

Simulación de una pila PEMFC "air-breathing" utilizando el código OpenFOAM

Norbert Weber¹, Paloma Ferreira-Aparicio², Antonio M. Chaparro²

¹Helmholtz-Zentrum Dresden – Rossendorf (Alemania)

²Dep. de Energía, CIEMAT (España)

Con formato: Inglés (Estados Unidos)

RESUMEN: *Estamos utilizando el código abierto OpenFOAM para simular el funcionamiento de una pila de combustible de tipo PEMFC de interés para aplicaciones portátiles que funcionan con hidrógeno. En la misma, el cátodo "air-breathing" funciona con aire ambiental sin requerir elementos convectivos. El ánodo funciona con una presión estática de hidrógeno, en modo "dead-end", y permite la permeación del agua producida por medio de una membrana hidrofílica, lo que le lleva a un funcionamiento con estequiometría $\lambda=1.0$. Este tipo de pila ha sido desarrollada en el CIEMAT para pequeñas aplicaciones portátiles en las que el peso y volumen del sistema deben reducirse al mínimo necesario, mientras que el aprovechamiento de hidrógeno debe maximizarse. Originariamente desarrollada para pilas de combustible de óxido sólido, la aplicación del código openFuelCell en pilas de tipo PEMFC es una actividad novedosa. El programa que se está desarrollando nos permitirá conocer aspectos esenciales del funcionamiento de la pila, como la curva de polarización, transporte de agua líquida, distribución de temperaturas, y distribución del calor generado.*

ABSTRACT: *The open-source CFD code OpenFOAM is being used to simulate the operation conditions of a proton exchange membrane fuel cell (PEMFC), with an 'air-breathing' cathode. The fuel cell operates with ambient air without additional convective elements. The anode works in dead-end mode using a static H_2 pressure of 0.5bar, and with a hydrophilic membrane to allow for the evacuation of liquid water. This mode allows for 100% hydrogen consumption in the electrochemical reaction, i.e. $\lambda=1.0$. This fuel cell type is being developed in CIEMAT and applied to small portable applications where extra weight and volume must be minimised, while maximizing hydrogen utilization. Being originally developed for solid oxide fuel cells, the openFuelCell model is extend to PEMFC for the first time. It will provide basic knowledge of this special fuel cell configuration, essential characteristics of its performance reflected by the polarization curve, liquid water transport, temperature inhomogeneities, and heat transport.*

Palabras clave: Simulación, PEMFC, hidrógeno, OpenFOAM.

Keywords: Simulation, PEMFC, hydrogen, OpenFOAM.

1. INTRODUCCIÓN

La aplicación de pilas de combustible poliméricas (PEMFC) en dispositivos portátiles puede contribuir a mejorar el rendimiento, la seguridad, el tiempo de recarga, y la autonomía de los mismos. A medida que aumentan los requerimientos de potencia y energía, el uso de pila PEMFC con hidrógeno almacenado aumenta las prestaciones con respecto del uso de baterías. Sin embargo, la mejora de la portabilidad de la pila PEMFC requiere de una serie de modificaciones en su arquitectura, con respecto de las configuraciones convencionales [1].

El Grupo de Pilas de Combustible de Baja temperatura del CIEMAT desarrolla dentro del proyecto E-LIG-E, una nueva configuración de pila PEMFC con objeto de mejorar sus prestaciones en aplicaciones portátiles con hidrógeno con potencias eléctricas de hasta unas pocas decenas de vatios. Las modificaciones más significativas en la nueva configuración las constituyen un ánodo cerrado ("dead-end") que además es permeable al agua, y un cátodo "air-breathing", capaz de un funcionamiento pasivo sin elementos convectivos para entrada de aire. El ánodo puede funcionar consumiendo el 100% del hidrógeno de entrada, sin purgas ($\lambda=1.0$), lo que aumenta el rendimiento y autonomía de la aplicación. Por su parte, el cátodo "air-breathing" requiere un mínimo subsistema, sin consumo parásito [2].

