL anódica: H₂, fracción molar de oxígeno en la GDL catódica: O₂, distribución de temperatura en la membrana: T (K) y contenido neto de agua de la membrana: λ , para los modelos: a) 04/15; b) 05/12; c) 06/10; d) 10/06; e) 12/05; f) 15/04. $I_{avg} = 0.6$ A cm⁻².

En la **Fig. 2** se muestran las distribuciones de velocidad en los canales anódicos y catódicos, la distribución de la densidad de corriente en la membrana, I (A cm⁻²), las distribuciones de las fracciones másicas de hidrógeno y oxígeno en las GDL anódica y catódica respectivamente, la distribución de la temperatura en la membrana, T (K) y el contenido neto de agua en la membrana, λ (lambda), para los modelos 04/15, 05/12, 06/10, 10/06, 12/05 y 15/04.

Se puede observar que en los modelos con secciones más anchas que altas ($C_H < C_W$) la distribución de corriente es menos uniforme y con valores máximos y mínimos menores, la distribución de temperatura presenta mayores gradientes y valores más altos, y el contenido de agua en la membrana se mantiene en valores bajos ($2.4 < \lambda < 4.2$). Esto se produce porque los reactivos húmedos a la entrada llegan perfectamente a las zonas de reacción, provocando un aumento de la densidad de corriente en esa zona. En consecuencia, el arrastre electro-osmótico es mayor que el flujo difusional del cátodo hacia el ánodo, haciendo disminuir el contenido neto de agua de la membrana (λ) y generando un descenso de la densidad de corriente a lo largo del canal [4, 12, 13]. En estos casos, aunque la concentración de hidrógeno y oxígeno es muy homogénea en toda la superficie reactiva, la falta de una adecuada hidratación de la membrana impide el flujo protónico. En los tres casos, 04/15, 05/12 y 06/10, a lo largo del canal de flujo, en los cambios de dirección aparecen zonas “muertas” con perfil de velocidades reducido. Esto provoca que en esas zonas la evacuación del calor producido sea más complicada, produciéndose aumentos de temperatura local (valores entre 110 °C y 125 °C) que crean pequeñas áreas de deshidratación en la membrana ($\lambda < 2.6$). En estas zonas la conductividad protónica es muy reducida, aumentando la resistencia óhmica y, como consecuencia, reduciendo el rendimiento de la pila. También se observa que la concentración de hidrógeno y oxígeno en esas zonas no disminuye, ya que no se genera corriente. Además de la caída del rendimiento global de la pila, la aparición de estos puntos calientes podría dar lugar a tensiones en la membrana y reducir el tiempo de vida de la misma. A medida que la sección del canal es más estrecha y más alta, el efecto descrito anteriormente es menor.

En cuanto a los modelos con secciones más altas que anchas ($C_H > C_W$), en general la distribuciones de corriente son más uniformes y con valores máximos y mínimos mayores, las distribuciones de temperatura presentan menores gradientes y valores máximos y mínimos menores (entre un 3% y un 8%), y las distribuciones del contenido de agua en las membranas se mantienen en valores superiores

($3.3 < \lambda < 12.8$) en comparación con los modelos 04/15, 05/12 y 06/10.

De los tres modelos analizados: 10/06, 12/05 y 15/04, el modelo 10/06 es el que presenta valores de intensidad de corriente mayores, aunque el valor disminuye a lo largo del canal conforme se reduce la concentración de reactivos. Las temperaturas sobre la membrana son más altas, alcanzándose los 110 °C en los puntos más calientes (cambios de dirección). El contenido neto de agua en la membrana se mantiene en valores: $3.3 < \lambda < 8.4$.

Los modelos 12/05 y 15/04 presentan comportamientos muy similares entre sí, con distribuciones de corriente más homogéneas pero con valores entre un 15% y un 20% inferiores al modelo 10/06; la temperatura en la membrana se mantiene por debajo de 90 °C y el contenido de agua en la membrana ($5 < \lambda < 12.8$) es mayor y presenta distribuciones más homogéneas. Estos dos modelos presentan concentraciones de reactivos a la salida de la pila superiores a las del modelo 10/06, lo que indica una pérdida de eficiencia en la utilización del oxígeno. Esto puede ser debido a que los modelos 12/05 y 15/04, por la geometría de sus canales más altos y estrechos, presentan una mayor dificultad al transporte de reactivos hasta la capa catalítica, reduciendo la reacción electroquímica y, por consiguiente, la densidad de corriente y el rendimiento global de la pila. Por el contrario, esta reducción de la reacción electroquímica favorece una adecuada hidratación de la membrana y un gradiente de temperatura menor, lo que ayudaría a prolongar la vida útil de la misma.

