



UNIVERSIDAD DE QUINTANA ROO  
DIVISIÓN DE CIENCIAS E INGENIERÍA

**SIMULACIÓN NUMÉRICA DE UNA CELDA DE  
COMBUSTIBLE TIPO PEM DE DIMENSIONES  
MILIMÉTRICAS**

TESIS

Para obtener el grado de  
**Ingeniero en Sistemas de Energía**

PRESENTA

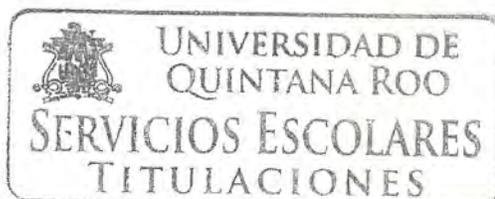
**Adán Alberto Llanes Gutiérrez**

DIRECTOR DE TESIS

**Dr. Gliserio Romeli Barbosa Pool**

ASESORES

**Dr. Jorge Ovidio Aguilar Aguilar**  
**Dr. Fernando Enrique Flores Murrieta**  
**Dra. Beatriz Escobar Morales**  
**Dr. Víctor Manuel Sánchez Huerta**





UNIVERSIDAD DE QUINTANA ROO  
DIVISIÓN DE CIENCIAS E INGENIERÍA

Trabajo de tesis bajo la supervisión del comité de asesoría y  
aprobada como requisito para obtener el grado de:

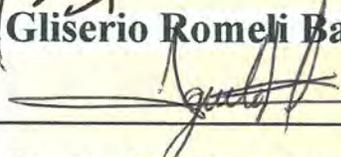
**INGENIERO EN SISTEMAS DE ENERGÍA**

COMITÉ DE TESIS

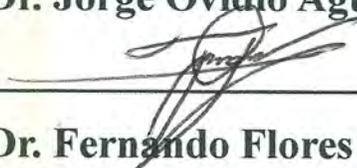
DIRECTOR:

  
\_\_\_\_\_  
Dr. Gliserio Romeli Barbosa Pool

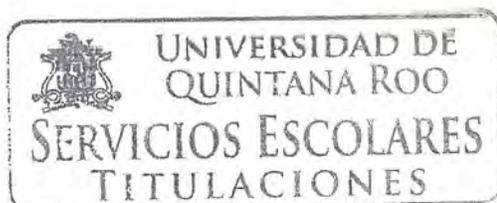
ASESOR:

  
\_\_\_\_\_  
Dr. Jorge Ovidio Aguilar Aguilar

ASESOR:

  
\_\_\_\_\_  
Dr. Fernando Flores Murrieta

CHETUMAL QUINTANA ROO, MÉXICO, FEBRERO DE 2017



Página en blanco.

## AGRADECIMIENTOS

A mis padres, Ariel Llanes y Mercy Gutiérrez que han hecho posible este momento. A Manuel Llanes, que ha sido desde siempre mi hermano y amigo. A mi amigo Joan Alba que ha estado alentándome para llegar a la culminación de esta tesis. Y a mis maestros, que han sido ejemplo de progreso y perseverancia para las generaciones de futuros ingenieros.

*No hay obstáculo que soporte los embates de una decisión firme y un trabajo constante.*

Esto se aplica a mi familia y amigos que me han brindado el apoyo a través de ejemplos, anécdotas y amenazas sin las cuales no hubiera llegado hasta este punto.

Asimismo, agradezco el ejemplo de mis profesores que son un modelo a seguir para poner el granito de arena que nos corresponde en ayudar a aminorar el daño de nuestra huella ecológica y así poder tener un futuro sustentable.

Un especial agradecimiento al CONACYT (proyecto SEP- CB-2013/221988) y al PRODEP, por el apoyo económico brindado bajo el proyecto UQROO-PTC-119 y UQROO/DGIP/003/16, Desarrollo de prototipos de la Red de energías renovables de la Península de Yucatán, así como a la División de Ciencias e Ingeniería y al programa de Redes Temáticas de Hidrógeno (RTH2).

Página en blanco.

# CONTENIDO

RESUMEN .....	1
INTRODUCCIÓN .....	2
OBJETIVOS .....	3
GENERAL.....	3
ESPECÍFICOS.....	3
CAPÍTULO 1.....	4
1.1 Clasificación de las celdas de combustible.....	4
1.2 Celda de combustible tipo PEM .....	6
1.2.1 Ensamble membrana electrodo (MEA).....	6
1.2.2 Difusores de gas .....	7
1.2.3 Platos bipolares .....	7
1.2.4 El catalizador.....	8
1.3 Modelado de celdas de combustible .....	8
1.3.1 Análisis estadístico de artículos de PEMFC .....	9
CAPÍTULO 2.....	14
2.1 Simulación y modelado.....	14
2.2 Ecuación de continuidad.....	17
2.3 Conservación de momentum.....	19
2.4. Estrategia de solución Fluent .....	20
2.5 Estrategia de simulación general .....	21
CAPÍTULO 3.....	24
3.1 Simulación de una celda de dimensiones y geometría convencionales .....	24
3.1.1 Iniciar Fluent .....	24
3.1.2 Leer la malla.....	25
3.2 Definir el modelo .....	26
3.2.1 Configuración del modelo.....	27
3.2.2 Condiciones de operación .....	29
3.2.2 Condiciones de frontera .....	29
3.2.3 Controles de la solución.....	31
3.3. Post-procesamiento .....	33
CAPÍTULO 4.....	35

Simulación de celda de dimensiones milimétricas .....	35
CONCLUSIONES .....	39
BIBLIOGRAFÍA .....	40

## RESUMEN

En este trabajo se exponen los estudios realizados a distintos componentes de una celda de combustible tipo PEM, así como el funcionamiento de la celda y la evaluación realizada mediante un programa de simulación especializado, en este caso se usó FLUENT - ANSYS, y generación de la geometría y mallado en GAMBIT. El capítulo 1 delimita los antecedentes y en el capítulo 2 se realiza una búsqueda exhaustiva del estado del arte sobre los temas más investigados en los componentes de la celda de combustible. Respecto al diseño, se propuso una geometría para la sección transversal, alterna a la más ampliamente utilizada para estos tipos de investigaciones. Con esta información, se analizó la influencia de la malla sobre la densidad de corriente comparándola con la muestra de control de la geometría propuesta. Como resultado más importante tenemos que se obtiene del programa una densidad máxima de corriente de  $1.26 \times 10^{-1} \frac{mA}{m^2}$ . La simulación realizada permite plantear estrategias para mejorar el diseño. En esta tesis, la respuesta eléctrica y el comportamiento de la milicelda fue simulada de manera efectiva para que en trabajos futuros el diseño se mejore, asimismo en trabajos futuros se realizará la construcción y validación experimental del diseño.

# INTRODUCCIÓN

Un suministro de energía confiable es necesario para un desarrollo sustentable, asimismo existe una relación directa con el desarrollo económico de un país y el crecimiento en su demanda energética [1]. Las evidencias empíricas parecen respaldar la hipótesis de que el crecimiento económico está relacionado con el incremento del consumo energético.

Desde luego, debemos de procurar que la generación de esta energía sea hecha de manera responsable con el medio ambiente [2]. A pesar de esto, la mayoría de las comunidades alrededor del mundo siguen dependiendo fuertemente del petróleo, gas natural y carbón [1], que tristemente son las principales preocupaciones de la reforma energética mexicana. Estos combustibles consumen muchos recursos que eventualmente disminuirán y serán demasiado costosos o dañinos para el ambiente como para seguir utilizándolos.

Existen opciones factibles para proveer esta demanda energética, una de las más prometedoras es la energía solar de la cual México se encuentra fácilmente entre los países en el mundo para invertir en energía fotovoltaica. Esto es porque el país se encuentra en el llamado “cinturón solar” o “*solar belt*” con radiación que excede en ocasiones los 5KWh por metro cuadrado al día [3].

Existen actualmente estudios enfocados en mejorar la eficiencia de los sistemas renovables [4], sin embargo, una de las grandes desventajas de las fuentes de energía renovable es la intermitencia del recurso. Por lo que son requeridas formas de almacenaje que garanticen que la demanda eléctrica se vea satisfecha; la manera de hacer esto es mediante dispositivos de almacenamiento químico como baterías, que tienen una buena eficiencia, pero tienen ciertos defectos como la autodescarga, la degradación gradual de su eficiencia, químicos dañinos, peso elevado y tiempo de recargar; una opción viable de almacenamiento es el Hidrógeno en conjunto con celdas de combustible (CC).

Las CC son dispositivos electroquímicos que permiten reaccionar químicamente el hidrógeno con el oxígeno para la generación de electricidad y calor, lo cual sucede en la medida que los reactantes son suministrados en la celda. Esta forma de generar energía de forma amigable con el medio ambiente puede coadyuvar a satisfacer las demandas energéticas requeridas por la sociedad. Además, son dispositivos muy eficientes con respecto a los sistemas tradicionales de generación de energía eléctrica (alrededor del 50% real) y su combustible se puede almacenar de manera muy versátil; dejando de lado problemas como la discontinuidad del recurso solar o eólico. Además de contar con la ventaja que su combustible puede ser suministrado y contenido con alta densidad de energía, característica con la que podría llegar a aventajar a las baterías en el sector de transporte.

Existen varias clasificaciones de las CC, la más común es por tipo de electrolito utilizado, estas clasificaciones se abordan en el capítulo uno. Entre los tipos existentes de CC destacan las de Membrana de Intercambio Protónico (PEMFC), las cuales proponen una solución para asegurar un suministro continuo de energía, portabilidad y facilidad de recarga del combustible [5].

En este trabajo, se analizan los tipos de celdas de combustible, su funcionamiento, ventajas y desventajas respecto a las baterías y motores de combustión interna. Se hace hincapié en el

trasfondo matemático y la metodología usada en el programa de simulación para analizar minuciosamente a la PEMFC.

En esta tesis se simula una PEMFC valiéndose de los métodos de simulación disponibles en el programa Ansys Fluent 14.5 de geometría convencional y se analizará su desempeño para después compararlo con una celda con la geometría modificada de sus canales de difusión de gas que optimicen el flujo hacia la membrana y propicien un mejor transporte de masa hacia la membrana.

## **OBJETIVOS**

### **GENERAL**

Estudiar el funcionamiento interno de una celda de combustible mediante un programa de simulación para determinar la densidad de corriente del diseño propuesto de dimensiones milimétricas.

### **ESPECÍFICOS**

- 1) Análisis mediante simulación numérica para conocer el impacto eléctrico de los componentes respecto a la eficiencia total de la celda.
- 2) Conocer los mecanismos de conversión de energía, así como aquellos que involucren transferencia de fluidos.
- 3) Determinar la factibilidad eléctrica de un diseño de celda de combustible de dimensión milimétrica.

# CAPÍTULO 1

## 1.1 Clasificación de las celdas de combustible

El funcionamiento de las CC consiste básicamente en la oxidación del hidrógeno y la reducción del oxígeno, generando directamente energía eléctrica y calor, sin pasar por generadores mecánicos. Todos los tipos de CC están compuestos de un cátodo, un ánodo y un electrolito, siendo la oxidación del hidrógeno igual para todos los tipos de CC, los materiales usados para la fabricación es lo que define el tipo y funcionamiento de las mismas. A continuación, se describen los principales tipos de CC [5].

**Celdas de combustible alcalinas o (AFCs, *Alkaline Fuel Cells*)**, éstas celdas de combustible han sido utilizadas por la NASA en misiones espaciales y tienen eficiencias superiores al 70%, pero aún se está trabajando en cómo reducir sus costos. Además, uno de los motivos por la cual no existe su aplicación masiva es porque a este tipo de celdas se le suministra hidrógeno y oxígeno puros, debido principalmente a que las cantidades de CO<sub>2</sub> presentes en el ambiente pueden degradar la membrana electrolítica de potasio.

**Celdas de combustible de ácido fosfórico o (PAFCs, *Phosphoric Acid Fuel Cells*)**, estas son las celdas de combustible con la tecnología más madura. Aunque su rendimiento es relativamente bajo (cerca del 40%) con respecto a otras celdas de combustible, tiene ventajas tales como que no requiere que el hidrógeno sea tan puro y que el vapor residual puede ser utilizado en un sistema de cogeneración alcanzando cerca del 85% de eficiencia. Una de sus más grandes desventajas es el uso de platino como catalizador (como también lo es en la mayoría de las celdas de combustible), su gran tamaño y peso, lo cual restringe su uso.

**Celdas de combustible de óxido sólido o (SOFCs, *Solid Oxide Fuel Cells*)**, las celdas de combustible de óxido sólido son las más cercanas a su comercialización, son robustas y producen altas temperaturas (cercas a los 1000 °C) que las hacen atractivas para un sistema de cogeneración, aumentando así su eficiencia cuando la celda es mayor a 100 kW entre 60 y 85%. Sin embargo, siguen siendo teóricamente menos eficientes que los MCFCs.

**Celdas de carbonato fundido o (MCFCs, *Molten-Carbonate Fuel Cells*)**, las celdas de carbonato fundido se planean utilizar en aplicaciones eléctricas con potencias de entre 10 kW a 2 MW. Su temperatura de operación se sitúa en rangos de entre 620 a 660 °C. Estas temperaturas resultan beneficioso para su eficiencia, ya que se puede instalar un sistema de cogeneración de vapor, pero resulta en una reducción en la vida útil de algunos de los componentes de la celda, tales como los electrodos.

**Celdas de metanol directo (DMFCs, *Direct Methanol Fuel Cells*)**, una celda que use directamente metanol como combustible resulta atractiva para el mercado, ya que es percibida como “más segura” que el hidrógeno, pero aún quedan muchos obstáculos que superar si se quieren

usar de manera eficiente. Al momento solo se usan para pequeñas aplicaciones de celdas portátiles, ya que su densidad de carga resulta insuficiente para aplicaciones de corrientes más grandes.

**Celdas de Zinc-Aire (ZAFs, *Zinc Air Fuel Cells*)**, estas celdas también pueden ser consideradas como baterías, ya que su combustible es regenerado de manera automática mientras ocurren los procesos (no sin la intervención de una fuente externa como celdas solares para la electrólisis). Han demostrado ser superiores en densidad de carga a las baterías para uso de vehículos eléctricos, por lo que se les considera prometedoras para fines de transporte y aplicaciones militares.

**Celdas cerámicas de intercambio protónico (PCFCs, *Protonic Ceramic Fuel Cells*)**, estas celdas tienen la ventaja de funcionar a muy alta temperatura (como las de carbonato fundido y las de óxido sólido) y tienen la ventaja de que su membrana conduce protones, tal como las celdas de membrana de intercambio protónico o las de ácido fosfórico. Para obtener una alta eficiencia con las PCFCs se debe operar a alta temperatura. Su principal ventaja con respecto a las PEMs o PAFCs es que se pueden introducir directamente en ella los hidrocarburos y oxidarlos electroquímicamente, esto elimina el paso intermedio de obtener hidrógeno a partir de combustibles fósiles o biomasa.