Las condiciones de funcionamiento de los electrodos desarrollados para esta pila son extraordinariamente exigentes en comparación con los electrodos convencionales. La principal dificultad proviene del transporte pasivo de reactivos y agua líquida, que tiene lugar por fuerzas naturales, como la difusión, evaporación, y la fuerza capilar, a través de medios porosos y sobre la superficie de la pila. Para

la optimización de su rendimiento es necesario tener un conocimiento adecuado de estas fuerzas, y principalmente de la influencia de distintos parámetros de la pila, como dimensiones, geometría de los componentes (membrana, electrodos, contactos, placas), propiedades de los materiales (morfología, porosidad, difusividades...), y parámetros del ambiente externo (humedad, temperatura, gravedad). De esta forma se puede predecir la respuesta de la pila PEMFC portátil, plasmada en su curva de polarización, así como las posibles vías de optimización de la misma. Esta compleja actividad teórica, basada en principios básicos de procesos de transporte de materia y calor y de reactividad, solo puede llevarse a cabo mediante simulación numérica, en las ecuaciones diferenciales fundamentales se resuelven por métodos numéricos bajo condiciones de contorno idóneas.

En esta comunicación se describe la aplicación de un código particular, conocido como "openFuelCell" a la resolución de las ecuaciones de transporte en una pila air-breathing como la desarrollada en CIEMAT.

2. DESCRIPCIÓN DE LA PILA PEMFC PORTÁTIL

Un esquema de la pila de combustible modelizada se muestra en Fig.1a, y una fotografía de la misma en Fig.1b, según [3]. La arquitectura del ánodo permite la entrada de una presión estática de hidrógeno, de unos 0.5bar, y la salida del agua a través de una membrana hidrofílica permeable que evita su inundación y consiguientes pérdidas por polarización. Por su parte, el cátodo funciona en modo pasivo "air-breathing", permitiendo la entrada de aire y salida de agua a través de su estructura porosa (Fig.1a).

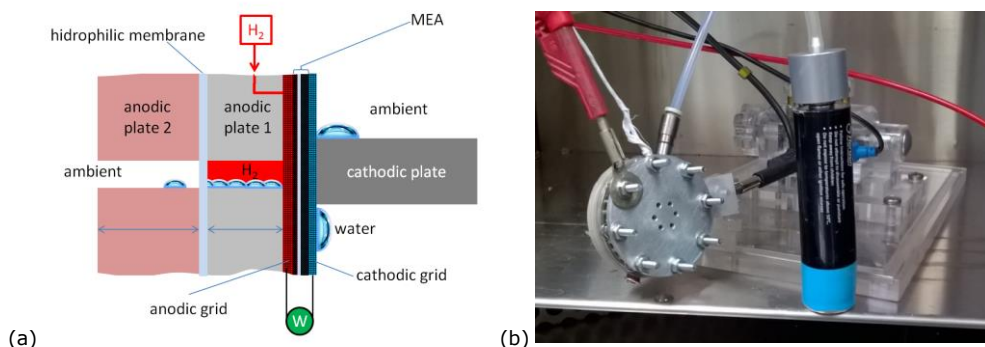


Fig. 1. a) Esquema del funcionamiento de la pila "air-breathing" PEMFC portátil, no a escala. b) Fotografía de una realización de la misma, incluyendo un cartucho de hidrógeno almacenado en hidruros metálicos.

Al conectar la carga tiene lugar el consumo estequiométrico del hidrógeno en el compartimento anódico (en rojo en Fig.1a), así como del oxígeno en el cátodo "air-breathing" (azul en Fig.1b). El agua producida en el cátodo puede difundir en los dos sentidos: bien hacia su superficie externa en contacto con el ambiente y una rejilla colectora de corriente, desde donde se elimina por evaporación; o bien hacia el ánodo a través de la membrana electrolítica, desde donde se elimina a través de la membrana hidrofílica. La producción de electricidad es continua mientras se esté suministrando H_2 y la carga esté conectada. La pila con área activa de unos 7cm^2 alcanza en condiciones estacionarias una potencia media de 1W.