4. CONCLUSIONES

Los modelos con secciones más anchas que altas ($C_H < C_W$) presentan distribuciones de corriente menos uniformes, con valores de intensidad máximos y mínimos menores, distribuciones de temperatura con mayores gradientes y valores más altos, y un bajo contenido de agua en la membrana, lo que determina un rendimiento global menor.

Por el contrario, los modelos con secciones más altas que anchas ($C_H > C_W$) presentan distribuciones de corriente más uniformes, con valores de intensidad máximos y mínimos mayores, distribuciones de temperatura con menores gradientes y valores más bajos, y un contenido de agua en la membrana superior, lo que permite obtener un mayor rendimiento. De entre estos modelos, el 10/06 y 12/05 son los que mejor combinación de variables presentan, como demuestran sus curvas de polarización.

En la práctica, el diseño de una PEMFC a menudo se reduce al diseño de las placas bipolares,

que a su vez es básicamente el diseño de canales de flujo. Mejoras en el diseño de los canales de flujo de las placas bipolares pueden ayudar a alcanzar los objetivos fijados de costes y de funcionamiento para la comercialización de PEMFC.

Agradecimientos

Los autores agradecen a la Escuela Universitaria Politécnica de Donostia-San Sebastián de la Universidad del País Vasco y a la Exma. Diputación Foral de Gipuzkoa (OF 94/2008) la ayuda económica prestada para la realización de este trabajo. Así mismo, al Servicio General de Informática Aplicada a la Investigación (SGI/IZO-SGIker) de la UPV/EHU por los recursos de cómputo disponibles para el desarrollo de este trabajo (Licencias para el software STAR-CD 3.26 y cluster Arina).

Bibliografía

- [1] Hoogers Gregor: Fuel Cells technology handbook, USA. 2003
- [2] Xianguo Li, Imran Sabir, International Journal of Hydrogen Energy 30 (2005) 359-371.
- [3] S. Shimpalee, S. Greenway, D. Spuckler, J.W. Van Zee, J Power Sources 135 (2004) 79-87.
- [4] S. Shimpalee, S. Greenway, J.W. Van Zee, J Power Sources 160 (2006) 398-406.
- [5] S. Shimpalee, J.W. Van Zee, International J. of Hydrogen Energy 32 (2007) 842 - 856
- [6] D. H. Jeon, S. Greenway, S. Shimpalee, J.W. Van Zee, International J. of Hydrogen Energy 33 (2008) 1052 - 1066.
- [7] Sungho Lee, Heeseok Jeong, Byungki Ahn, Taewon Lim, Youngjin Son, International J. of Hydrogen Energy 33 (2008) 5691 - 5696.
- [8] Star-CD 3.2 Methodology, CD adapco Group, <http://www.adapco.com>.
- [9] ES-PEMFC Methodology and Tutorial Manual, CD adapco Group, <http://www.adapco.com>.
- [10] A. P. Manso, F. F. Marzo, J. of New Materials for Electrochem. Systems 12, 133-137 (2009)
- [12] F. N. Buchi, G. G. Scherer, J. Electrochem. Soc. 148 (2001) A183 - A188.
- [13] F. N. Buchi, S. Srinivasan, J. Electrochem. Soc. 144 (1997) 2767 - 2772.

Diseños alternativos a los canales de flujo de tipo serpentín (SSF) en el diseño de placas para pilas tipo PEM

A. P. Manso^{1,*}, F. F. Marzo², M. Garmendia¹ y J. Barranco³

¹ University of Basque Country, Graphic expression and Engineering Projects department
Plaza Europa 1, 20018 – San Sebastián (Spain)

² University of Basque Country, Chemical Engineering and Environment Department
Plaza Europa 1, 20018 – San Sebastián (Spain)

³ University of Zaragoza, Department of Mechanical Engineering
Maria de Luna 3, 50018 – Zaragoza (Spain)

(*) corresponding author: angel.perez@ehu.es

Keywords: PEMFC; Fuel cell, Flow-field design, Simulation, es-pemfc

1 Introducción

Los canales de flujo en una PEMFC, que se utilizan para aportar el combustible (hidrógeno) al ánodo y el oxígeno al cátodo, están integrados en las placas bipolares. Éstas son uno de los componentes clave de una pila de combustible, ya que realiza diferentes funciones esenciales para el buen funcionamiento del sistema: servir de soporte mecánico al stack, mantener separados los diferentes reactantes, distribuir los reactantes a lo largo de la superficie catalizadora, conducir la corriente eléctrica generada o gestionar el agua y el calor producidos en el interior de la pila. Algunas de estas funciones están más asociadas a las propiedades fisicoquímicas del material. Otras, en cambio, están íntimamente ligadas a la geometría de los canales de flujo [1].