**Celdas de combustible biológicas (BFCs, *Biological Fuel Cells*)** en las celdas biológicas, se tiene que utilizar un medio acuoso, y en vez de suministrar como catalizador a un metal noble, se utiliza un microorganismo o una enzima. Debido a la complejidad de las reacciones ocurridas en este tipo de celdas, se obtiene una eficiencia baja (de entre 15 y 25%) respecto a las celdas químicas. Actualmente se trabaja en el desarrollo de celdas que, en vez de trabajar con bacterias, operen con enzimas, esto debe de simplificar la manipulación y se obtendrían eficiencias aproximadas al 50%.

En la figura 1.1 se ejemplifica la reacción electroquímica que ocurre dentro de una celda de combustible tipo PEM, donde ingresa el hidrógeno en forma de gas y reacciona con el oxígeno, liberando electrones que se aprovechan como electricidad y dejando como residuo solamente agua y calor. Cabe mencionar que en celdas como las de SOFCs, son los iones de oxígeno los que se conducen a través de la membrana y no los de hidrógeno.

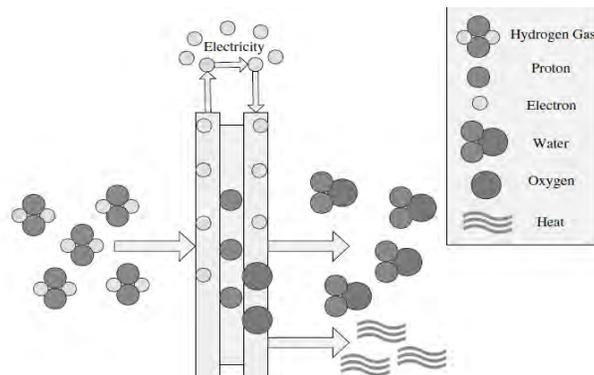


Figura 1 Reacción dentro de una celda de combustible tipo PEM [5].

Ya sea que se quemé o que se consuma el hidrógeno en una celda de combustible, los únicos residuos de la oxidación del hidrógeno son calor y agua, además presentan una densidad de potencia de su peso respecto a la energía producida mayor a la de las baterías convencionales [5].

## 1.2 Celda de combustible tipo PEM

Celdas de membrana de intercambio protónico (PEMFCs, *Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cells*), este tipo de celdas son el objeto de estudio en este trabajo de investigación. Una típica PEMFC lleva reacciones en sus tres partes, ánodo, electrolito y cátodo. El ánodo es la parte cargada negativamente de la celda, de donde son tomados los protones y enviados a través de la membrana electrolítica [6].

Las reacciones electroquímicas que ocurren en una PEMFC consisten de dos reacciones separadas: una reacción de oxidación que ocurre en el ánodo y una reacción de reducción que ocurre en el cátodo.

En el ánodo:



En el cátodo:



En la reacción de oxidación los gases de hidrógeno producen iones de hidrógeno que viajan a través de la membrana hacia el ánodo, y los electrones que viajan a través de un circuito externo hacia el cátodo. Estas dos reacciones podrían ocurrir muy lentamente si la temperatura de operación es baja, alrededor de 80 °C, para un electrolito de membrana polimérica de una celda de combustible. Así, por estas razones los catalizadores son usados sobre ambos electrodos, el ánodo y el cátodo, para incrementar la velocidad de cada una de las reacciones. Uno de los materiales que se utiliza como catalizador es el platino, por ser el que mejor trabaja en los electrodos. El producto final de las reacciones en la celda es: energía eléctrica, agua y un exceso de calor. A continuación, se describen los componentes de la PEMFC.

### 1.2.1 Ensamble membrana electrodo (MEA)

El ánodo y el cátodo están separados cada uno del otro por medio del electrolito, en este caso la membrana. El electrolito es el medio conductivo en el cual el flujo de corriente está acompañado por el movimiento de materia, es decir el electrolito es la sustancia que sirve como puente para el intercambio de iones entre el ánodo y el cátodo. La combinación de ánodo/membrana/cátodo es conocida como el ensamble membrana-electrodo, se encuentra empacada en forma de “sándwich” de tres películas delgadas. La evolución del ensamble membrana electrodo en un electrolito de membrana polimérica de una celda de combustible ha variado a través de varias generaciones. El original ensamble membrana/electrodo fue construido en 1960 para el programa espacial Géminis,

por cada centímetro cuadrado de membrana se usaron 4 miligramos de Pt ( $4 \text{ mg/cm}^2$ ). La tecnología actual varía con el fabricante, pero la cantidad de Pt utilizado ha disminuido de la cantidad original de  $4 \text{ mg/cm}^2$  a  $0.5 \text{ mg/cm}^2$ . Esto representa un notable progreso en el desarrollo de las celdas desde el programa Géminis, ya que la corriente producida era de 0.5 A por miligramo de platino [7].

El ensamble, es el corazón de la celda de combustible y está constituido por un electrolito (membrana polimérica) en contacto con un ánodo y un cátodo poroso (electrodos) a cada lado. Esto constituiría una monocelda, que se puede apilar en serie lo que formaría un apilado o “stack”. Los diferentes gases, combustible y oxidante, pasan a través de la estructura de los difusores de gas, los cuales están hechos de papel o tela de carbón poroso. La función de estos difusores de gas es facilitar el acceso directo y uniforme de los gases reactantes, hidrógeno y oxígeno, hacia las capas catalizadoras sin tener la difusión de agua líquida.

### 1.2.2 Difusores de gas

Las llamadas capas de apoyo (difusores de gas), una al lado del ánodo, la otra al lado del cátodo, son usualmente hechas de papel carbón poroso o tela de carbón, con un espesor típico de  $300 \mu\text{m}$ . Los difusores de gas tienen que ser hechos de un material, como el carbón, que pueda conducir los electrones hacia fuera del ánodo y adentro del cátodo. La naturaleza porosa de los difusores de gas asegura la difusión eficaz de cada gas reactivo en el catalizador del ensamble membrana electrodo. En este contexto la difusión se refiere al flujo de las moléculas de gas de la región de alta concentración hacia una región de baja concentración, el lado interno del ánodo al lado de la capa catalizadora donde el gas es consumido por la reacción.

Los difusores de gas también ayudan en la administración del agua durante el funcionamiento de la celda de combustible; muy poca o mucha agua puede causar la interrupción del funcionamiento de la celda. Un correcto material en el difusor de gas permite una cantidad apropiada de vapor de agua que alcance el ensamble membrana electrodo para mantener la membrana humedecida. El material de la capa posterior también ayuda a que el agua líquida producida en el cátodo abandone la celda y este no sea “inundado”. Los difusores de gas están a menudo húmedos y recubiertos con teflón para asegurar que algunos o la gran mayoría de los poros de la tela de carbón o papel de carbón no se obstruyan con el agua, la cual prevendría la rápida difusión del gas que es necesaria para una buena velocidad de la reacción que ocurre en los electrodos.

### 1.2.3 Platos bipolares

Comprimido contra la superficie exterior de cada una de las últimas capas está una pieza de los componentes de la celda, llamado plato, el cual a menudo tiene dos papeles que desempeñar: campo de flujo y colector de corriente. En una celda de combustible, estos dos platos son los últimos componentes que constituyen la celda.

Una de las funciones de cada colector de corriente es suministrar un medio de flujo para el gas. El lado del colector que está al lado de la última capa contiene canales maquinados. Los canales son

usados para transportar los gases reactantes del punto de entrada de la celda de combustible a un punto de salida del gas. Un buen diseño de los campos de flujo en el colector, así como la anchura y profundidad de los canales tendrán un gran impacto sobre la efectividad de la distribución uniforme de los gases reactantes a través del área activa del ensamble membrana/electrodo. Los campos de flujo también afectan el suministro de agua a la membrana además remueven el agua del cátodo.

El segundo propósito para el que sirven los platos es el de colector de corriente. Los electrones producidos por la oxidación del hidrógeno deben ser conducidos a través del ánodo, a través de la capa posterior y a través del plato antes que puedan llegar al final de la celda, viajan a través de un circuito externo y retornan a la celda a través del cátodo del plato. Con la adición de estos dos puntos: campos de flujo y colector de corriente, la celda de combustible de membrana polimérica está completa. Solo la carga-contenedor del circuito externo, como un motor eléctrico, es requerida para el flujo de corriente eléctrica.

Estos platos, deben de tener las siguientes características: Altamente conductores eléctricos y térmicos, muy estables en medios ácidos, no permeable a los gases, livianos, delgados, fuertes y de fácil manejo para el maquinado de campos de flujo [8].

## 1.2.4 El catalizador

El catalizador se deposita sobre la membrana en forma de una película delgada, esta tiene la función de formar la llamada zona de las tres fases, es en esta región donde se lleva a cabo la reacción electroquímica que dará lugar a la transformación de la energía química del combustible directamente en energía eléctrica. La zona de las tres fases está caracterizada por el contacto entre el conductor iónico/catalizador/conductor eléctrico, es precisamente esta área la que se desea maximizar para obtener la mayor cantidad de reactivos interactuando y así de esta manera producir la mayor cantidad de energía eléctrica en la celda de combustible.

Las variables que más influyen en la eficiencia de la capa catalítica son:

- Tipo de material.
- Método de preparación y depósito del catalizador.
- Carga de Nafión<sup>®</sup> líquido.

## 1.3 Modelado de celdas de combustible

Es importante mencionar que un modelo matemático es tan exacto como las suposiciones que se realicen acerca de él. Por ejemplo, si se considera un proceso isotérmico o de flujo laminar, aunque esto signifique la simplificación del modelo, esta consideración no permitirá obtener resultados precisos. Pero el hecho de hacer suposiciones (como la del voltaje constante, flujo laminar en los gases, condiciones isobáricas o isotérmicas, etc.) no necesariamente quiere decir que el modelo

esté errado, pero es importante tener en cuenta las suposiciones hechas para que así se conozcan las limitaciones del modelo realizado [6].

El modelo computarizado puede hacerse desde algunos de los componentes de las celdas hasta celdas completas, solamente que éstas requieren más tiempo y esfuerzo, a la fecha se realizan arreglos de stack completos, incluyendo aún componentes auxiliares [9]. En los últimos años ha sido evidente la necesidad de realizar investigación abstracta o fenomenológica de los fenómenos que ocurren dentro de la celda de combustible, mediante esta metodología se busca mejorar el conocimiento de los fenómenos o procesos que involucra la interacción de cada una de las partes que integran al sistema de estudio.

El crecimiento de las investigaciones a nivel mundial y el consecutivo incremento en la producción científica en las últimas décadas se ve reflejado en el aumento de indicadores que permiten medir el impacto de la actividad científica. A continuación se presentan una serie de gráficas que ilustran cómo a través del tiempo ha aumentado considerablemente el número de artículos publicados al año en cuanto a los siguientes temas:

1. Número de artículos referentes a celdas de combustible y qué revistas las han difundido.
2. Cambio de la complejidad en el número de dimensiones modeladas a través del tiempo.
3. Análisis del interés prestado a cada uno de los componentes de las partes de la PEM y su cambio a través del tiempo.
4. Análisis de los artículos publicados sobre stack y su comportamiento dinámico o de estado estable.

### 1.3.1 Análisis estadístico de artículos de PEMFC

En un análisis realizado con respecto al estado del arte referente al modelado matemático en celdas de combustible, se observa que la cantidad de artículos publicados varía significativamente. Se accedió a los documentos a través de la página de *ScienceDirect* ([www.sciencedirect.com](http://www.sciencedirect.com)) y se utilizaron sus herramientas para el análisis. Se procedió a realizar una búsqueda avanzada utilizando la herramienta “*Advanced search*”, mostrada en un círculo en la figura 1.3



Figura 1.3 Botón de búsqueda avanzada en la página de Science Direct.

A partir de ahí, se ingresaron los conectores booleanos requeridos para realizar una búsqueda personalizada en el campo correspondiente en el apartado de “búsqueda experto” (*expert search*), que se encuentra marcado por la elipse roja en la figura 1.4. Las condiciones de búsqueda se llevaron a cabo utilizando conectores booleanos, mismos que se irán detallando conforme el análisis se fue desarrollando.

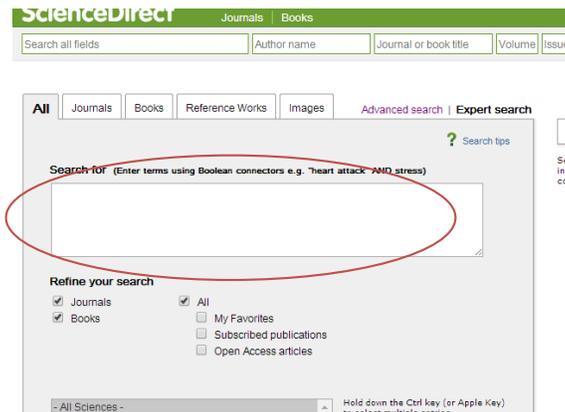


Figura 1.4 Cuadro de entrada de comandos para búsqueda en el motor de Science Direct.

La figura 1.5 muestra el número de artículos publicados en las revistas de interés. Las palabras ingresadas en el campo de búsqueda fueron “*TITLE: (modeling or model and fuel cell)*”. Esta indicación al motor de búsqueda le instruye para que busque documentos que en su título tengan las palabras *modeling* o *model* y que en el resto de la publicación se busquen las palabras *fuel cell*.

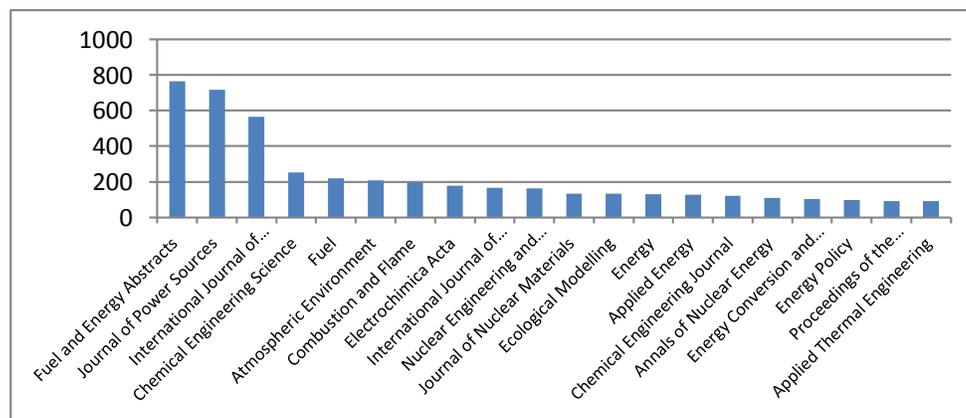


Figura 1.5 Nombres de artículos y revistas respecto a su número de publicaciones referentes al temas de las celdas de combustible.

En la figura 1.5 se observa que el mayor número de publicaciones fueron registradas por la revista “*Fuel and Energy Abstracts, ISSN: 0140-6701*”, pero esto es debido a que la revista se dedica a resumir todos los aspectos científicos, técnicos, comerciales y ambientales de los combustibles y de la energía (<http://www.journals.elsevier.com/fuel-and-energy-abstracts/>). Las fuentes

proviene de más de 800 resúmenes de publicaciones internacionales, reportes especiales, monografías, actas de congresos, estudios, y análisis estadísticos.