3. PLANTEAMIENTO GENERAL Y ECUACIONES FUNDAMENTALES

En este resumen no es posible hacer una explicación rigurosa de las ecuaciones y condiciones de contorno que afectan al funcionamiento de la pila de Fig.1, sin embargo a continuación se exponen las características generales del planteamiento que se está siguiendo. Para la simulación, las ecuaciones diferenciales a resolver describen el transporte de los gases en los medios porosos de los electrodos y la placa distribuidora de gases, así como del agua líquida. En cada punto de la malla construida sobre la pila deben resolverse:

- Continuidad para mezcla de gases (1)
- Conservación de momento para mezcla de gases. Se utiliza la ecuación de Navier-Stokes tanto en los canales como en los electrodos porosos (ley de Darcy) (2)
- Conservación de especies (3)
- Transporte de momento y continuidad para agua líquida (4)
- Conservación de agua en la membrana
- Potencial eléctrico y corriente
- Energía (5)

$$\nabla \cdot (\varepsilon(1-s)\rho_g \mathbf{u}_g) = -S_{v-l} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\varepsilon(1-s)\rho_g \mathbf{u}_g \mathbf{u}_g) = \\ -\varepsilon(1-s)\nabla p_d + \nabla \cdot (\varepsilon(1-s)\mu_g \nabla \mathbf{u}_g) \\ -\varepsilon^2(1-s)^2 \frac{\mu_g}{K_g} \mathbf{u}_g - \varepsilon(1-s)\mathbf{g} \cdot \mathbf{r} \nabla \rho_g \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\varepsilon(1-s)\rho_g \mathbf{u}_g y_i) = \\ \nabla \cdot (\varepsilon(1-s)\rho D_i \nabla y_i) - S_{v-l} \end{aligned} \quad (3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon s) = \nabla \cdot (\rho D \nabla s) + S_{v-l} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \left(\left(\rho_g c_{p,g} \varepsilon(1-s) \mathbf{u}_g + \rho_w c_{p,w} \frac{K_w}{\mu_w} \nabla p_c \right) T \right) \\ = \nabla \cdot (k \nabla T) - h_c S_{v-l} + S_T \end{aligned} \quad (5)$$

Cada ecuación se resuelve con sus correspondientes condiciones de contorno, que vienen dadas por la reacción electroquímica, y la transferencia de agua entre ánodo y cátodo. Para cada ecuación debe elegirse los parámetros adecuados de cada componente de la celda y especie. Además es necesario considerar las condiciones de funcionamiento de la pila de combustible de Fig.1:

- Ánodo alimentado con H₂ seco a 0.5 bar.
- Cátodo alimentado con aire ambiental, 20°C y 35%RH.
- Temperatura de la celda: 40°C.
- Área activa: 7.1cm²

Fig. 2. Ecuaciones del modelo.

4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Los resultados obtenidos hasta el momento nos han ~~demostrado~~ algunos aspectos de interés sobre el funcionamiento de la pila. En concreto hemos simulado la distribución de agua líquida y de temperaturas dentro de la pila y el flujo convectivo natural de aire en ~~el su~~ entorno. Finalmente se han obtenido ~~las~~ primeras curvas de polarización.

La Fig. 3 muestra el modelo de la celda, con el aire ambiental en color azul, el electrolito en amarillo y ~~la~~ GDL del ánodo en color rojo. La placa catódica, a la izquierda, está formada por una estructura columnar de aluminio, mientras que la anódica, a la derecha, es de plástico. El calor se genera principalmente en la capa del electrolito (por calentamiento óhmico) y en el lado catódico, donde la reducción de oxígeno produce las mayores pérdidas. Como ~~veamos~~ en ~~la~~ Fig. 4a, ~~el dissipador de calor del cátodo~~ la placa catódica quita mucho calor de la zona de reacción mientras que ~~la caja~~ plástica del ánodo conserva bien la temperatura, dando lugar a un gradiente de temperatura que aumenta de cátodo a ánodo. Creemos que este gradiente juega un papel muy importante en el transporte de agua líquida dentro de la celda (SERIA INTERESANTE PONER UN PERFIL DE LA TEMPERATURA EN LA PILA). El mismo efecto se observa en ~~la~~ Fig. 4b: los dedos de aluminio bajan la temperatura local en ~~el electrolito~~ la pila. Como consecuencia del intercambio de calor entre la pila y el ambiente se produce una convección natural de aire en el entorno de la pila que se muestra en Fig. 4c.