Un diseño apropiado de los canales de flujo de una PEMFC permitirá potenciar las velocidades de transporte de reactivo en el propio canal así como en la GDL (Gas Diffusion Layer) antes de alcanzar la capa catalítica, donde tiene lugar la reacción. También será beneficioso en la gestión de agua del cátodo, con el fin de que se elimine de forma adecuada. Además, una distribución homogénea del gas en el canal de flujo, proporcionará a su vez, una densidad de corriente homogénea en toda el área reactiva y, por tanto, una distribución uniforme de la temperatura, que ocasionará menos tensiones mecánicas en la MEA, prolongando la vida útil de la PEMFC.

Considerando que, a pesar de que el coste total de fabricación de los diferentes elementos que componen una pila de tipo PEM se ha ido reduciendo paulatinamente a lo largo de los últimos años, el coste de las MEAs representa casi el 70% del coste total de un stack [2], la vida útil de la MEA es una variable importante sobre la que se puede actuar para aumentar el rendimiento global del sistema.

Se han realizado diversos estudios sobre el impacto que tienen las diferentes variables geométricas de los canales de flujo en distintos aspectos del funcionamiento de una PEMFC. Yoon et al. analizaron el efecto de diferentes configuraciones de canal/rib en el rendimiento de una PEMFC [3]. Ferng et al. analizaron el efecto de diferentes configuraciones de canales de flujo en una monocelda de 25 cm² [4]. Sungho Lee et al. [5] estudiaron el efecto de diferentes configuraciones de parámetros geométricos en el funcionamiento de una PEMFC con una configuración de canal simple derecho. Recientes estudios analizan la influencia de la configuración de la sección transversal del canal de flujo [6,7] y el efecto de la posición relativa de los flujos en el ánodo y cátodo [8,9].

También se han analizado multitud de diseños diferentes para los canales de flujo de las placas (tipo pin, canales paralelos en serie, canal en forma de serpentín, canales interdigitados, canales en espiral, canales integrados con canales de refrigeración, etc.) [10]. Muchos de estos diseños no permiten una distribución homogénea de la concentración de los reactivos sobre las capas catalíticas, lo que se traduce en un funcionamiento desigual del sistema a lo largo de la MEA.

En este estudio se han analizado dos modelos geométricos diferentes de canales de flujo: Un nuevo modelo (Mod #1) con canales de flujo de tipo HDFF (homogeneous distribution flow field), basado en un diseño de placa para pila de combustible con cámara de distribución de reactivo (Solicitud de patente nº P201130022) y otro modelo de geometría (Mod #2) con canales de flujo de tipo SFF (Serpentine Flow Field) como referencia para hacer una comparativa. El objetivo de este estudio es comparar los resultados de los análisis numéricos de ambas geometrías e investigar sobre la influencia que pueden tener en el rendimiento de la PEMFC.

2 Experimental

2.1 Modelo matemático

Se ha utilizado una técnica de volumen de control basada en un programa comercial, STAR-CD (versión 3.26) junto con el módulo experto para PEMFC (es-pemf versión 2.2) [11] para resolver el modelo matemático basado en el acoplamiento de las ecuaciones de la fluidodinámica (CFD) y procesos específicos de transporte y reacciones electroquímicas de la PEMFC.

