

## Modelo termodinámico de una celda de combustible de mediana temperatura en régimen estacionario

Andrés Escalona Inzunza<sup>1</sup>, Felipe Sanhueza Gómez<sup>2</sup>, Cristian Cuevas Barraza<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Ingeniería Mecánica, Universidad de Concepción, Chile. Email: andrescalona@udec.cl

<sup>2</sup>Departamento de Ingeniería en Materiales, Universidad de Concepción, Chile. Email: fesanhueza@udec.cl

<sup>3</sup>Departamento de Ingeniería Mecánica, Universidad de Concepción, Chile. Email: crcuevas@udec.cl

### Resumen

En el presente artículo se desarrolla un modelo termodinámico de una celda de combustible cerámica protónica (PCFC). Estas celdas de combustible actualmente presentan un alto grado de interés debido a que pueden trabajar a menos temperatura que una SOFC (800°C) con similares rendimientos, a pesar de esto, el desarrollo de estas celdas es reciente y se necesita contribuir con modelos y trabajos que permitan aportar información en torno al tema para comprender su funcionamiento, poner a punto técnicas de síntesis y fabricación y realizar análisis comparativos a través de simulación. La contribución del trabajo estará orientado a obtener curvas de polarización ( $i$  v/s  $V$ ), de potencia ( $i$  v/s  $P$ ), eficiencia y potencial a diferentes temperaturas comparando el uso de hidrógeno puro de forma directa en relación con usar gas natural ( $CH_4$ ) con reformado interno.

**Palabras clave:** Celda de combustible protónica cerámica, modelado, eficiencia, densidad de corriente

### Abstract

In the present article, a thermodynamic model of a protonic ceramic fuel cell (PCFC) is developed. These fuel cells are currently of high interest because they can operate at lower temperatures than a solid oxide fuel cell (SOFC) (800°C) with similar efficiencies. Despite this, the development of these cells is recent, and there is a need to contribute with models and works that provide information on the subject to understand their operation, refine synthesis and fabrication techniques, and conduct comparative analyses through simulation. The contribution of this work will be oriented towards obtaining polarization curves ( $i$  vs.  $V$ ), power curves ( $i$  vs.  $P$ ), efficiency, and potential at different temperatures, comparing the use of pure hydrogen directly versus using natural gas ( $CH_4$ ) with internal reforming.

**Keywords:** Protonic ceramic fuel cells, Modelling, Efficiency, Current density

### 1. Introducción

Una celda de combustible cerámica protónica (PCFC) es un dispositivo electroquímico que convierte energía química en eléctrica utilizando protones como portadores de carga. A diferencia de las celdas de combustible de óxidos sólidos (SOFC) que operan a temperaturas muy altas (alrededor de 800°C), las PCFC pueden funcionar a temperaturas más bajas (400-700°C). Esto se debe a que el electrolito cerámico en las PCFC conduce protones en lugar de iones de oxígeno, lo que reduce la resistencia y mejora la eficiencia. Además, las PCFC tienen la ventaja de poder utilizar una variedad de combustibles, incluidos

hidrógeno puro y gas natural, lo que las hace versátiles para aplicaciones energéticas. Otra ventaja de las PCFC es que se prevé que el costo de producción es un 30% menor comparado con las SOFCs [1].

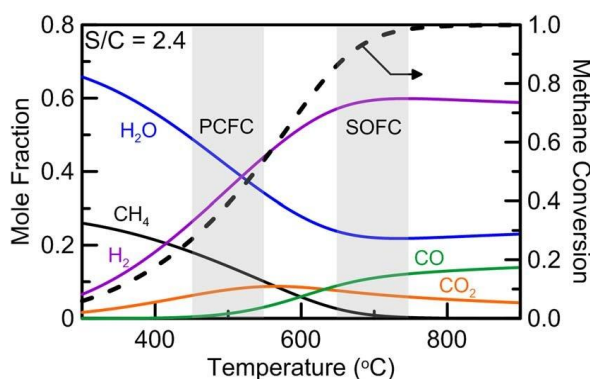
La modelación de este tipo de celdas es algo reciente ya que aún están en desarrollo la manufactura de diferentes tipos de materiales para lograr una mayor eficiencia. Para la modelación realizada en el trabajo, se uso LSM (lantano, estroncio y manganita) para el cátodo, NI-YSZ (níquel de catalizador con un cerámico de Itria estabilizado con zirconio) y para el electrolito que cumple la función de ser el conductor protónico se

usa BCS ( $\text{BaCe}_{0.8}\text{Sm}_{0.2}\text{O}_{2-\delta}$ ) el cual fue caracterizado en detalle por Zhang et. al [2].