En el otro extremo, tenemos a la revista “*Applied Thermal Engineering, ISSN: 1359-4311*”, en la cual según información publicada en el sitio Elsevier se dedica exclusivamente a fenómenos relacionados con el transporte de calor y termodinámica. A pesar de publicar investigaciones referentes al modelado de celdas de combustible, estas no son temas únicos. Esta revista considera temas como intercambiadores de calor, bombas de calor y plantas de refrigeración, por mencionar algunos temas.

En la figura 1.6, con los mismos resultados, se presenta la cantidad de artículos referentes al modelado de celdas de combustible que han sido publicados a través de los años, notándose un gran incremento.

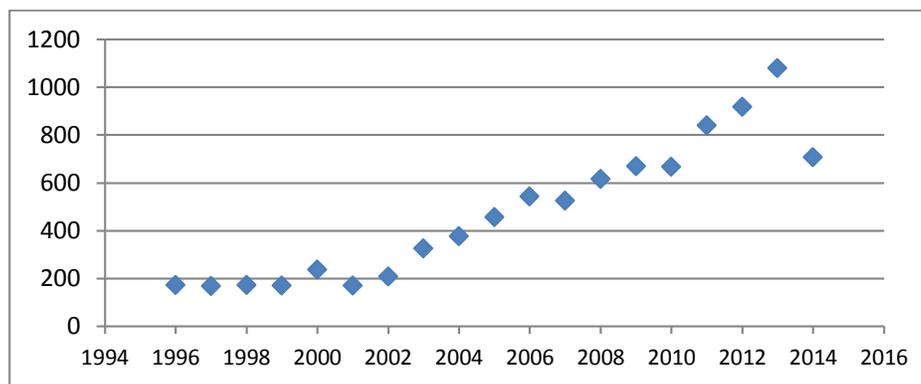


Figura 1.6 Aumento de los artículos referentes al modelado matemático en celdas de combustible respecto al año donde fueron publicados (búsqueda realizada en 2013).

Se observa en la figura 1.6 cómo ha ido creciendo el interés en la investigación de las celdas de combustible. Es notable una pequeña disminución en el número de publicaciones durante el 2014, debido a que aún no se contaba con la actualización de acuerdo a la fecha realizada.

Posteriormente, modificando las palabras clave y utilizando el mismo motor de búsqueda, se refinó el sondeo en cuanto a la modelación según el número de dimensiones comprendidas en el análisis, de tal forma que en la figura 1.7 se presenta la información obtenida. Se observa el análisis del cambio a través de los años de los modelos computacionales según su número de dimensiones.

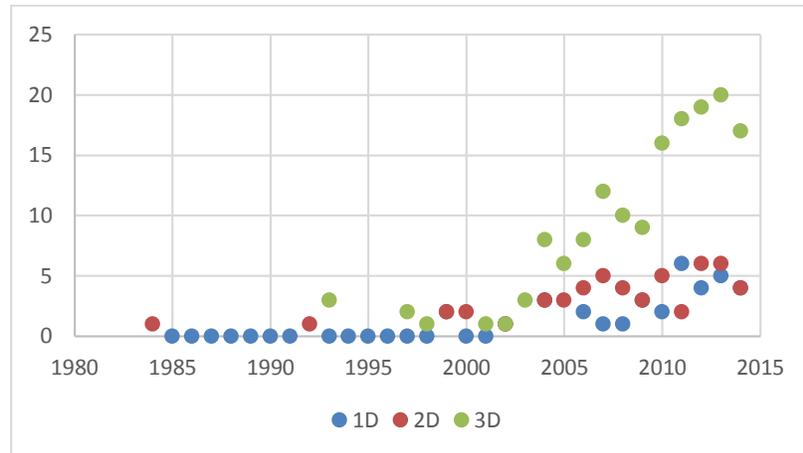


Figura 1.7 Comparación del número de artículos publicados sobre modelado matemático en celdas de combustible en 1, 2 y 3 dimensiones.

En la figura 1.8 se muestra una comparación del número de artículos publicados a través de los años de cada uno de los componentes de las PEMFC. También se puede observar que la mayor parte de las investigaciones de los últimos 5 años se han enfocado en la capa difusora de gases (*Gas Diffusion Layer*). Seguida muy de cerca por los artículos publicados sobre la capa catalítica debido a su gran relevancia en la distribución de los gases reactantes y manejo de la humedad, mejoras en el contacto eléctrico entre el electrodo y la placa colectora de corriente lo cual favorece la vida del ensamble y permite una mejor resistencia mecánica.

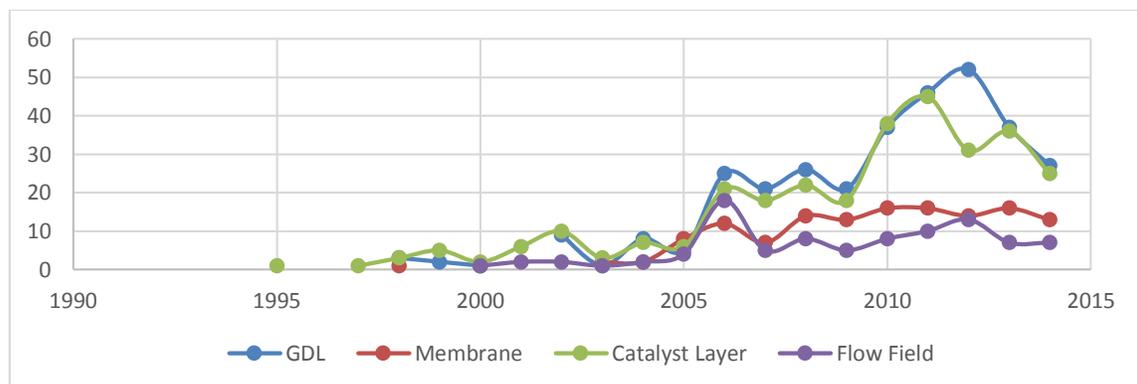


Figura 1.8 comparación del número de artículos encontrados referentes a cada una de las partes de la PEMFC.

En cuanto al arreglo tipo stack, figura 1.9, se observa que de acuerdo a las necesidades ha ido variando la cantidad de artículos publicados y se puede afirmar que existe un renovado interés en la simulación de este tipo de arreglos, debido en parte a la capacidad aumentada de las computadoras que llevan a cabo esta tarea.

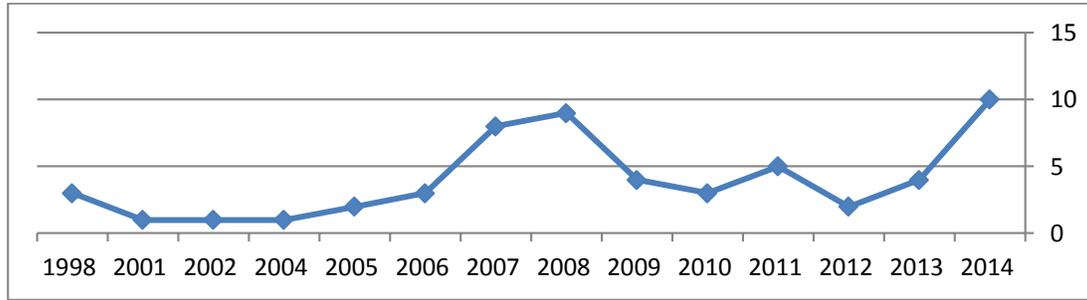


Figura 1.9 Número de publicaciones referentes a arreglos tipo stack de PEMFCs por año.

Finalmente en la figura 1.10 se presenta la búsqueda con respecto a los distintos modelados realizados en CC, abarcando el estado dinámico y estable a partir de sus ecuaciones electroquímicas.

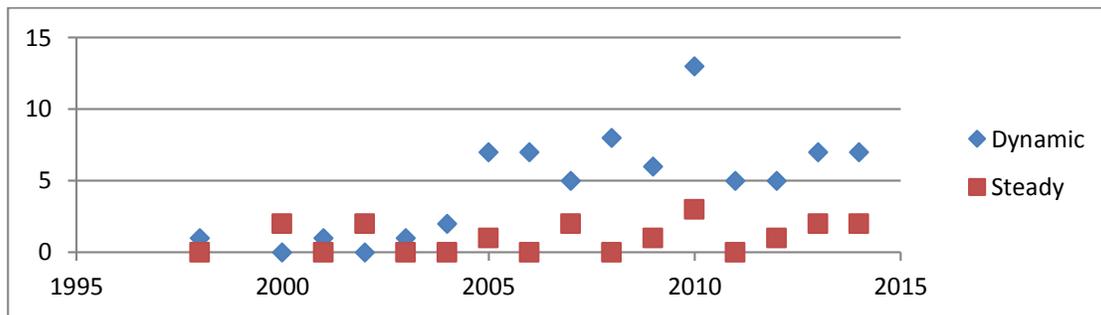


Figura 1.10. Comparación de los modelados de PEMFCs en los estados dinámico y estable respecto al año en que fueron hechas las publicaciones.

A partir de las estadísticas aquí presentada, es posible explicar el tema principal de este trabajo, que se focaliza en la simulación de los canales de flujo y el comportamiento de los gases reactantes en la celda de combustible. En el siguiente capítulo, se analizan algunas de las funciones principales del comportamiento de los fluidos en un elemento diferencial y de cómo se ha llegado a ellas.

## CAPÍTULO 2

### 2.1 Simulación y modelado

Al estar directamente relacionada la definición de una reacción termodinámicamente reversible (el tipo deseado) con la reacción en el electrodo y con el transporte de masa [10], es justificable hacer la aseveración de que, el estado óptimo de desempeño será alcanzado solamente si se tiene un perfil de flujo de fluidos adecuado.

La relación que debe de existir para que se definan como reversibles las reacciones en el electrodo respecto al transporte de masa es la siguiente:

$$k_0 \gg k_d$$

Donde  $k_0$  simboliza las reacciones en el electrodo y  $k_d$  es el transporte de los reactivos participantes.

Actualmente se utilizan programas computarizados de dinámica de fluidos para el estudio de los procesos en la celda. Las modelaciones varían de un tipo de CC a otra, porque, aunque el comportamiento sea básicamente el mismo, pueden tener diferencias clave (por ejemplo, el transporte iónico entre una PEMFC y una SOFC). Para facilitar la escritura del código computacional de las condiciones de frontera, se utiliza el mismo número de ecuaciones para definir las en cada una de las partes de la celda (entre 5 y 9 partes) y en el caso de que en alguna parte se tenga una ecuación no deseada, se puede resolver para deshacerse de ella utilizando las técnicas numéricas apropiadas. Para cada parte individual deben de ser resueltas las ecuaciones fundamentales de conservación de masa, impulso, energía y especies [9]. Los fenómenos que se llevan a cabo en cada uno de los componentes de una PEMFC son presentados en la Tabla 2.1.

Tabla 2.1 Componentes de una PEMFC y sus principales fenómenos, especies e influencia para su desarrollo tecnológico.

Parte	Fenómenos presentes	Influencia	Especies
Placas bipolares	Transporte de calor por convección a través del flujo del fluido y cambios en el valor de velocidad, concentración y presión de las especies.	Impacto económico, afectación directa sobre el comportamiento de la distribución, caída de presión y velocidad de los gases y del agua en estado líquido.	Hidrógeno en el ánodo, oxígeno y nitrógeno en el cátodo y agua en fase vapor y líquida en ambos lados, además de protones a lo largo de la membrana y CL.
Capa difusora de gases.	Transporte de calor por convección a través del flujo del fluido y cambios en el valor de velocidad, concentración y presión de las especies.	Difunde los gases, mejora el contacto eléctrico entre el electrodo y la placa colectora de corriente, favorece la vida del ensamble y permite una mejor resistencia mecánica.	Gases de vapor de agua, hidrógeno en el ánodo y oxígeno en el cátodo.
Membrana	Conducción protónica, arrastre electro-osmótico, difusión de agua y permeabilidad hidráulica. Transferencia de calor por conducción. Su ecuación de impulso debe incluir	Es mecánicamente fuerte y químicamente estable tanto en ambientes oxidantes como reductores.	Agua (líquida y gaseosa), Iones de hidrógeno y grupos sulfónicos.

	términos fuente debidos a esfuerzos de arrastre dentro del electrolito.		
Capa catalítica (electrodos)	En esta ocurren todos los fenómenos presentes en las PEMFC.	Permiten el acceso y eventual contacto de los gases	Electrocatalizador (platino), conductor electrónico, conductor protónico (Nafión), vapor de agua y gases reactantes (todo).

El análisis químico en cuanto a la conservación de la materia, no es suficiente para explicar lo ocurrido dentro de cada una de las partes una celda PEMFC, sino que son necesarios los siguientes cinco tipos de ecuaciones gobernantes [6, 9, 11]:

1. Leyes de conservación de masa, momento, energía, especies y carga.
2. Relaciones constitutivas de varios tipos de flujo.
3. Ecuaciones cinéticas para reacciones.
4. Relaciones de equilibrio.
5. Relaciones auxiliares o de apoyo incluyendo la definición de variables.

En el libro *PEM Fuel cells modeling and simulation using matlab* (Modelado y simulación de celdas de combustible PEM) [6] se abordan, más específicamente las fórmulas termodinámicas, en cuyas consideraciones viene incluida la fórmula de energía libre de Gibbs que es esencial para el cálculo de diferencia de potencial que es capaz de generar la celda y el análisis en materia de electroquímica, transporte de carga, transporte de masa y transferencia de calor.

Para aplicar el modelado matemático a cada una de las partes, una vez que se conocen los fenómenos y especies presentes en la parte analizada, entre otras consideraciones que varían dependiendo a lo que se desee obtener, se adecúan las fórmulas, como se puede ver en la tabla 2.2.

Tabla 2.2 Aproximación de análisis matemático y variaciones que pueden existir al simular una PEM.

Número de dimensiones	Dinámico o estable	Cinética en ánodo y cátodo	Fases en ánodo y cátodo	Transporte de masa (ánodo y cátodo)	Transporte de masa (electrolito)	Engrosamiento de la membrana	Balance de energía
Una, dos o tres dimensiones	Dinámico o de estado estable	Expresiones de tipo Tafel, ecuaciones complejas de cinética de Butler-Volmer.	Combinación de gas y líquido.	Difusión efectiva de Fick, Nernst-Planck, Nernst-Planck + Schlogl, Maxwell-Stefan	Nernst-Planck + Schlogl, Nernst-Planck + Coeficiente de arrastre, Maxwell Stefan, difusión efectiva de Fick.	Modelos empíricos o termodinámicos.	Isotérmico o balance de energía completo.

Partiendo de esta información, se observa que existe una correlación entre los distintos tipos de celdas, sus partes y la manera en que se modela. Todas presentan los mismos principios básicos. Por muy poderoso que sea el software de simulación utilizado, es necesario que el usuario cuente con los conocimientos necesarios; esto es, debido a que existe una fase de identificación y formulación del problema en términos de los fenómenos físicos y químicos que necesitan ser considerados [9].

Un buen entendimiento de la solución numérica también es crucial. Para demostrar esto, existen tres conceptos matemáticos que resultan útiles.