2.2 Geometría y operación

Los modelos analizados tienen un área reactiva de 12 cm² y condiciones de funcionamiento idénticas. El modelo Mod #1 se compone de dos unidades básicas paralelas que permiten un reparto previo de los reactivos antes de entrar en la zona de canales de flujo, donde entran en contacto con las respectivas zonas catalíticas. El flujo de los reactivos sobre la MEA es en contracorriente como se aprecia en la figura 1. El modelo Mod #2, con canales de flujo de tipo SFF, consiste en un único canal de 1.44 mm² de sección transversal que recorre todo el área reactiva. En este modelo, los flujos en ánodo y cátodo circulan en paralelo. La figura 2 muestra el modelo con canales de flujo de tipo SFF (Serpentine Flow Field) analizado. Los flujos máxicos y las fracciones molares se han calculado tanto para el ánodo como para el cátodo fijando la densidad de corriente y la estequiometría (1.2/2.0) a unas condiciones de humidificación (100%) y de presión a la salida (1 atm) dadas. La presión de operación es una atmósfera y la temperatura de la pila se ha mantenido constante a 70 °C. En la tabla 2 se representan las condiciones de operación de ánodo y cátodo utilizadas en el análisis numérico de ambos modelos.

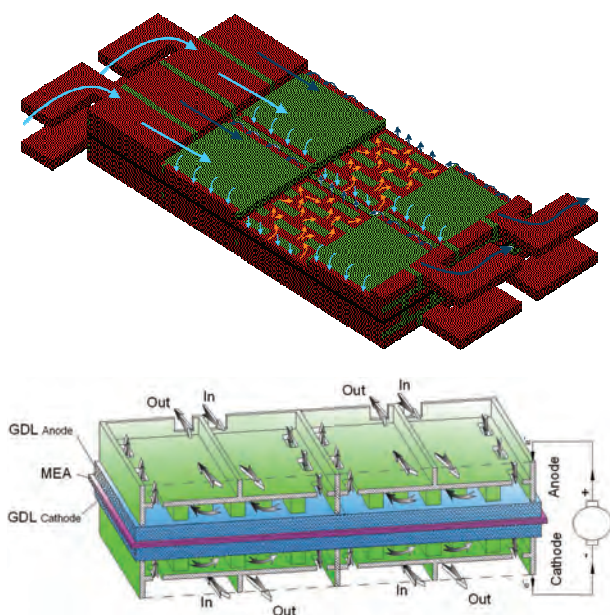


Fig. 1. Modelo tridimensional y esquema de funcionamiento (Mod #1).

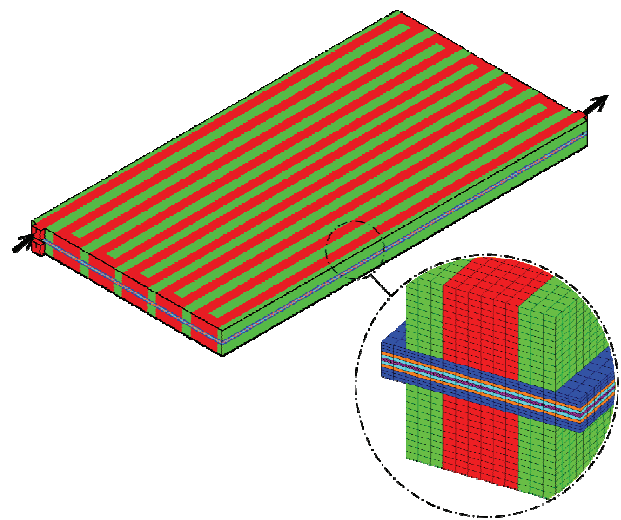


Fig. 2. Modelo con canales de flujo de tipo Serpentine Flow Field (Mod #2).

Tabla 1. Condiciones de operación.

Ánodo (H ₂)	
Coefficiente estequiométrico	1.2
Temperatura de entrada (°C)	80
Humedad relativa (%)	100
Cátodo (Aire)	
Coefficiente estequiométrico	2
Temperatura de entrada (°C)	70
Humedad relativa (%)	100
Condiciones de operación	
Presión a la entrada (kPa)	101
Presión a la salida (kPa)	101
Temperatura de operación (°C)	70

3 Resultados

Para investigar la influencia que tienen ambas geometrías en el rendimiento global de la pila, se presentan los resultados globales junto con los datos observados en diferentes variables electroquímicas sobre la membrana a 0.6 A·cm⁻².

La figura 3 muestra las curvas de polarización para ambas geometrías. Aunque para ambos modelos se observan mínimas diferencias en el comportamiento global, es la geometría con canales de tipo SFF la que presenta mejor comportamiento.

En las figuras 4, 5, 6, 7 y 8, se presenta la distribución de la densidad de corriente en la superficie de la MEA, el contenido neto de agua en la membrana (λ), el flujo neto de agua por protón a través de membrana (α), la distribución de temperatura en la superficie de la MEA y las distribuciones de la fracción másica de oxígeno en la GDL catódica, respectivamente. En el pie de las figuras

se indican los valores máximos y mínimos para cada variable y modelo.