Trabajos como el de Sahli et al.[3] utiliza en su modelación el mismo material mencionado previamente buscando optimizar la densidad de potencia variando la densidad de corriente, la temperatura y el espesor del cátodo, ánodo y electrolito. Utiliza como combustible hidrógeno puro.

Por otro lado, otros estudios como el de Tian et al. [4], Ranjbar et al. [5] o Milewski et al. [6] describen formas de modelación aplicadas a celdas de oxido sólido (SOFCs) integradas a sistemas o caracterizando esta celda a diferentes condiciones. Estos estudios se toman como base para realizar la simulación la cual se basará en realizar un balance termoquímico de la celda de combustible considerando una PCFC con geometría predefinida trabajando con hidrógeno puro y la misma celda considerando el uso de metano con reformado interno realizando una comparación entre ambas.

Cabe destacar que para el caso de reformado interno, se considera una simulación de  $200^{\circ}\text{C}$  a  $1000^{\circ}\text{C}$  para tener una perspectiva de que ocurre si el reformado se realiza externamente, sin embargo y de acuerdo con lo simulado por Albrecht K. Et al. [7] el reformado es eficiente a partir de los  $650^{\circ}\text{C}$  aproximadamente con factor de consumo de combustible cercano al 85% y en el caso de las celdas protónicas se obtienen resultados favorables usando reformado de metano interno en relación con la SOFC motivo por el cual, es interesante evaluar el desempeño de una celda PCFC tipo usando metano.



**Figura 1.** Cantidad de moles de especies resultantes del proceso de reformado de metano utilizando vapor en relación 1mol de metano – 2,4 moles de agua.

El balance termoquímico se basa en determinar el flujo molar de combustible y oxígeno, las pérdidas de potencial por activación, óhmicas y de concentración, el potencial de Nernst, el potencial de la celda y finalmente la potencia por unidad de área y la eficiencia.

## 1.2 Objetivos.

El objetivo general del trabajo es lograr armar un modelo termodinámico para simular una PCFC en régimen estacionario y realizar una comparación de funcionamiento utilizando hidrógeno puro y gas metano.

Los objetivos específicos se resumen a continuación:

- Definir las condiciones de borde y ecuaciones matemáticas a usar.
- Armar un modelo matemático realizando un balance para hidrógeno y metano.
- Realizar simulaciones y hacer un análisis comparativo con perspectiva de operación, eficiencia y potencia.

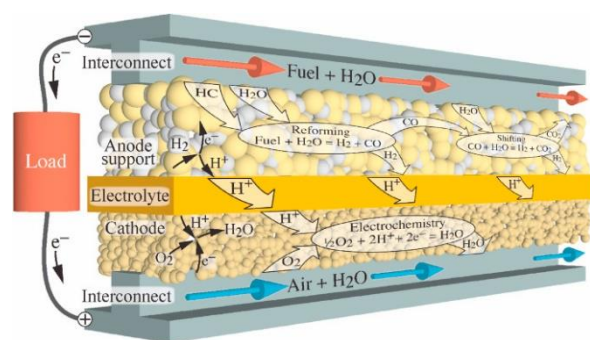
## 1.3 Hipótesis

La celda de combustible es más eficiente a todo evento y genera más potencia utilizando hidrógeno.

## 2. Metodología

### 2.1 Modelo termodinámico

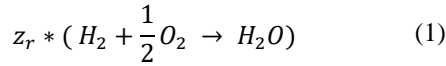
Una celda de combustible cerámica protónica se compone al igual que sus pares de 2 electrodos y 1 electrolito con naturaleza de conducción protónica (la reacción de reducción del oxígeno e hidrógeno ocurre en el cátodo). Para mayor compresión del funcionamiento, se toma como referencia a Le et al. [8] quien elabora un esquema ilustrativo de una PCFC operando con metano reformado.