- **Convergencia:** Es la propiedad de un método numérico de producir una solución que se aproxime a la solución exacta, conforme el espaciado de la red y el tamaño del volumen de control tiende a cero

- Consistencia: Al aplicarse a un sistema numérico, produce sistemas de ecuaciones algebraicas que se pueden demostrar ser equivalentes a la ecuación de gobernatura original, conforme el espaciado de la red tiende a cero.
- Estabilidad: La estabilidad está asociada con la depuración de errores conforme se ejecuta el método numérico.

En la práctica, resulta muy difícil lograr la convergencia; motivo por el cual se utiliza el teorema de equivalencia de Lax, que establece que, para problemas lineales, una condición necesaria y suficiente para la convergencia, es que el método posea a su vez, consistencia y estabilidad [12].

La dinámica de fluidos computacionales (*computational fluid dynamics, CFD*), está limitada por el uso de ecuaciones lineales. Al utilizar ecuaciones no lineales, la consistencia y la estabilidad, son partes necesarias pero no suficientes para lograr la convergencia.

La simulación de CFD establece ecuaciones diferenciales a partir de un volumen de control finito que, en el caso de la figura 2.1, generada para el tutorial, solo se aprecia en dos dimensiones, pero la idea es formar volúmenes que puedan ser evaluados individualmente e ir haciendo iteraciones para hallar un punto de convergencia donde se solucione el modelo como un todo. La figura 2.1 muestra las pequeñas divisiones hechas en la figura principal para que a través del análisis computacional se llegue a una solución convergente de todos los puntos.

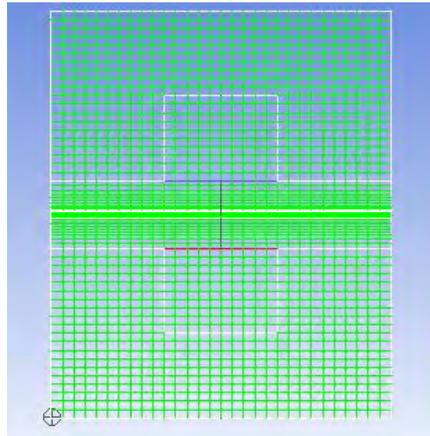


Figura 2.1. Ejemplo de una malla de la sección transversal de una celda de combustible.

Dos de los parámetros que se deben de tener en cuenta para la generación de la malla para una geometría son el volumen de análisis, cuyas dimensiones determinan la precisión del análisis y lo demandante que pueda resultar el proceso de simulado. La precisión de la malla es directamente proporcional a la cantidad de nodos (intersecciones entre volúmenes de control).

En la metodología de volúmenes de control finito, se deben de derivar las ecuaciones diferenciales y establecer las condiciones límite para resolverlas para los campos de velocidad y de presión en un flujo de fluido. Para comenzar con el modelado matemático de un fluido, es necesario partir de un modelo diferencial en donde sea más sencillo, es decir, brindar convergencia a nuestro modelo matemático. Las ecuaciones que gobiernan el flujo de fluidos están dadas por las leyes de conservación físicas, las principales son:

- La masa del fluido se conserva.
- La tasa de cambio del impulso es igual a la suma de las fuerzas en una partícula de fluido (segunda ley de Newton).
- La tasa de cambio de la energía es igual a la suma de la entrada de calor y el trabajo realizado en la partícula de fluido (primera ley de la termodinámica).

## 2.2 Ecuación de continuidad

En la figura 2.2 se muestra la parte diferencial de una partícula de fluido que aún conserva todas las propiedades “ $\phi$ ” [12].

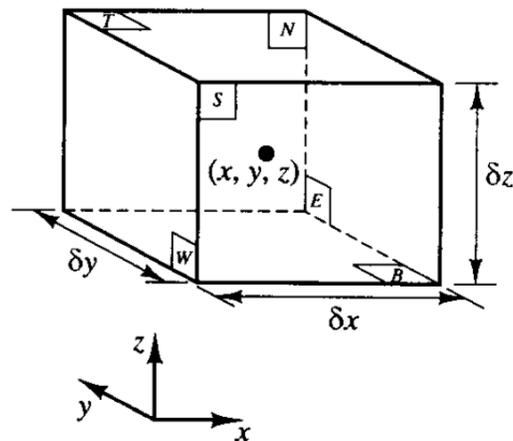


Figura 2.2 volumen de control para una partícula de fluido.

Se define a la ecuación de continuidad como:

$$\dot{m}_{entrada} - \dot{m}_{salida} = \frac{\partial}{\partial t} m_{elemento} \quad \text{Ecuación 2.1}$$

Incremento de masa en un punto diferencial.

Para este balance de masa, se posiciona a  $\rho u$ ,  $\rho v$  y  $\rho w$  en el centro del elemento y posteriormente cada uno de esos productos será tratado como una sola variable. Al ser la densidad una función no lineal se utilizará el teorema de Taylor para alcanzar una mejor aproximación a su comportamiento real. Siendo el volumen de control propuesto un elemento diferencial, considerando como suficientes solamente los primeros dos términos de la serie. Por ejemplo, la presión en las caras E y W pueden ser representadas como:

$$p - \frac{\partial p}{\partial x} \frac{\delta x}{2} \quad \text{Y} \quad p + \frac{\partial p}{\partial x} \frac{\delta x}{2} \quad \text{Ecuación 2.2}$$

Aproximación a la fórmula de densidad mediante el teorema de Taylor.

### *Conservación de la masa en tres dimensiones*

Tomando en cuenta que la tasa de incremento en el elemento es igual a la tasa neta de flujo en el fluido, se tiene que la tasa de incremento de masa en volumen de fluido es:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \delta x \delta y \delta z) = \frac{\partial \rho}{\partial t}(\delta x \delta y \delta z) \quad \text{Ecuación 2.3}$$

Incremento de masa por unidad de volumen.

Ahora, es necesario conocer el flujo másico de fluido a través de una de las caras del elemento, dada por el producto de la densidad, el área y la velocidad de la componente perpendicular a la superficie, es decir;

$$\dot{m} = \rho \times \bar{V} \times A \quad \text{Ecuación 2.4}$$

Flujo másico en función de la densidad.

Donde  $\rho$  es la densidad,  $\bar{V}$  es la resultante de la velocidad y  $A$  es el área donde pasa el flujo. Esto se demuestra fácilmente con un análisis dimensional.

$$\left[ \frac{Kg}{s} \right] = \left[ \frac{Kg}{m^3} \times \frac{m}{s} \times m^2 \right] \quad \text{Ecuación 2.5}$$

Comprobación dimensional de la veracidad de la ecuación 2.4.

Posteriormente, se descomponen cada una de las variables en función de los vectores unitarios, de tal forma que las velocidades en  $x$ ,  $y$  y  $z$  sean  $u$ ,  $v$  y  $w$  respectivamente. Desarrollando los productos y estableciendo que los flujos dirigidos hacia el elemento producen un incremento de masa y reciben un signo positivo, a aquellos flujos que salen del elemento se les asigna un número negativo.

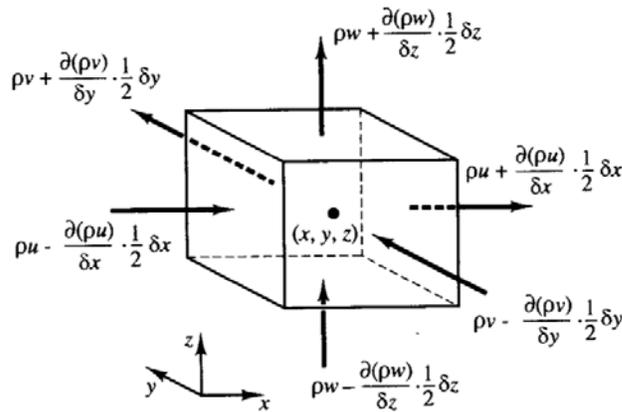


Figura 2.3 Tasa de incremento de masa en cada una de las caras de nuestro elemento diferencial.

La tasa de incremento de masa es igualada con los flujos másicos a través de las caras del elemento:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t}(\delta x \delta y \delta z) &= \left( \rho u - \frac{\partial \rho u}{\partial x} \frac{1}{2} \delta x \right) \delta y \delta z - \left( \rho u + \frac{\partial \rho u}{\partial x} \frac{1}{2} \delta x \right) \delta y \delta z \\ &+ \left( \rho v - \frac{\partial \rho v}{\partial y} \frac{1}{2} \delta y \right) \delta x \delta z - \left( \rho v + \frac{\partial \rho v}{\partial y} \frac{1}{2} \delta y \right) \delta x \delta z \\ &+ \left( \rho w - \frac{\partial \rho w}{\partial z} \frac{1}{2} \delta z \right) \delta x \delta y - \left( \rho w + \frac{\partial \rho w}{\partial z} \frac{1}{2} \delta z \right) \delta x \delta y \end{aligned} \quad \text{Ecuación 2.6}$$

Incremento de masa en un punto diferencial en función de los flujos másicos.

Se divide ambos lados de la ecuación entre el volumen del elemento:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \left( \frac{\rho u}{\delta x} - \frac{1}{2} \partial \rho u \right) - \left( \frac{\rho u}{\delta x} + \frac{1}{2} \partial \rho u \right) + \left( \frac{\rho v}{\delta y} - \frac{1}{2} \partial \rho v \right) - \left( \frac{\rho v}{\delta y} + \frac{1}{2} \partial \rho v \right) + \left( \frac{\rho w}{\delta z} - \frac{1}{2} \partial \rho w \right) - \left( \frac{\rho w}{\delta z} + \frac{1}{2} \partial \rho w \right) \quad \text{Ecuación 2.7}$$

Simplificación de la ecuación 2.6.

Reduciendo términos semejantes e igualando a cero.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho z)}{\partial t} = 0 \quad \text{Ecuación 2.8}$$

Simplificación de la ecuación 2.7.

En una notación vectorial, más compacta:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \vec{V}) = 0 \quad \text{Ecuación 2.8}$$

Forma final de la ecuación (flujo compresible).

De esta forma se obtiene la ecuación de continuidad para flujo compresible en un punto. Para un flujo incompresible, la densidad es constante (no varía respecto al tiempo) por lo que la ecuación es:

$$\text{div}(\rho \vec{V}) = 0 \quad \text{Ecuación 2.8}$$

Forma final de la ecuación (flujo incompresible).

## 2.3 Conservación de momentum

Suponiendo que se desconoce el campo de velocidad o el campo de presión en un flujo incompresible; esto se puede realizar a través de ecuaciones diferenciales dando paso a tres ecuaciones basadas en las tres incógnitas de las componentes de la velocidad [12].

Las ecuaciones de conservación de la energía y de impulso establecen los cambios en las propiedades de las partículas del fluido. Cada propiedad depende de la posición ( $x$ ,  $y$ ,  $z$ ) de la partícula y del tiempo  $t$ . Se define a  $\phi$  como la propiedad que se desea analizar del elemento diferencial.

El cambio de la propiedad  $\phi$  respecto al tiempo por unidad de masa puede ser escrita como  $\frac{D\phi}{Dt}$  y se puede desglosar de la siguiente manera.

$$\frac{D\phi}{Dt} = \frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial \phi}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial \phi}{\partial y} \frac{dy}{dt} + \frac{\partial \phi}{\partial z} \frac{dz}{dt} \quad \text{Ecuación 2.9}$$

Sabiendo que a las partículas siguen el flujo, se puede afirmar que  $dx/dt=u$ ,  $dy/dt=v$  y  $dz/dt=w$ . Por lo que su resultante será igual a  $\vec{V}$ .

$$\frac{D\phi}{Dt} = \frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} + v \frac{\partial \phi}{\partial y} + w \frac{\partial \phi}{\partial z} = \frac{\partial \phi}{\partial t} + \vec{V} \cdot \text{grad } \phi \quad \text{Ecuación 2.10}$$

En el caso de la conservación de la masa, es necesario conocer los cambios por unidad de volumen, por lo que se multiplica a  $\frac{D\phi}{Dt}$  por la densidad (esta ecuación representa el cambio de la propiedad por unidad de masa).

$$\rho \frac{D\phi}{Dt} = \rho \left( \frac{\partial \phi}{\partial t} + \bar{V} \cdot \text{grad } \phi \right) \quad \text{Ecuación 2.11}$$

Las formas más útiles de las leyes de conservación para la computación de flujo de fluidos comprenden los cambios de una propiedad de flujo para un elemento estacionario en el espacio. La relación existente entre la derivada de la propiedad  $\phi$ , que sigue a un partícula de fluido, y una tasa de cambio de  $\phi$  para un elemento de fluido, se desarrolla a continuación.

Recordando la ecuación de continuidad para flujo compresible (Ecuación 2.8)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \bar{V}) \quad \text{Ecuación 2.12}$$

Y generalizando para representar cualquier cambio en la propiedad del fluido, queda la ecuación de esta forma.

$$\frac{\partial(\phi\rho)}{\partial t} + \text{div}(\rho\phi\bar{V}) \quad \text{Ecuación 2.13}$$

La fórmula 2.13 expresa la tasa de cambio de  $\phi$  por unidad de volumen más el flujo neto  $\phi$  fuera del elemento por unidad de volumen. La ecuación se reescribe para mostrar su relación con la tasa de cambio de alguna magnitud física de  $\phi$ .

## 2.4. Estrategia de solución Fluent

El programa Fluent combina el modelado matemático en una interfaz amigable que analiza los elementos utilizando el método de volúmenes de control finitos. En Fluent existen dos tipos de solucionadores disponibles: aquellos basados en la presión y aquellos basados en la densidad. El solucionador basado en presión, toma el momentum y la presión (o la corrección de presión) como variables primarias. El arreglo de algoritmos de presión-velocidad es derivado de una reformatión de la ecuación de continuidad [11].

A su vez, dos algoritmos están disponibles para resolver el solucionador basado en presión: el solucionador segregado (corrige las ecuaciones de presión y momentum secuencialmente) y el solucionador acoplado (Resuelve presión y momentum simultáneamente).

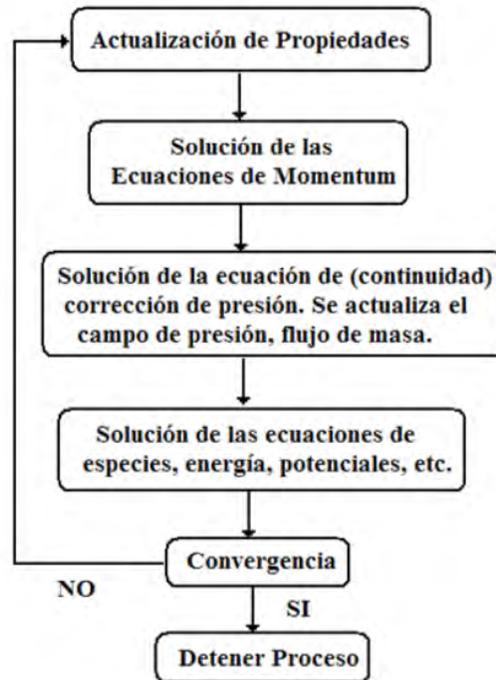


Figura 2.4 Diagrama de solución por el método segregado [11].