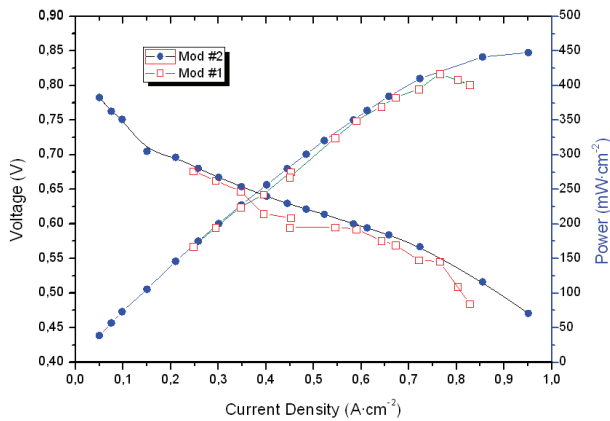


Fig. 3. Curvas de polarización y potencia para los modelos Mod #1 y Mod #2.

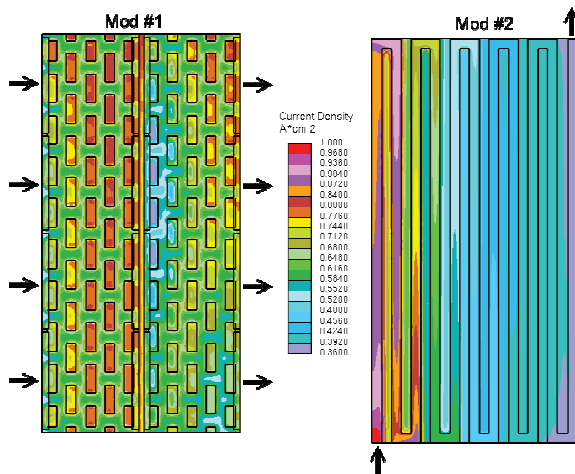


Fig. 4. Densidad de corriente en la membrana ($A \cdot cm^{-2}$). $I_{avg} = 0.6 A \cdot cm^{-2}$. (Mod #1: $I = 0.25 \div 0.84 A \cdot cm^{-2}$, Mod #2: $I = 0.3 \div 1 A \cdot cm^{-2}$)

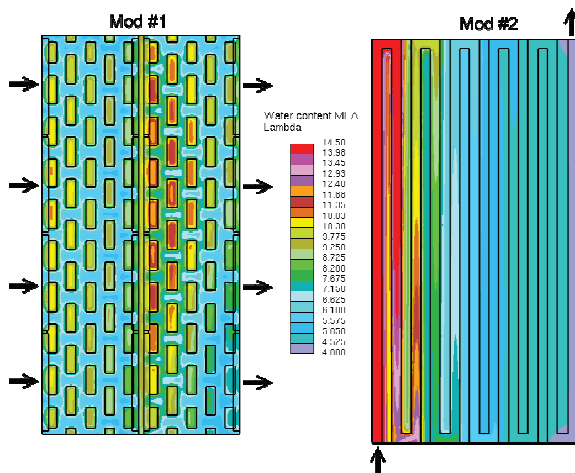


Fig. 5. Contenido neto de agua en la membrana (λ). $I_{avg} = 0.6 A \cdot cm^{-2}$. (Mod #1: $\lambda = 5.1 \div 12.4$, Mod #2: $\lambda = 4 \div 15$)

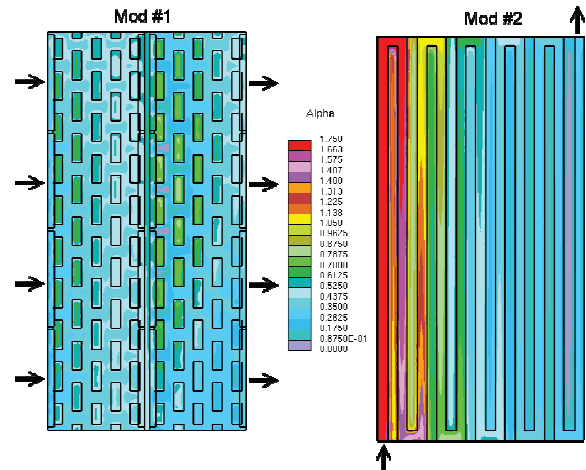


Fig. 6. Flujo neto de agua por protón a través de la MEA (α). $I_{avg} = 0.6 A \cdot cm^{-2}$. (Mod #1: $\alpha = 0.16e^{-3} \div 0.81$, Mod #2: $\alpha = 0 \div 1.74$)