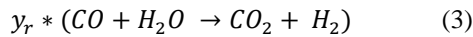
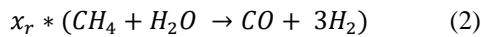
**Figura 2.** Esquema de funcionamiento de una PCFC alimentada con aire húmedo y metano reformado con vapor.

En el caso de usar hidrógeno. La reacción de reformado y de desplazamiento de agua no se lleva a cabo, por lo que sólo se transfieren electrones en el ánodo sin que ocurra ninguna reacción adicional en su frontera.

La reacción general de la formación de agua al reaccionar el hidrógeno con agua se muestra en la ecuación (1).



En el caso de suministra metano, se deben considerar previamente a la reacción general, el reformado que se muestra en la ecuación (2) y el desplazamiento de agua que se muestra en la ecuación (3).



$x_r, y_r, z_r$  corresponden a la cantidad de moles/s proporcionales que se llevan a cabo en cada reacción donde los flujos en la práctica pueden aumentar o disminuir.

Las consideraciones para el modelo son las siguientes:

- El cátodo y ánodo son materiales porosos que no sufren degradación en el tiempo ni pérdida de eficiencia debido a la presencia de carbono, sinterización ni aglomeración de níquel.
- La simulación se realiza en régimen estacionario programando un modelo predictivo 0-D.
- Se desprecia la resistencia de contacto entre los electrodos, electrolito y catalizadores.
- Se desprecia el efecto de los gradientes térmicos en la celda
- Se considera una densidad de corriente constante en toda la superficie de la celda.
- Se considera que todas las reacciones ocurren en la frontera de triple fase.

Las condiciones de borde del modelo se resumen en la tabla 1 [2] [3] [9].

**Tabla 1.** Valores de entrada del modelo

Variable	Nomen.	Valor
Área	$A_{FC}$	0,01 [m <sup>2</sup> ]
Presión Combustible	$P_F$	1 [bar]
Presión del aire	$P_F$	1 [bar]
Presión ambiente	$P_{ref}$	1 [bar]
Electrones transferidos	$n_e$	2
Espesor ánodo	$e_{an}$	150 [μm]
Espesor cátodo	$e_{cat}$	50 [μm]
Espesor electrolito	$e_{elec}$	10 [μm]
Temperatura de la celda	$T_{FC}$	200- 1000°C
Densidad de corriente	$j$	0 – 16000 [A/m <sup>2</sup> ]

Factor de uso comb.	$U_F$	0,2 - 1
Relación metano/vapor	SC	2,5
Factor de transferencia de electrones	$\alpha$	0,5
Energía activ. Ánodo	$E_{an}$	10 <sup>5</sup> [J/mol]
Energía activ. cátodo	$E_{cat}$	1,2 * 10 <sup>5</sup> [J/mol]
Energía activ. electrolito	$E_{el}$	0,37 [eV]
Pre-exponencial ánodo	$k_{an}$	9,577 * 10 <sup>8</sup> [A/m <sup>2</sup> ]
Pre-exponencial cátodo	$k_{cat}$	8,817 * 10 <sup>9</sup> [A/m <sup>2</sup> ]
Pre-exponencial electrolito	$k_{el}$	73500 [S/mK]
Coef. Difusividad ánodo	$D_{eff,an}$	8,98 * 10 <sup>-5</sup> [m <sup>2</sup> /s]
Coef. Difusividad cátodo	$D_{eff,cat}$	6,31 * 10 <sup>-6</sup> [m <sup>2</sup> /s]
Coef. Difusividad cátodo	$D_{eff,cat}$	6,31 * 10 <sup>-6</sup> [m <sup>2</sup> /s]
Constante de Faraday	$F$	96485 [C/mol]
Constante Universal de los gases ideales	$R$	8,314 [J/mol K]