## 2.5 Estrategia de simulación general

Existen tres partes en el proceso de modelado matemático cuando se utiliza CFD.

- El pre-procesamiento, que comprende el modelado del cuerpo sólido y la generación del mallado.
- El solucionador (donde se aplican las ecuaciones de transporte y se resuelven las ecuaciones para cada nodo de la malla).
- El post-procesamiento, donde se analizan los resultados obtenidos.

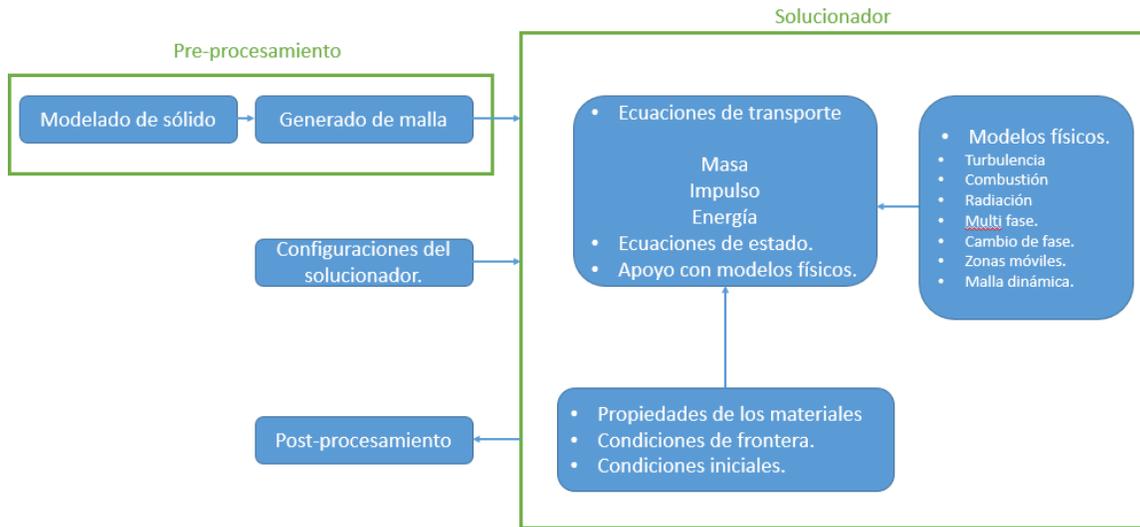


Figura 2.5 Partes del proceso de solucionado del modelo.

Un aspecto muy importante que debe tomarse en cuenta es el del dominio computacional que será evaluado, es decir, el mallado. El mallado es la forma de representar las regiones de interés para el análisis de un fluido o de un sólido.

En el mallado, también se puede incurrir en errores que lleven a interpretaciones incorrectas de los resultados. Si no se pone el tamaño lo suficientemente pequeño de malla en el lugar de interés, se puede terminar con una respuesta poco satisfactoria, en cambio, si se excede el número de nodos en un lugar donde no se desea hacer un análisis más profundo, se terminará con un tiempo de computación excesivamente largo que podría haber sido acortado.

Al término del modelado, se puede hacer una validación experimental para corroborar que los valores obtenidos pertenezcan a magnitudes dentro del rango de la realidad.

1. Selección del modelo.
2. Adecuación del modelo.
3. Validación del modelo.

Para validar el modelado matemático de las celdas de combustible, los datos deben de proceder de información experimental. En caso de que existan variaciones por mínimas que sean, estas tienen que ser puestas a prueba y en caso de no existir la información previa se deben de realizar las pruebas pertinentes, como se observa en el diagrama de flujo de la Figura 2.6.

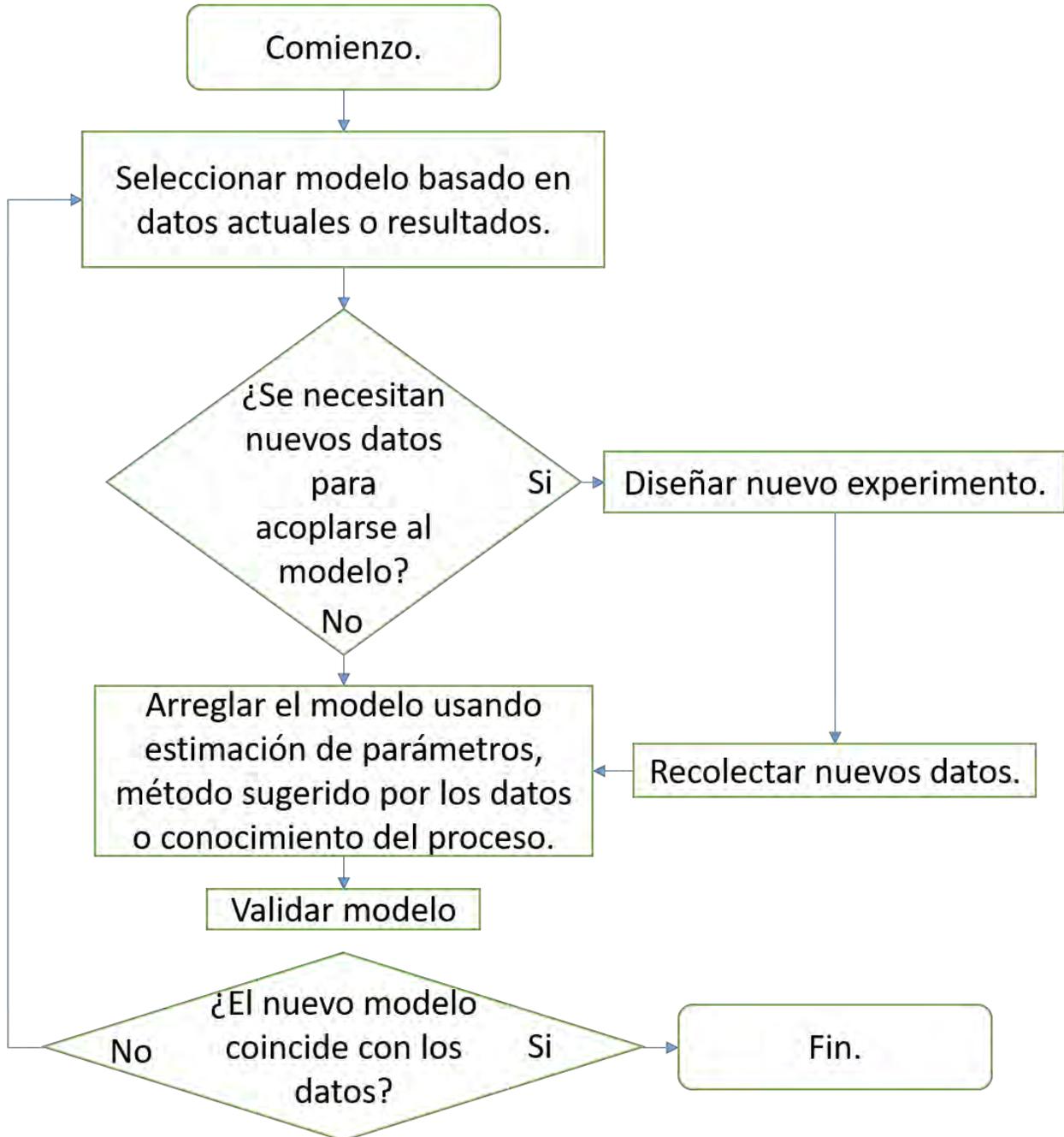


Figura 2.6. Algoritmo de operación para la validación de un modelo.

## CAPÍTULO 3

### 3.1 Simulación de una celda de dimensiones y geometría convencionales

En este capítulo se presenta la simulación de una celda de combustible mediante el programa Fluent, se realiza una malla que incluye todas las partes de una celda de combustible, asimismo, servirá para tener la celda convencional como punto de referencia respecto al prototipo de la celda.

La geometría creada para el modelado y simulación es para una mono celda de un solo canal basado en el tutorial 2004 de PEMFC de FLUENT. A continuación se describe el proceso de simulación de una mono celda tipo PEM de un solo canal de contra flujo. Las dimensiones de esta celda son 2.4 x 2.88 x 125 mm en direcciones  $x$ ,  $y$  y  $z$  respectivamente. El área de sección transversal del ensamble se observa en la figura 3.1. Esta celda tiene mallados distintos en las distintas partes, una mayor densidad donde se requiere de mayor precisión. En total son 143, 589 nodos (puntos de conexión entre volúmenes de control), considerados suficientes por el tutorial para el alcance de la convergencia. La malla, desde luego tiene distintas zonas que se deben de definir como las distintas partes de la celda.

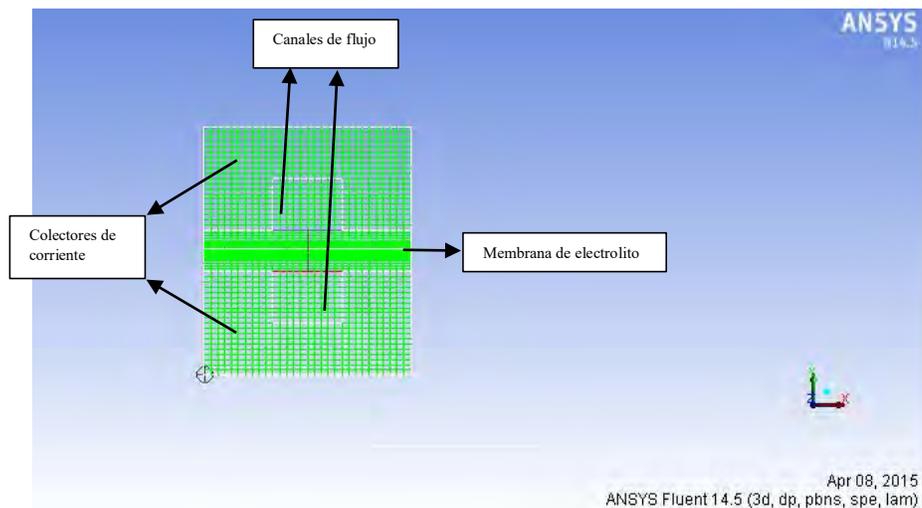


Figura 3.1. Malla que representa la división de la geometría para la aplicación de la solución por medio de volúmenes finitos.

Se hace énfasis en la sección donde se encuentra la capa catalítica. Nótese que los canales de flujo están dispuestos directamente sobre los electrodos y, por causa de las dimensiones no se muestran las capas de difusión de gases y catalíticas.

#### 3.1.1 Iniciar Fluent

Para comenzar, se abre el software Ansys Fluent 14.5 y se procede a cargar la malla en la modalidad de 3D con el marcador de doble precisión estando verificado, tal como muestra la Figura 3.2.

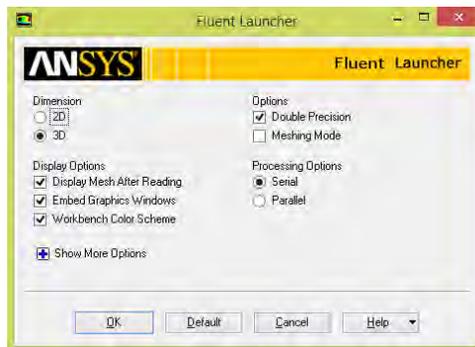


Figura 3.2. Primera ventana que se observa al abrir el programa Fluent.

Se puede iniciar Fluent en el *Parallel mode* que sirve para utilizar todos los núcleos del procesador, en el caso de esta tesis se trabaja con un Intel i7-4500U que cuenta con 2 núcleos virtuales y 2 reales, así que el procesador en cuestión puede soportar hasta 4 procesos.

Hay que tener cuidado de no activar la casilla que marca *Meshing Mode* (Modo de Mallado) que nos impedirá hacer el análisis, esta modalidad del programa es solamente para definir fronteras y propiedades de la geometría proporcionada.

### 3.1.2 Leer la malla.

Se abre el archivo de malla (*mesh*) que tiene extensión *.msh* al desplegar las opciones de archivos (file) que aparecen en la barra de tareas. Se verifica la malla mediante un análisis de la malla siempre, el cual debe de realizarse para verificar la integridad de la malla y en especial, verificar que el volumen de control mínimo sea un número positivo.

Una vez cargada la malla, esta puede visualizarse marcando las opciones de la pestaña *Display>Mesh*, la cual abrirá una ventana como la que se muestra en la Figura 3.3.

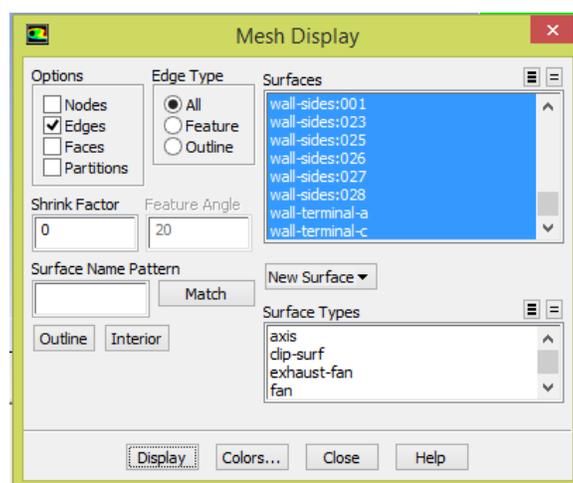


Figura 3.3.- Menú de presentación de la malla.

Al seleccionar la opción de *Edges* (bordes), todos los tipos y seleccionar todos los bordes existentes en la malla, y dar click al botón *display*. Se mostrará en la pantalla una malla igual a la de la Figura 3.4.

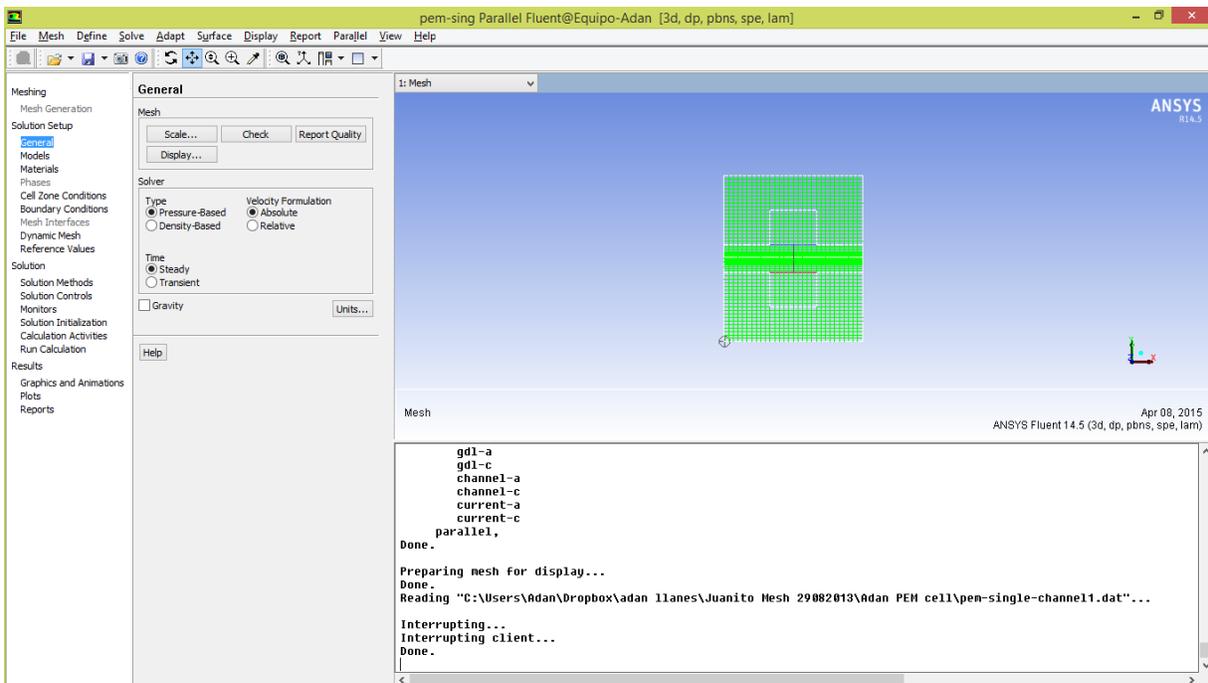


Figura 3.4.- Interfaz de Fluent que muestra la cara frontal de la malla para simulación de una celda de combustible.