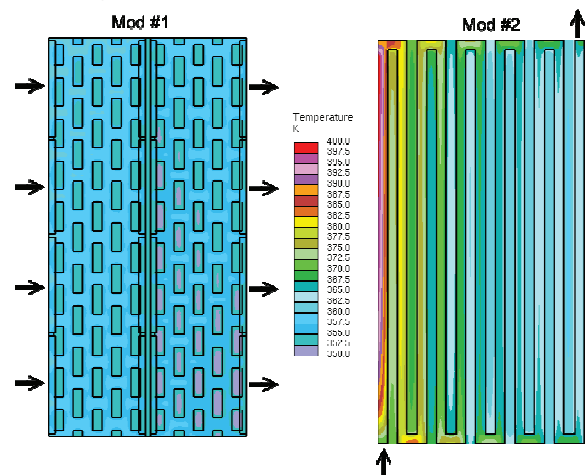


Fig. 7. Temperatura en la superficie de la membrana (K). $I_{avg} = 0.6 A \cdot cm^{-2}$. (Mod #1: $T = 351.7 \div 362.3 K$, Mod #2: $T = 359.4 \div 400 K$)

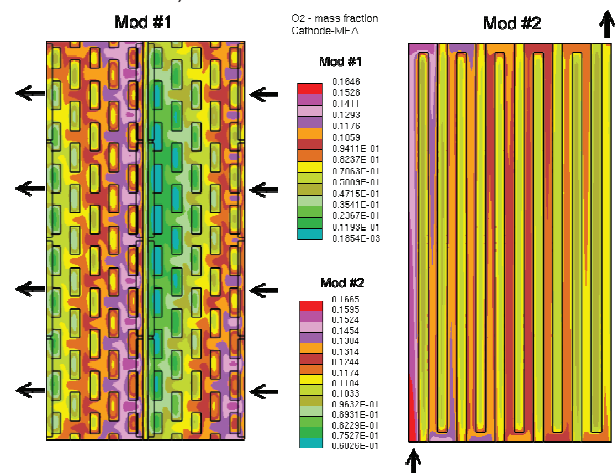


Fig. 8. Fracción mática de O_2 en la GDL catódica. $I_{avg} = 0.6 A \cdot cm^{-2}$.

4 Discusión

El modelo Mod #1 presenta valores de densidad de corriente máxima y mínima menores que el Mod #2. En la primera unidad básica se observa que la densidad de corriente es mayor en las zonas bajo rib que en la zona de canales. El contenido neto de agua en la membrana (λ) también es mayor en estas zonas. Esto es debido a que la

evacuación del calor producido por la reacción en la zona catalítica es más rápida a través del material de la placa que a través del canal de flujo. Por tanto, la temperatura en la superficie de la MEA bajo los ribs es menor que bajo los canales.

El contenido de agua en la membrana está directamente relacionado con la conductividad protónica de la MEA, de tal manera que un contenido de agua alto conlleva una conductividad protónica alta. Así, en las zonas bajo ribs la conductividad protónica es mayor, donde el flujo neto de agua por protón (α) también es mayor, reflejando que en el transporte de agua el efecto de arrastre electro-osmótico es predominante.

En la segunda unidad básica del Mod #1 se observa una zona con valores bajos de densidad de corriente que reflejan un menor arrastre electro-osmótico (valores bajos del parámetro α). En esta zona, el alto contenido de agua en la MEA junto con los valores de densidad de corriente bajos podrían indicar la aparición de "flooding".

El modelo Mod #2 presenta valores de densidad de corriente máximo y mínimo superiores pero una distribución menos homogénea. En la zona cercana a la entrada se refleja una gran actividad electroquímica, con valores de densidad de corriente, temperatura, contenido de agua (λ), flujo neto de agua por protón (α) elevados, aumentando el rendimiento local. Esto puede ser debido a la coincidencia de las máximas concentraciones de hidrógeno y oxígeno a la entrada en un modelo con flujo paralelo.