La potencia por unidad de área ( $\dot{w}_{FC}$ ) se calcula con la ecuación (4), mientras que el voltaje real de la celda de combustible ( $V_{FC}$ ), resulta entre la sustracción entre el potencial de Nernst y las pérdidas totales de voltaje ( $\eta_{FC}$ ) tal como se muestra en la ecuación 5. [6] [10].

$$\dot{w}_{FC} = j * V_{FC} \quad (4)$$

$$V_{FC} = E_N - \eta_{FC} \quad (4)$$

El potencial de Nernst de la PCFC se calcula con la ecuación (6), donde  $E_O$  es el potencial ideal de la celda de combustible en condiciones estándar mientras que  $P_{H_2}$ ,  $P_{O_2}$ ,  $P_{H_2O}$  corresponden a las presiones parciales de los gases respectivos.

$$E_N = E_O + \frac{R * T_{FC}}{n_e * F} * \left[ \ln \left( \frac{P_{H_2} * P_{O_2}^{0,5}}{P_{H_2O} * P_{ref}^{0,5}} \right) \right] \quad (5)$$

El potencial ideal de la celda se calcula para la reacción trabajando en el punto de equilibrio de acuerdo con la ecuación (6).

$$E_O = \frac{-\Delta G_r^o}{n_e * F} \quad (6)$$

La energía libre de Gibbs de la reacción se calcula con la ecuación (7) considerando la temperatura de la celda y la presión estándar.

$$\Delta G_r^o = g_{H_2O}^o - 0,5 * g_{O_2}^o - g_{H_2}^o \quad (7)$$

Además, la energía libre de Gibbs de cada especie ( $g_i^o$ ) se define con la ecuación (8) donde  $h_i$  es la entalpía de la especie dependiente sólo de la temperatura y  $s_{O_2}^o$  corresponde a la entropía de la especie dependiente de la temperatura y la presión [10].

$$g_i^o = h_i - T_{FC} * s_{O_2}^o \quad (8)$$

Las presiones parciales se calculan conociendo el factor de uso de combustible, del balance estequiométrico (se determinan las fracciones molares) y con la Ley de Faraday. La ecuación (9) muestra la relación entre el combustible y la densidad de corriente que genera la transferencia de electrones de la sustancia donde  $\dot{n}_F$  es el flujo molar del combustible, en ambos casos, hidrógeno.

$$j = \frac{n_e * F * \dot{n}_F}{A_{FC}} \quad (9)$$

En el caso de utilizar metano con reformado interno, se necesitan ecuaciones adicionales para predecir las fracciones molares y por ende las presiones parciales. La primera ecuación adicional corresponde al factor de consumo de aire considerando que toda reacción electroquímica en la realidad trabaja con exceso de aire y exceso de combustible para que esta se lleve a cabo. En el caso del aire, se asume un factor de consumo de aire de 0,2. En la ecuación (10) se muestra la ecuación que define el factor de consumo de aire que corresponde al aire necesario dividido al aire suministrado, mientras que la ecuación (11), muestra el factor de consumo de combustible para el caso de utilizar metano que, de forma análoga al aire, es la cantidad de combustible usado dividido el combustible suministrado.

$$U_O = \frac{z_r * 0,5}{\dot{n}_{O_2,in}} \quad (10)$$

$$U_F = \frac{z_r}{(3 * x_r + y_r)} \quad (11)$$

Adicionalmente, se necesita determinar la constante de equilibrio de la reacción ( $K_s$ ). En el caso de usar metano, conveniente calcular la constante de equilibrio para la reacción de desplazamiento de agua (ecuación (3)) para así despejar la cantidad de moles de CO ( $\dot{n}_{CO,in}$ ) que se producen en el reformado y la cantidad de CO<sub>2</sub> ( $\dot{n}_{CO_2,ex}$ ) que resulta del proceso de desplazamiento de agua [9]. La constante de equilibrio se puede definir con la ecuación (12) y (13) donde  $\dot{n}_{H_2,ex}$  es la cantidad de hidrógeno que se genera adicional al reformado y  $\dot{n}_{H_2O,in}$  es la cantidad de agua que se necesita para formar CO<sub>2</sub>.