## 3.2 Definir el modelo

Se debe de cargar el modelo para PEMFCs que se define desde la interfaz escrita al ingresar el texto `"/define/models/addonmodule 3"`. Esto se hace para cargar las ecuaciones estándar utilizadas en la resolución de modelos de celdas de combustible. Si la carga se realizó correctamente, se desplegará el mensaje *"Addon Module: fuelcells2.2...loaded!"*. El cálculo del área de la superficie de la membrana para el post-procesamiento es igual al área de la superficie del cátodo, misma que ha sido nombrada *wall-terminal-c*.

En la pestaña de *Report*, en la barra de tareas, se selecciona la opción *Result reports*. Se notará que ha cambiado la ventana más cercana a la malla. Al realizar doble click en la opción *Projected areas* se pueden ver las opciones. A continuación, se selecciona la opción "Y" para la dirección de la proyección y se selecciona a *wall-terminal-c* como la superficie. Para finalizar, elegir la opción *compute* en la parte inferior izquierda de la ventana emergente. El resultado en este caso es  $3 \times 10^{-4} m^2$  como se muestra en la ventana de *Projected Surface Areas* en la Figura 3.5.

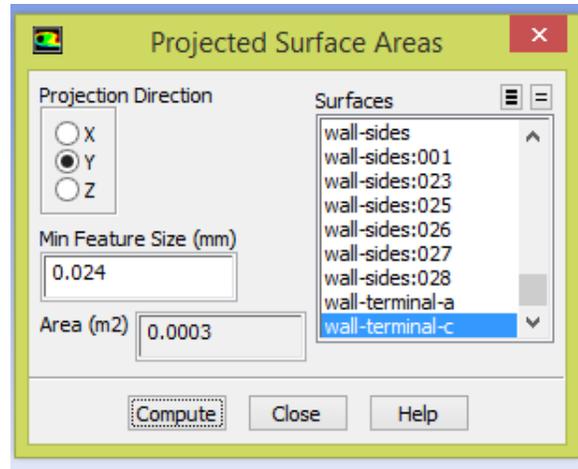


Figura 3.5.- Ventana de áreas proyectadas.

Para tener un mejor post-proceso, se permite a las UDS-2 y UDS-3 ser post-procesadas en medios sólidos y líquidos. Para realizar este paso, se selecciona en la barra de tareas el elemento *Define>User defined>Scalars* y se cambia la pestaña de *solution zones* a *all zones*, tal y como se muestra en la Figura 3.6 y aquí se pueden definir condiciones iniciales y propiedades invariantes de los materiales y flujos.

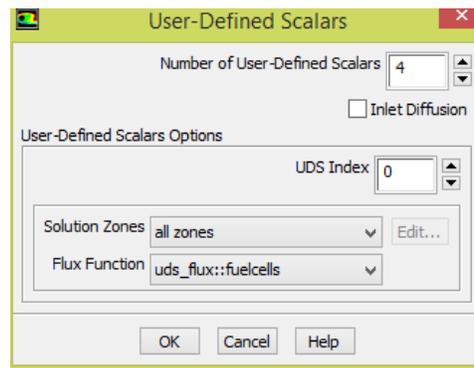


Figura 3.6.- Opciones de escalares definidos por el usuario.

### 3.2.1 Configuración del modelo

En la ventana izquierda de la pantalla, en las opciones de “*solution setup*” se encuentra la opción para configurar el modelo y se puede acceder a ella dando doble clic sobre la frase *Fuel Cells and Electrolysis*, Figura 3.7.

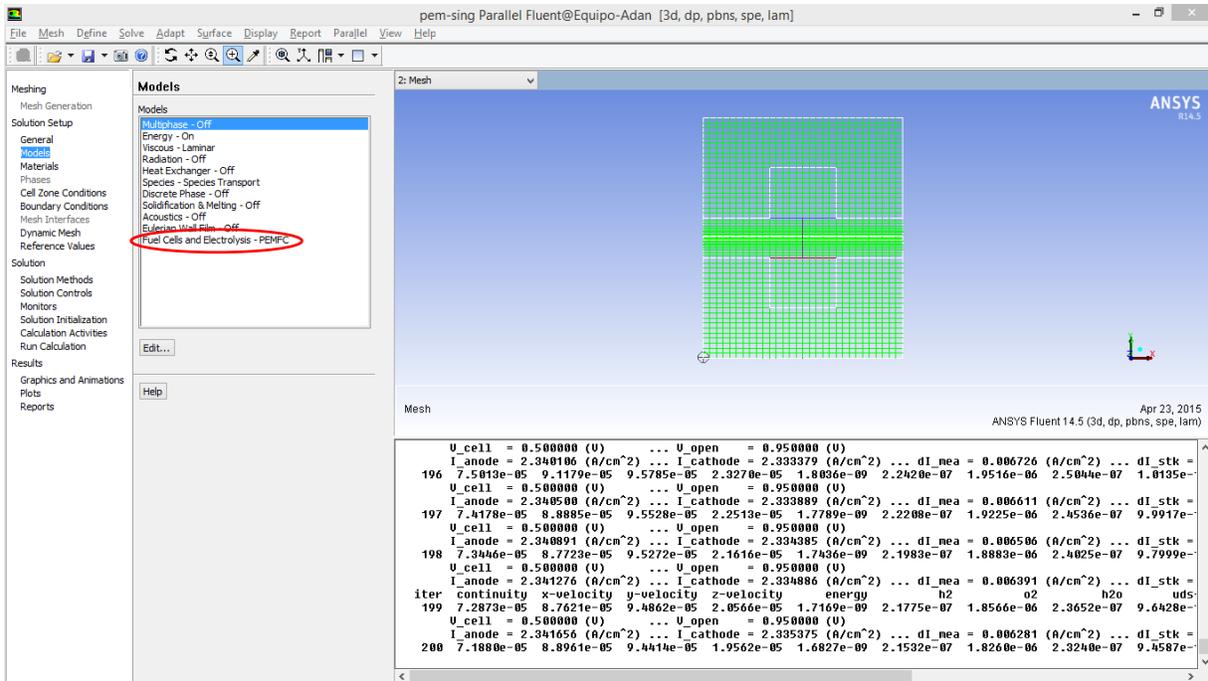


Figura 3.7 Opciones de modelos disponibles.

En la ventana subsecuente aparece una lista de los modelos disponibles.

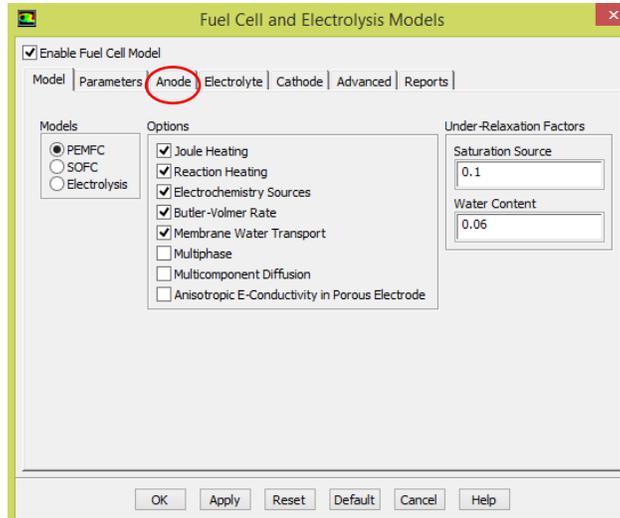


Figura 3.8.- Definición del modelo de una PEM en Fluent.

Para esta configuración se pueden seguir los siguientes pasos en el modelo a la celda de combustible:

1. Se elige la pestaña *Anode* (Ánodo) como se muestra en la figura 3.8.
2. Se selecciona en *Anode Zone Type* (Tipos de zona del ánodo) la opción de *current collector* (colector de corriente) y se define como *current-a* dando un click sobre esa opción y después en el botón *Apply*.

3. Se selecciona *Flow Channel* (canal de flujo) en el mismo apartado (*Anode Zone Type*) y se define dando un click sobre la opción *channel-a* y después en el botón *Apply*.
4. Se selecciona *Porous Electrode* (también conocida como GDL o capa difusora de gases) y se define seleccionando la opción *gdl-a* y después en el botón *Apply*.
5. Se selecciona *Catalyst Layer* (capa catalítica) y selecciona *catalyst-c* en la caja de selección de zona(s).
6. Se selecciona la pestaña *Electrolyte*.
7. Seleccione membrana de la lista de selección de la(s) zonas(s) de membrana.
8. Se accede la pestaña *Cathode*.
9. Se escoge *Current Collector* en la caja de grupo *Cathode Zone* y defina a *current-c*.
10. Se escoge *Flow Channel* de la sección de tipo de zona de cátodo (*Cathode Zone Type*) y selecciona *channel-c* como el canal de flujo.
11. Se selecciona *Porous Electrode* de la sección de tipo de zona de cátodo (*Cathode Zone Type*) y seleccione *gdl-c* como la capa de difusión de gases.
12. Se elige *Catalyst Layer* de la sección de tipo de zona de cátodo (*Cathode Zone Type*) y después se define a *catalyst-c* como el canal de flujo.
13. Se selecciona la pestaña de reportes.
14. Se especifica el valor del área proyectada de la unión electrodo-membrana en  $0.0003 \text{ m}^2$  (valor obtenido anteriormente, en el paso 2)
15. Se selecciona *wall-terminal-a* de la lista de selección de ánodo y se selecciona *wall-terminal-c* de la lista de selección de cátodo.
16. Dé un click en “ok” para cerrar la ventana de opciones de PEMFC.FLUENT informará que se ha activado automáticamente la ecuación de energía. Para su conveniencia, el modelo de PEMFC también activará el transporte de especies y creará materiales predefinidos.

### 3.2.2 Condiciones de operación

1. En la barra de tareas, se selecciona Define>OperatingConditions.
2. Se ingresa una presión de operación de 200 kPa.
3. Se da clic en “ok” para cerrar el panel de operaciones de condiciones de operación.

### 3.2.2 Condiciones de frontera

En la barra de tareas, se selecciona Define>BoundaryConditions...

Hay varias zonas que deben de ser especificadas en el panel de condiciones de frontera. Estas comprenden el voltaje en las terminales del cátodo y ánodo, así como los flujos de entrada y salida.

1. Configuración de las condiciones de frontera para *wall-terminal-a*.
  - a. Se accede a la pestaña *Thermal* en la ventana que se activa al dar clic en el botón “Edit” y se ingresan 353 K ( $\approx 80^\circ\text{C}$ )
  - b. Se selecciona la pestaña de UDS.
    - i. Se selecciona *Specified Value* de la lista de selección de *User-Defined Scalar Boundary Value*.
    - ii. Se ingresa 0 como potencial eléctrico en la caja de grupo de *User-Defined Scalar Boundary Value*.

2. Esta condición de frontera representa una terminal puesta a tierra.
  - a. Se selecciona “ok” para cerrar el panel *Wall*.
3. Configuración de las condiciones de frontera para *wall-terminal-c*.
4. A ésta superficie, el voltaje es mantenido en un valor constante positivo.
  - a. Se abre la pestaña *Thermal* e ingrese 353 K en temperatura.
  - b. Se da un click en la pestaña de UDS.
    - i. Se selecciona *Specified Value* de la lista de opciones de Electric Potential en la caja de grupo *Scalar Boundary Condition*.
    - ii. Ingrese 0.75 como potencial eléctrico en la caja del grupo *User Defined Scalar Boundary Value*.
5. Ésta condición de frontera representa una terminal que opera a 0.75 volts.
  - i. Se da un click en “OK” para cerrar el panel *Wall*.

Para calcular una curva de polarización, se debe variar el potencial eléctrico del cátodo, comenzando de un voltaje cercano al de circuito abierto e ir decreciendo gradualmente, convergiendo en la solución cada vez que el valor sea cambiado.

1. Configuración de las condiciones de frontera para la entrada de flujo de gas en el ánodo, *inlet-a*.
2. En esta entrada, ingresa un flujo de hidrógeno humidificado hacia la celda de combustible. Ningún líquido ingresa en el canal.
  - a. Se ingresa  $6.0 \times 10^{-7}$  kg/s para la tasa de flujo másico y 0 para la presión manométrica inicial/ flujo supersónico.
  - b. Se selecciona la pestaña *Thermal* e ingrese 353 K como temperatura.
  - c. Se selecciona la pestaña *Species* y se configuran las fracciones de masa de h<sub>2</sub>, o<sub>2</sub> y h<sub>2</sub>o en 0.8., 0.0 y 0.2, respectivamente.
  - d. Se selecciona la pestaña de UDS y seleccione *Specified Value* de la lista de selección de *Water Saturation* en la caja de grupo de *User-Defined Scalar Boundary Condition*.
  - e. Se ingresa 0 para la saturación de agua en la caja de grupo de *User-Defined Scalar Boundary Value*.
  - f. Se da click en “OK” para cerrar el panel de ingreso de flujo másico.
3. Configuración de las condiciones de frontera para el flujo de gas en el cátodo, *inlet-c*.
  - a. Se ingresan  $5.0 \times 10^{-6}$  kg/s como tasa de flujo másico.
  - b. Se selecciona la pestaña *Thermal* e ingrese 353 K para temperatura total.
  - c. Se da un click en la pestaña *Species* y configure las fracciones de masa de h<sub>2</sub>, o<sub>2</sub> y h<sub>2</sub>o en 0.0, 0.2 y 0.1, respectivamente.
  - d. Se da un click en la pestaña de UDS y seleccione *Specified Value* de la lista de selección de *Water Saturation* en la caja de grupo de *User-Defined Scalar Boundary Condition*.
  - e. Se ingresa 0 para la saturación de agua en la caja de grupo de *User-Defined Scalar Boundary Value*.
  - f. Click en “OK” para cerrar el panel de ingreso de flujo másico.
4. Configuración de las condiciones de frontera para la salida de gas en el ánodo, *outlet-a*.