A medida que se avanza en el recorrido del canal, todas las variables anteriormente mencionadas presentan valores cada vez más bajos como consecuencia de la disminución de la actividad electroquímica. Esta disminución tiene su origen en el descenso de la fracción másica de oxígeno en el cátodo.

5 Conclusiones

El modelo Mod #1 presenta menores valores de intensidad de corriente que el modelo Mod #2. Por el contrario, las distribuciones de intensidad de corriente, contenido de agua (λ), flujo neto de agua por protón (α) y temperatura son más homogéneas en el modelo Mod #1. Las variaciones en la densidad de corriente causan variaciones locales en la temperatura (facilitando la aparición de puntos calientes), en la concentración de agua y en la conductividad de la membrana. Estas inhomogeneidades causan tensiones mecánicas en el sistema que podrían ser la causa de la reducción de la vida útil de la MEA.

La caída de presión calculada en el cátodo es mucho menor en el modelo Mod #1 que en el Mod #2 y este exceso de presión dentro de la pila también puede producir tensiones en las placas bipolares, juntas, GDLS y MEA, haciendo necesaria más energía para la bomba de impulsión en el cátodo.

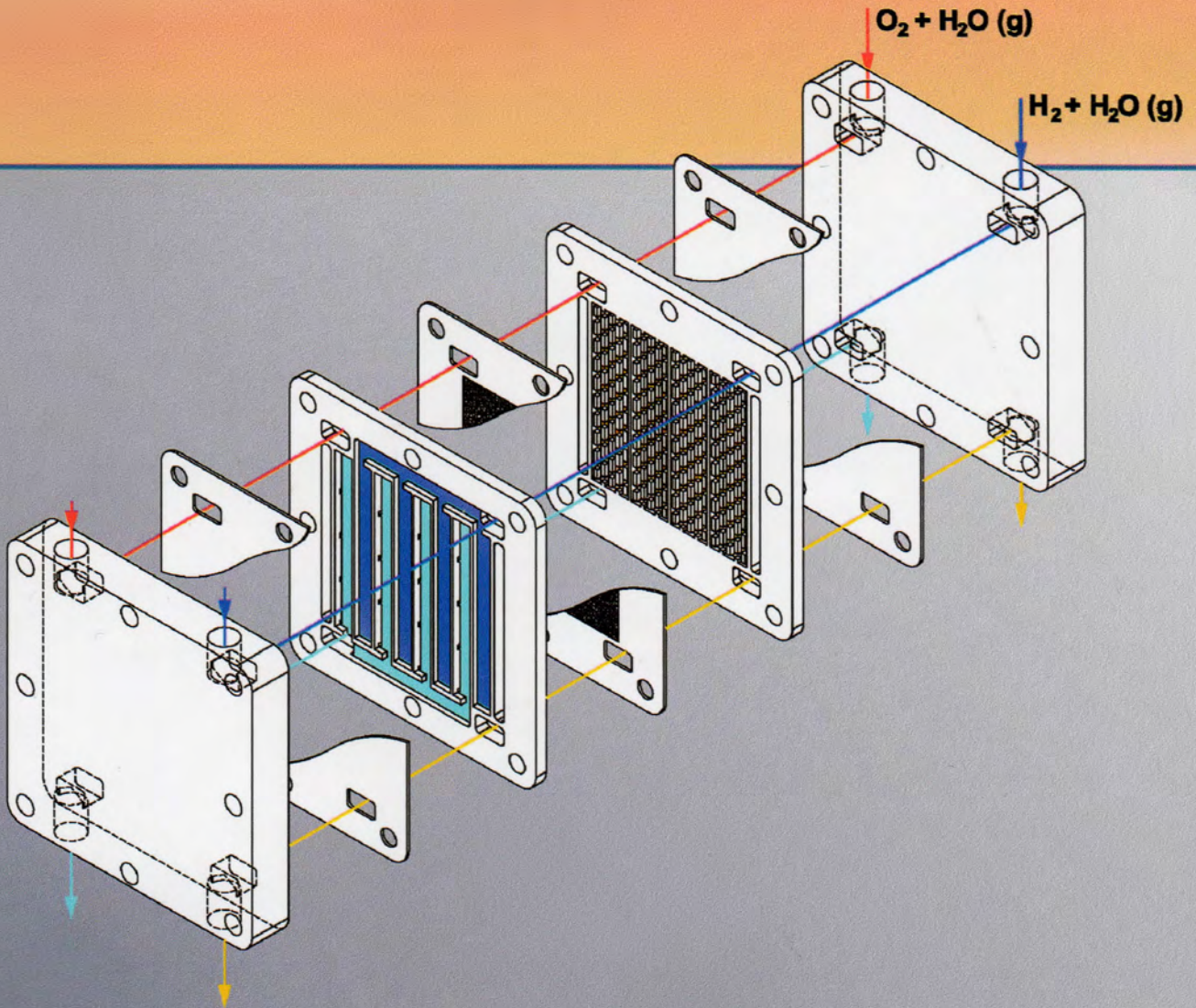
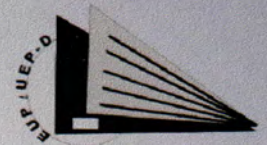
La nueva geometría del modelo Mod #1 optimiza el rendimiento, la eficiencia y aumenta la durabilidad de la MEA frente a la geometría con canales del tipo SFF.