$$K_s = \frac{\dot{n}_{CO_2,ex} * \dot{n}_{H_2,ex}}{\dot{n}_{CO,in} * \dot{n}_{H_2O,in}} \quad (12)$$

$$\ln(K_s) = \frac{-\Delta G_{r,s}^o}{n_e * F} \quad (13)$$

La energía libre de Gibbs de la reacción de desplazamiento de agua se calcula con la ecuación (14) donde la energía libre de Gibbs de cada especie se calcula usando la ecuación (8).

$$\Delta G_{r,s}^o = g_{CO_2}^o + g_{H_2}^o - g_{H_2O}^o - g_{CO}^o \quad (14)$$

Las pérdidas totales de voltaje se calculan con la ecuación (15) considerando pérdidas óhmicas, por activación de la celda y concentración.

$$\eta_{FC} = \eta_{ohm} + \eta_{act} + \eta_{con} \quad (15)$$

### 2.1.1 Pérdidas óhmicas

Las pérdidas óhmicas corresponden a la resistencia propia del material para conducir energía eléctrica. En este caso esta pérdida aplica para el ánodo, cátodo y electrolito donde posteriormente se suman para obtener la pérdida total. Con la ecuación (16) se calculan las pérdidas óhmicas según corresponda aplicando simplemente la ley de Ohm [10].

$$\eta_{ohm,j} = j * R_i \quad (16)$$

La resistencia eléctrica del material  $R_i$ , se determinan con la ecuación (17) donde  $\sigma_i$  corresponde a la conductividad eléctrica del material.

$$R_i = \frac{e_i}{\sigma_i} \quad (17)$$

La conductividad eléctrica ( $\Omega/cm$ ) de cada material usado en la simulación, se calculan con la ecuación (18), (19) y (20) para el caso del ánodo (Ni-YSZ), cátodo (LMS) y electrolito (BCS) [9] [3].

$$\sigma_{an} = \frac{4,2 * 10^7}{T_{FC}} * \exp \frac{-1200}{T_{FC}} \quad (17)$$

$$\sigma_{cat} = \frac{9,5 * 10^7}{T_{FC}} * \exp \frac{-1150}{T_{FC}} \quad (18)$$

$$\sigma_{el} = \frac{k_{el}}{T_{FC}} * \exp \frac{-E_{el}}{T_{FC}} \quad (19)$$

### 2.1.2 Pérdidas por activación

Las pérdidas por activación se dan principalmente en el ánodo y cátodo, en el electrolito tienden a ser despreciables ya que las reacciones se llevan a cabo en los electrodos. Para calcular esta pérdida para el ánodo o cátodo, se usa la ecuación de Butler-Volmer [10][6]

que se expresa de forma abreviada en la ecuación (20) asumiendo  $\alpha=0,5$ .

$$\eta_{act,i} = \frac{R * T_{FC}}{n_e * F} * \text{ArcSinh}\left(\frac{j}{2 * i_{O,i}}\right) \quad (20)$$

La densidad de corriente de intercambio anódica y catódica ( $i_{O,i=an}$ ,  $i_{O,i=cat}$ ) se calculan con la ecuación (21) reemplazando los valores según correspondan.

$$i_{O,i} = k_i * \exp\left(\frac{-E_i}{R * T_{FC}}\right) \quad (21)$$

La suma de la pérdida por activación en el cátodo y ánodo corresponde a la pérdida total por activación ( $\eta_{act}$ ).

### 2.1.3 Pérdidas por concentración

La pérdida por concentración depende especialmente de la temperatura y las presiones parciales de los gases tanto en el ánodo y cátodo. Las ecuaciones son diferentes según los gases que entren y salgan según corresponda, para el caso del ánodo, sólo ingresa hidrógeno. La ecuación (22) permite calcular la pérdida por concentración en el ánodo donde  $P_{H_2}^I$  corresponde a la presión parcial del hidrógeno en la interface ánodo/electrolito [3].

$$\eta_{con,an} = \frac{R * T_{FC}}{n_e * F} * \ln\left(\frac{P_{H_2}}{P_{H_2}^I}\right) \quad (22)$$

La presión parcial del hidrógeno en la interface se calcula con la ecuación (23) [3].