- a. Se da un click en la pestaña *Thermal* e ingrese 353 K en *Backflow Total temperatura*.
  - b. Click en “OK” para cerrar el panel.
5. Para configurar las condiciones de frontera del gas que sale del cátodo, se copian las condiciones de frontera de *outlet-a* en *outlet-c*.

### 3.2.3 Controles de la solución

Las configuraciones predeterminadas del solucionador, no son suficientes para alcanzar una solución convergente, así que las siguientes modificaciones deben de ser realizadas.

1. En la ventana izquierda, bajo las opciones de *Solution* se elige la opción *Solution Controls* y bajo la caja de grupo de *under relaxation factor* se configura la presión en 0.7, momentum en 0.3, potencial protónico en 0.95 y contenido de agua en 0.95.
2. Modificar las configuraciones *Multigrid*.
  - a. Bajo la misma opción, se dirige a la opción *Advanced* que aparece marcada con una elipse roja en la Figura 3.9. Se observa que se abre una ventana como la de la figura [3.10]. Se selecciona F-Cycle de la lista de opciones de todas las ecuaciones (es necesario desplazarse hacia abajo para configurar todas las ecuaciones).

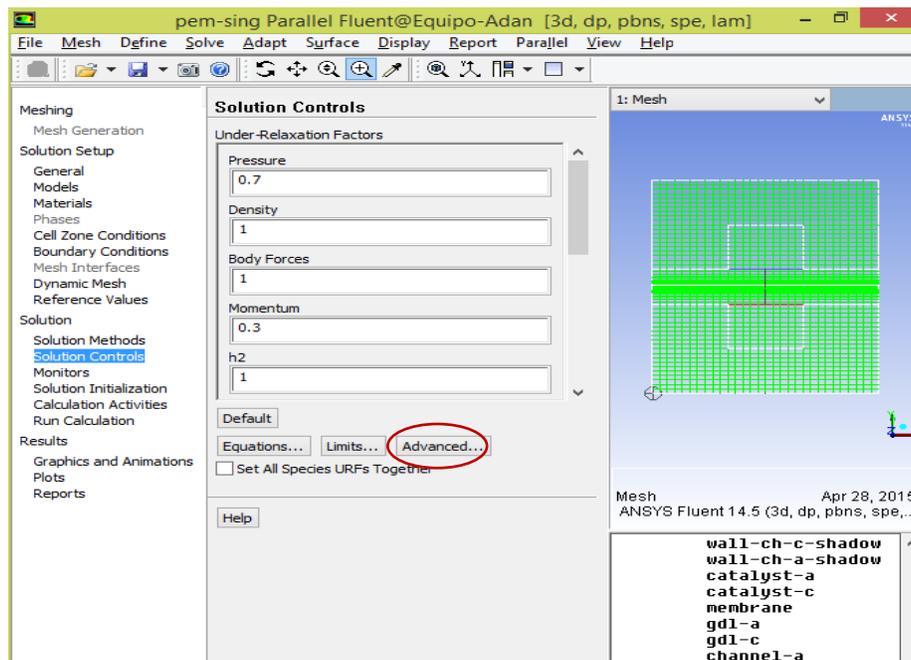


Figura 3.9 Opciones avanzadas de los controles de solución.

3. Se ingresa 0.001 Para la restricción de terminación para hidrógeno, oxígeno, agua y saturación de agua por igual.
4. Se selecciona BCGSTAB como método de estabilización para h2, o2, h2o, saturación de agua, potencial eléctrico y potencial protónico.

5. Se ingresa 0.0001 como restricción de terminación para los potenciales eléctrico y protónico.
6. Incremente el valor de ciclos máximos en la caja de grupo *Algebraic Multigrid Controls*.
7. Se da un click en OK para cerrar el panel.

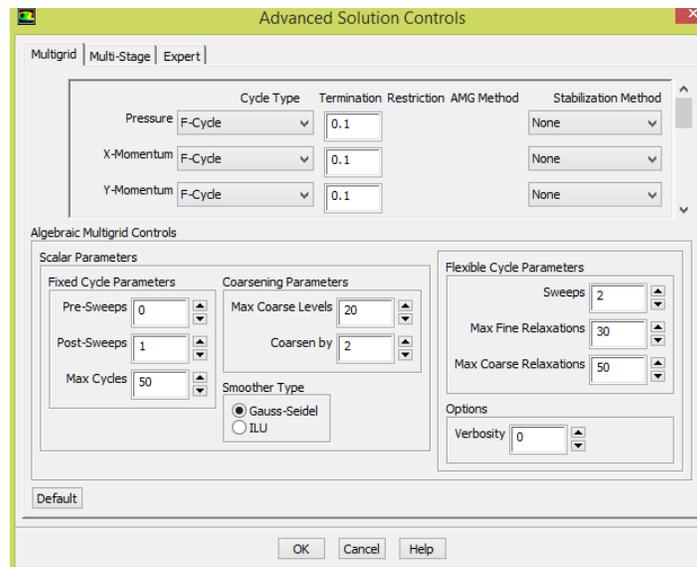


Figura 3.10 Controles de solución avanzadas.

Se activa la opción de graficar los residuales. En la ventana izquierda, bajo la leyenda *Solutions*, se elige la opción *Monitors*. El modelo de PEMFC desactiva automáticamente la verificación de convergencia para todas las ecuaciones.

Inicializar la solución. Directamente bajo la opción de *Monitors*, se encuentra la opción de *Solution Initialization*, o bien se puede acceder a la configuración en la barra de tareas en *Solve>Initialize>Initialize* y será enviado al mismo lugar. Se ingresa una temperatura en 353 K. Se da click una vez el botón *Apply*. Se da click en el botón *Init* y cierre el panel de inicialización de la solución.

Se guarda el archivo y datos como *pem-single-channel.cas.gz* y *pem-single-channel.dat.gz* mediante las opciones de la barra de tareas en *File>Write>Case & Data*. En caso de que se haya abierto FLUENT en la modalidad en paralelo, se iniciará una sesión en paralelo para el archivo abierto, así que necesitará abrir el archivo que guardó en el paso anterior.

Se le solicitan 200 iteraciones al programa. Los valores residuales de la solución decaerán a valores aceptables. Se va a la barra de tareas y se siguen las opciones de *Solve>Run calculation*. La gráfica de solución residual deberá ser como la de la Figura 3.11. La corriente promedio se muestra en la consola al final de cada iteración. Al final de las iteraciones, la densidad de corriente reportada será de aproximadamente  $0.324 \text{ A/cm}^2$ .

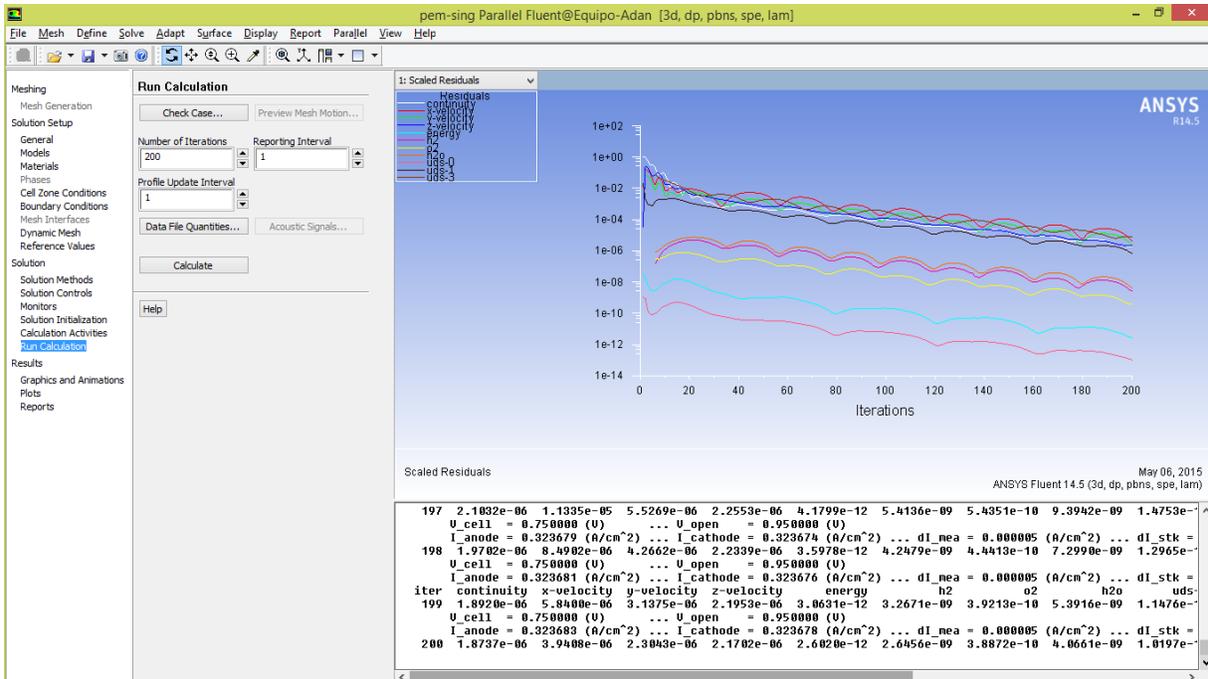


Figura 3.11.- En la ventana de la consola, se muestra la densidad de corriente entre cátodo y ánodo correspondiente con el valor esperado.

### 3.3. Post-procesamiento

Para crear superficie para el post-procesamiento, una vez terminadas las iteraciones, es necesario especificar una superficie que corte transversalmente a la celda en un punto específico.

Se selecciona de la barra de tareas *Surface>Iso-Surface* y se sigue el siguiente procedimiento:

- Se selecciona *Mesh* y *Z-Coordinate* de las listas de opciones bajo *Surface of Constant*.
- Se da un click en el botón *Compute*.
- Se ingresan 62.5 para los iso-valores (en milímetros).
- Se nombra *plane-xy* a la nueva superficie.
- Se da click en crear.
- De manera similar, es necesario crear otra superficie a lo largo de la celda de combustible. Esta superficie debe de ser con la coordenada *X* constante y con valor de 1.2. Se nombra a esta superficie como *plano-yz*.
- Se cierra el panel de iso-superficie.

Para crear vectores personalizados para mostrar, en el lado izquierdo de la ventana, bajo el título *Results*, aparece la opción *Graphics and Animations*. A continuación, se va a la opción *Vectors* en la ventana del grupo *Graphics* dando doble clic sobre ella.

- Se da un click en *Custom Vectors* para abrir el panel de vectores personalizados.
- Se nombra *current-flux-density* al nuevo vector.
- Se selecciona *User Defined Memory* y *X Current Flux Density* del componente *X* en las listas desplegables.

- d) Se selecciona *User Defined Memory* y *Y Current Flux Density* del componente Y en las listas desplegables.
- e) Se selecciona *User Defined Memory* y *Z Current Flux Density* del componente Z en las listas desplegables.
- f) Se da un click en *Define* y se cierra el panel de vectores personalizados.
- g) Se selecciona *current-flux-density* de la lista desplegable *Vectors*.
- h) Se selecciona *Filledarrow* de la lista desplegable *Style*.
- i) Elegir el botón *Vector Options* para abrir el panel de opciones de vector.
- j) Ingrese 0.5 en *Scale Head*.
- k) Se selecciona *Apply* y se cierra el panel de opciones de vector.
- l) Se selecciona *User-Defined Memory* y *Current Flux Density Magnitude* como color de las listas desplegables.
- m) Se activa *Draw Mesh* en la lista de opciones para abrir el panel de la Malla.

La Figura 3.12 muestra los resultados obtenidos de densidad de corriente y su campo de distribución.

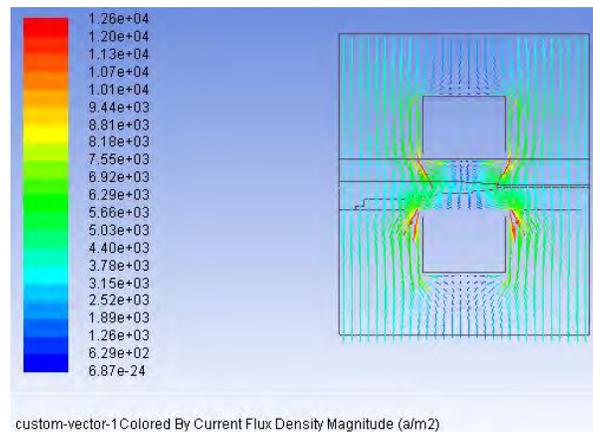


Figura 3.12 Densidades de corriente en una celda de combustible.

Se puede observar que la máxima densidad de corriente se da en las regiones entre canales. Las unidades de la gráfica están dadas en  $A/m^2$ .

## CAPÍTULO 4

### Simulación de celda de dimensiones milimétricas

La celda propuesta se diseñó y analizó, contempla las entradas de los gases reactantes a los costados del difusor con objetivo de tener un mejor transporte de masa de los canales al electrodo. La figura 4.1 muestra la geometría y malla generada en Gambit.

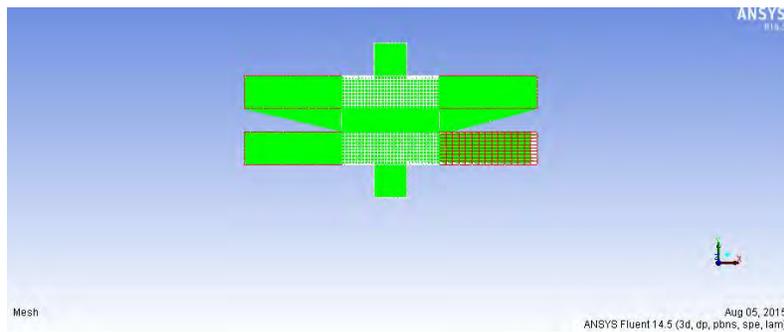


Figura 4.1 Diseño propuesto de celda de combustible.

A partir de los datos de la simulación de la celda desarrollada en capítulo anterior podemos concluir que las densidades de corriente más altas se presentan en la zona donde interactúan la capa difusora de gases y el electrodo (véase la figura 3.12). En la nueva celda, se introducirá el flujo de gases directamente en la capa difusora de gases y se pretende que haya una mejor distribución de la presión de los gases reactantes y, por lo tanto, una mejoría en la densidad de corriente obtenida. Asimismo, al no tener los canales a través del electrodo, se puede prescindir de gran parte de los mismos, reduciendo el costo. La figura 4.2 muestra los resultados obtenidos en vectores de velocidad para el diseño de CC propuesto. Esta geometría fue mallada de forma automática por la herramienta en el programa Fluent, quedando con 524,024 nodos (casi cuatro veces más que en la malla del tutorial) para asegurar la condición de independencia de la malla.

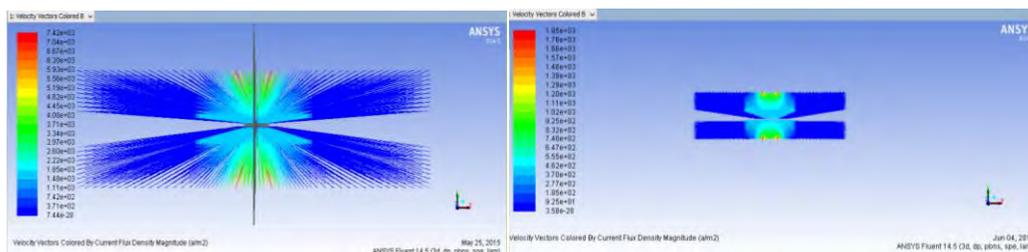


Figura 4.2 Vectores de velocidad coloreados según la densidad de corriente ( $A/m^2$ ) en el corte transversal a la mitad de la celda.