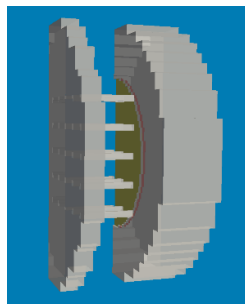


Fig. 3. Modelo en OpenFOAM.

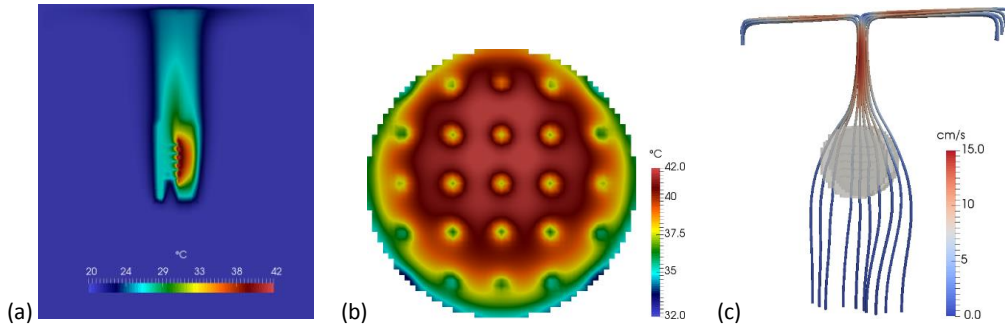


Fig. 4. a-b) Distribución de temperatura. c) Convección de aire en el entorno.

Finalmente, las curvas de polarización resultado de la simulación se muestran en Fig. 5, comparada con la curva experimental.

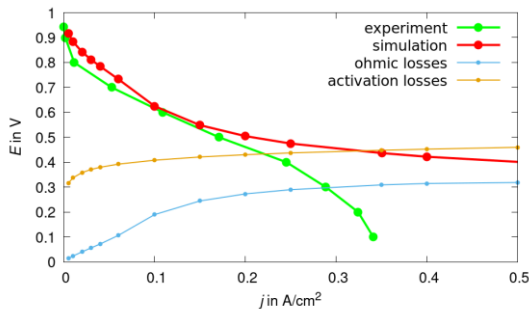


Fig. 5. Curvas de polarización experimental (verde) y simulada (rojo), así como pérdidas debidas a polarización óhmica (azul), y por activación (naranja).

Se observa que hay buena correspondencia a bajas densidades de corriente entre la simulación y el experimento. Para altas densidades de corriente la simulación no es capaz por el momento de tener en cuenta la limitación de corriente debida a la acumulación de agua líquida en ánodo y cátodo. Esta parte está siendo optimizada en el presente.

5. CONCLUSIONES

Se muestran resultados iniciales sobre la simulación de una pila "air-breathing" para aplicaciones portátiles, utilizando el código abierto openFuelCell.

Agradecimientos

Este trabajo se ha financiado con fondos del Ministerio de Economía y Competitividad y Fondo Europeo de Desarrollo Regional (FEDER), Project E-LIG-E, ENE2015-70417-P (MINECO/FEDER). N. Weber agradezca el apoyo financiero del "Deutschen Akademischen Austauschdienst" (servicio de intercambio académico alemán).

Bibliografía

- [1] "Portable Hydrogen Energy Systems", P. Ferreira-Aparicio y A.M. Chaparro (Editores), Academic Press, Londres 2018.
- [2] Patente ES2466590 A1, "Pila de Combustible", CIEMAT.
- [3] Modelo de Invención, solicitud U201930869, "Pila de combustible que funciona con hidrógeno", CIEMAT.
- [4] openFuelCell: openfuelcell.sourceforge.net