6 Agradecimientos

Los autores agradecen a la Escuela Universitaria Politécnica de Donostia-San Sebastián de la Universidad del País Vasco la ayuda económica prestada para la realización de este trabajo, al Servicio General de Informática Aplicada a la Investigación (SGI/IZO-SGIker) de la UPV/EHU por los recursos de cómputo utilizados (Licencias para el software STAR-CD 3.26 y cluster Arina). Asimismo, al Laboratorio de Investigación en Tecnologías de la Combustión (LITEC-CSI) por su inestimable colaboración.

7 Referencias

- 1 Xianguo Li, Imran Sabir, *International Journal of Hydrogen Energy* 30 (2005) 359-371.
- 2 J. Sinha, S. Lasher, Y. Yang, *Direct Hydrogen PEMFC Manufacturing Cost Estimation for Automotive Applications*, DOE Annual Merit Review, Arlington, VA, May 21, 2009
- 3 Yoon, Young Gi; Lee, Won Yong; Park, Gu Gon; Yang, Tae Hyun; Kim, Chang Soo, *Effects of channel and rib widths of flow field plates on the performance of a PEMFC*, *International Journal of Hydrogen Energy* 30 (2005) 1363-1366.
- 4 Yuh Ming Ferng, Ay Su, *A three-dimensional full-cell CFD model used to investigate the effects of different flow channel designs on PEMFC performance*, *International Journal of Hydrogen Energy* 30 (2005) 4466-4476.
- 5 Sungho Lee, Heeseok Jeong, Byungki Ahn, Taewon Lim, Youngjin Son, *Parametric study of the channel design at the bipolar plate in PEMFC performances*, *International Journal of Hydrogen Energy* 33 (2008) 5691 - 5696.
- 6 A.P. Manso, F.F. Marzo, M. Garmendia, J. Barranco, *Numerical analysis of the influence of the channel cross-section aspect ratio on the performance of a PEM fuel cell with serpentine flow field design*, *International Journal of Hydrogen Energy*, (In press).
- 7 Kap-Seung Choi, Hyung-Man Kim, Sung-Mo Moon, *Numerical studies on the geometrical characterization of serpentine flow-field for efficient PEMFC*, *International Journal of Hydrogen Energy* 36 (2011) 1613-1627.
- 8 Arnaud Morin, Feina Xu, Gérard Gebel, Olivier Diat, *Influence of PEMFC gas flow configuration on performance and water distribution studied by SANS: Evidence of the effect of gravity*, *International Journal of Hydrogen Energy* 36 (2011) 3096-3109.
- 9 Luis Valiño, Radu Mustata, María Isabel Gil, Jesús Martín, *Effect of the relative position of oxygen-hydrogen plate channels and inlets on a PEMFC*, *International Journal of Hydrogen Energy* 35 (2010) 11425-11436.
- 10 Xianguo Li, Imran sabir, *Review of bipolar plates in PEM fuel cells: Flow-field designs*, *Journal of Hydrogen Energy* 30 (2005) 359-371
- 11 ES-PEMFC Methodology and Tutorial Manual, CD adapco Group, <http://www.adapco.com>.



LABORATORIO DE QUÍMICA INDUSTRIAL E INGENIERÍA ELECTROQUÍMICA



LITEC

Laboratorio de Investigación en Tecnologías de la Combustión

Eurotécnica



TALLERES MECANICOS Manuel Echeverría, S.A.



Gipuzkoako Foru Aldundia Diputación Foral de Gipuzkoa



sgiker