Así como se abordó en el capítulo 3, el área donde se analiza es el punto medio del largo de toda la celda. En la figura 4.1 observamos el comportamiento de la densidad de corriente respecto al voltaje bajo dos condiciones de frontera, las cuales son: 0.50 V y 0.75 V.

Se observa que la mayor parte de la conducción eléctrica, se da precisamente en el punto en donde convergen la capa difusora y el electrodo, tal y como sucedía en la celda anterior. Asimismo, podemos efectuar un análisis sobre la longitud total de la celda, que nos muestre el comportamiento de la densidad de corriente (figura 4.3).

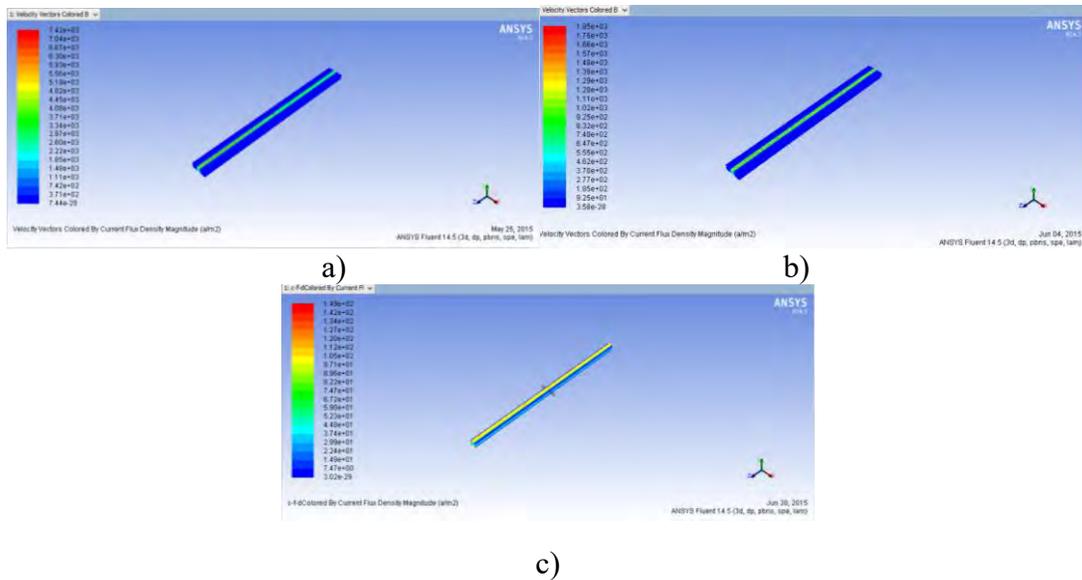
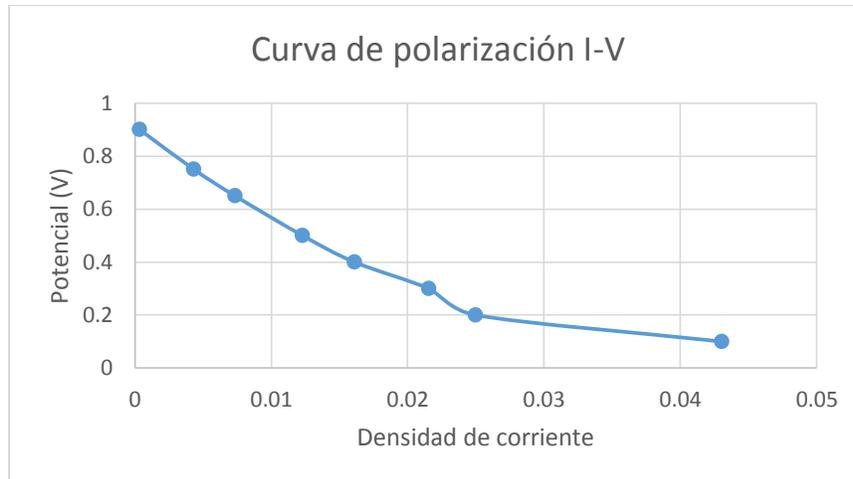


Figura 4.3 Vectores de velocidad coloreados según la densidad de corriente ( $A/m^2$ ) a lo largo de toda la celda de combustible.

De forma análoga a la que analizamos el desempeño de la celda de canal individual, analizamos nuestra propuesta, comenzando con la generación de una curva de polarización en la que verificaremos la densidad de corriente en amperes por metro cuadrado respecto al voltaje en el colector de corriente del cátodo. La densidad de corriente se adquiere del programa en cuanto se alcance una convergencia en las soluciones de la corriente que fluye en las terminales colectoras.



Gráfica 4.4 Curva de polarización de una celda de combustible con canales de alimentación de  $O_2$  y  $H_2$  directa en la GDL.

Una vez convenido el valor para la densidad de corriente debemos de repetir el proceso suponiendo distintos potenciales para poder generar una curva de polarización, tal y como la de la figura 4.4, que muestra en el eje de las abscisas la densidad de corriente [ $A/m^2$ ] y el potencial eléctrico [V] en cátodo y ánodo.

Al comparar el comportamiento de la curva de polarización con la de las pruebas experimentales se corroboraron comportamientos similares en la curva de polarización [13].

Para poder analizar el transporte de especies ocurrido en nuestra celda se pueden tomar zonas significativas y evaluar los parámetros que deseemos. Uno de los más importantes es el análisis de densidad de corriente, que mediremos en la mitad de la sección transversal, para lo cual podemos generar una “iso-superficie” exactamente en el área que vamos a analizar. En este caso, el centro de la malla coincide con el origen, lo que ahorra trabajo pero, si no lo fuera, tenemos una herramienta que posee Fluent que nos permite analizar la geometría. La ruta para acceder a ella Barra de tareas > Surface > Iso Surface. Dentro de la ventana emergente de la iso-superficie que, como su nombre lo indica (o por lo menos el prefijo “iso”) Es una superficie de una propiedad invariable (se pueden seleccionar cualidades físicas en vez de solo la malla), se selecciona la opción mesh o grid (malla) y se selecciona el eje sobre el cual se quiere analizar (si se requiere una superficie de análisis x-y se define como constante la z). Para esta tesis, todos los puntos medios coinciden sobre el origen.

Ya terminada la simulación podemos desplegar vectores personalizados para la propiedad de la densidad del flujo de corriente (*current-flux-density*) sobre la iso-superficie que hemos generado para la cara x-y y poder así ver el corte de sección transversal en el área que seleccionamos.

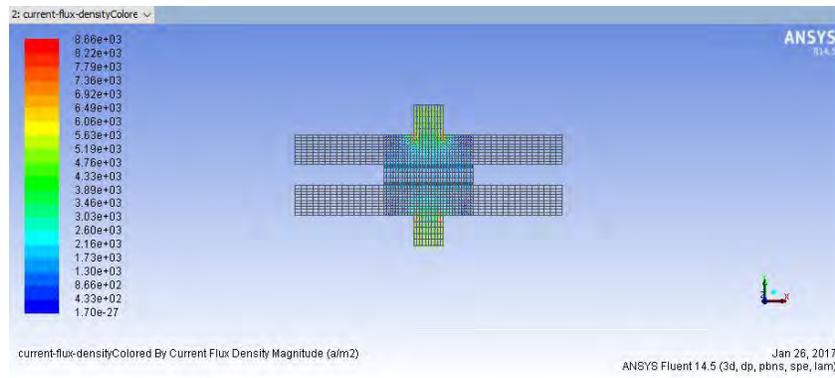


Figura 4.5 análisis de densidad de corriente en la mitad de la celda.

De la figura 4.5 podemos inferir que la máxima densidad de corriente se encuentra en la interfaz de los vértices del electrodo con la GDL, las unidades de la gráfica aparecen en  $A/m^2$ . Asimismo podemos analizar el flujo de especies en los canales al generar una iso-superficie en su interior, figura 4.6.

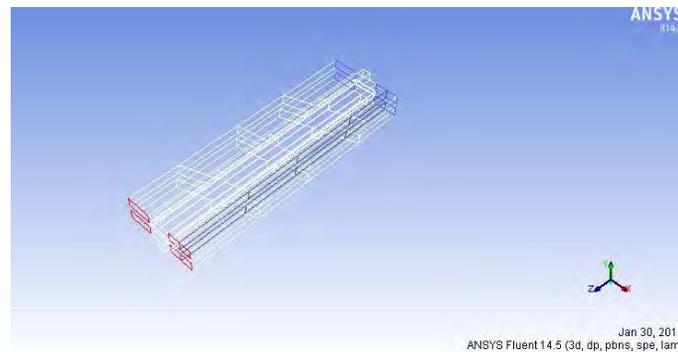


Figura 4.6 Representación de la iso-superficie (en negro) que corta sobre el plano yz a la celda de combustible.

Asumiendo un comportamiento simétrico en ambos pares de canales de flujo, una iso superficie vertical (de x constante) nos debe de bastar para ver el comportamiento del transporte de especies en el interior de los canales de hidrógeno y oxígeno, posicionada a la mitad del canal de flujo, con coordenada  $x = -3.024 \times 10^{-4}m$  que, en una representación isométrica se vería como la de la figura 4.6. Nuevamente en la ventana de la izquierda nos posicionamos en la sección de resultados y *graphics and animations*, pero esta vez en vez de vectores seleccionaremos la opción *contours*.

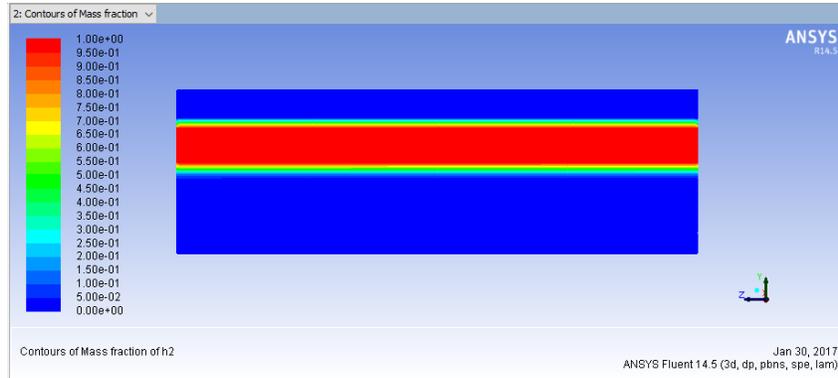


Figura 4.7 Análisis del perfil de flujo de  $H_2$  en el plano yz.

En la figura 4.7 podemos ver el decremento en la concentración de  $H_2$  conforme se consume en la capa catalítica, lo que aparece como un gradiente de color al acercarse a la misma. Cabe mencionar que se ha redimensionado la representación de la celda de combustible en los ejes  $y$  y  $z$  para poder notar el cambio.

## CONCLUSIONES

En esta tesis se realizó la simulación numérica de una celda de combustible tipo PEM de dimensiones milimétricas, mediante el software CFD FLUENT-ANSYS y la generación de la malla en GAMBIT. El diseño de la celda no solo es diferente por dimensiones, también el ordenamiento del colector de corriente es diferente en comparación con las celdas convencionales. Mediante la simulación se determinó la densidad de corriente en función del potencial global, en una curva de polarización en estado estable la corriente máxima alcanzada es de  $1.26 \times 10^{-1} \frac{mA}{m^2}$ . El objetivo general fue cubierto al estudiar las condiciones de los fenómenos internos de la celda milimétrica. De manera especial se debe resaltar que la máxima densidad de corriente se encuentra en la interfaz de los vértices del electrodo con la capa difusora, lo cual permite tomar decisiones futuras de diseño para una mejor distribución de corriente, por ejemplo, incluir la distribución de dos cables planos y/o posicionar el cable directamente sobre la capa catalítica. Como perspectivas futuras también hay que mencionar que la validación experimental es importante para mantener la estrategia de simulación como herramienta de diseño de celdas milimétricas, debido a ciertas asunciones hechas para reducir las exigencias en las iteraciones que se hacen para obtener convergencia en los datos, tales como un comportamiento isobárico en ciertas partes de la celda, hidratación constante de la celda, etc., podrían limitar la precisión de la simulación. Estas mismas condiciones son difíciles de medir en condiciones de laboratorio debido al reducido espacio en el que se llevan a cabo las reacciones y transporte de especies.

## BIBLIOGRAFÍA

- [1] Qin Fei, Rajah Rasiah. Electricity Consumption, Technological Innovation, Economic Growth and Energy Prices: Does Energy Export Dependency and Development Levels Matter. *Energy Procedia*, 2014; 61: 1142–1145.
- [2] Chafic Salame, Michel Aillerie and Panagiotis Papageorgas. The International Conference on Technologies and Materials for Renewable Energy, Environment and Sustainability. *Energy Procedia* 2015; 74: 1-3.
- [3] Gibrán S. Alemán-Nava, et al. Renewable energy research progress in Mexico: A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. 2014 32:140-153.
- [4] Ibrahim Dincer. Renewable energy and sustainable development: a crucial review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. 2000; 4: 157–175.
- [5] Colleen Spiegel, *Designing and Building Fuel Cells*, 1ra Edición. Publisher: McGraw-Hill, USA 2007, 434.
- [6] C. Spiegel. *PEM fuel cell modeling and simulation using Matlab*, Elsevier Academic Press, USA 2008, 255.
- [7]. Litster S. and McLean. PEMFC electrodes. *J. Power Sources*, 2004; 130: 61-76.
- [8] R. Barbosa, tesis de doctorado estudio teórico-experimental de la capa catalítica y su influencia en los fenómenos de transporte en una PEMFC. UNAM, México 2012.
- [9] Siegel N.P, et al. A two-dimensional computational model of a PEMFC with liquid water transport. *J. Power Sources* 2004; 128: 173-184.
- [10] Christopher Brett. *Electrochemistry. Principles, Methods, and Applications*. Oxford Science Press 1998, USA, 331.
- [11] *Fluent and Gambit Tutorial*, 2006.
- [12] H. K. Versteeg and W. Malalasekera, *An introduction to CFD, the finite volume method*, Ed. Longman Scientific and thecnical, USA, 1995, 24.
- [13] Jaliss Kuo, et al., diseño y validación experimental de una celda de combustible de alta densidad de potencia eléctrica.

### Páginas consultadas

- Secretaría de Energía. Prospectiva del Sector Eléctrico 2014-2028. <[http://www.energia.gob.mx/res/prospectiva\\_de\\_electricidad\\_2014](http://www.energia.gob.mx/res/prospectiva_de_electricidad_2014)>
- Prospectiva del Sector Eléctrico 2015-2029. <<http://www.gob.mx/cms/uploads/attachment/file/44328/>>.
- Energía y sociedad. <<http://www.energiaysociedad.es/ficha/1-1-energia-y-sociedad>>