$$P_{H_2}^I = P_{H_2} - \frac{R * T_{FC}}{n_e * F} * \left(\frac{e_{an} * j}{P_{ref} * D_{eff,an}}\right) \quad (23)$$

Para el cátodo, la ecuación (24) permite calcular la pérdida por concentración considerando que interactúa el oxígeno y el agua [3].

$$\eta_{con,cat} = \frac{R * T_{FC}}{n_e * F} * \ln\left[\sqrt{\frac{P_{O_2}}{P_{O_2}^I}} * \frac{P_{H_2O}^I}{P_{H_2O}}\right] \quad (24)$$

Las presiones parciales en la interface para el agua y el oxígeno se calculan las ecuaciones (25) y (26) respectivamente [3].

$$P_{H_2O}^I = P_{H_2O} - \frac{R * T_{FC}}{n_e * F} * \left(\frac{e_{cat} * j}{P_{ref} * D_{eff,cat}}\right) \quad (25)$$

$$P_{O_2}^I = P_{O_2} + \frac{R * T_{FC}}{n_e * F} * \left(\frac{e_{cat} * j}{P_{ref} * D_{eff,cat}}\right) \quad (26)$$

### 2.1.4 Eficiencia de la celda de combustible

La eficiencia de la celda de combustible ( $\varepsilon_{FC}$ ) se calcula con el producto de la eficiencia de voltaje ( $\varepsilon_v$ ), la eficiencia por consumo de combustible ( $\varepsilon_{fuel}$ ) y la eficiencia termodinámica ( $\varepsilon_{th}$ ) [10].

$$\varepsilon_{FC} = \varepsilon_v * \varepsilon_{fuel} * \varepsilon_{th} \quad (27)$$

La eficiencia real se entiende como la eficiencia máxima que puede alcanzar la celda ( $\varepsilon_{th}$ ) descontando la pérdida por voltaje ( $\varepsilon_v$ ) y el combustible que reacciona de forma efectiva para lograr ese potencial ( $\varepsilon_{fuel}$ ). Muchos autores sólo consideran la eficiencia por voltaje sin considerar el efecto del factor de uso y que la eficiencia termodinámica disminuye al aumentar la temperatura [10]. En este caso, la eficiencia del combustible es equivalente al factor de uso, de esta forma, la ecuación (27) se puede desglosar tal como se indica en la ecuación (28) donde  $HHV$  es el poder calorífico superior del combustible de la reacción, en este caso se usa el valor de -286000 J/mol para hidrógeno.

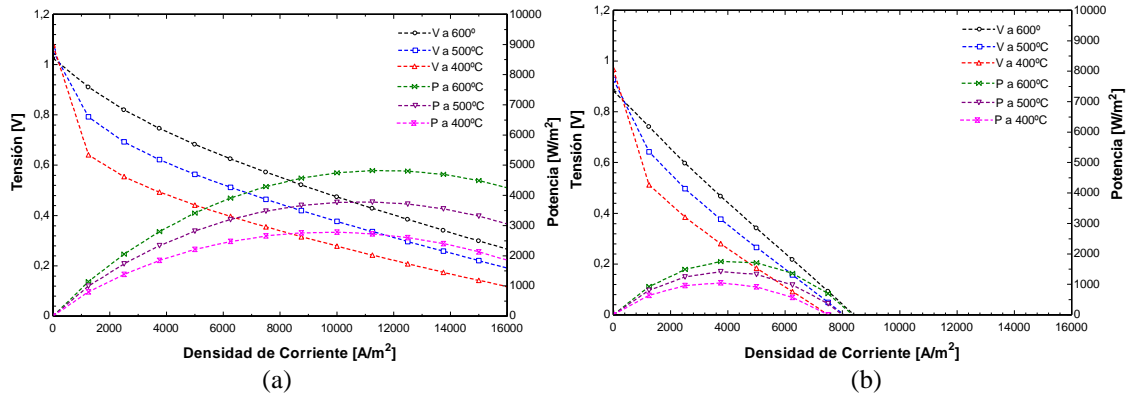
$$\varepsilon_{FC} = \frac{V_{FC}}{E_N} * U_o * \frac{\Delta G_r^o}{HHV} \quad (27)$$

## 3. Resultados

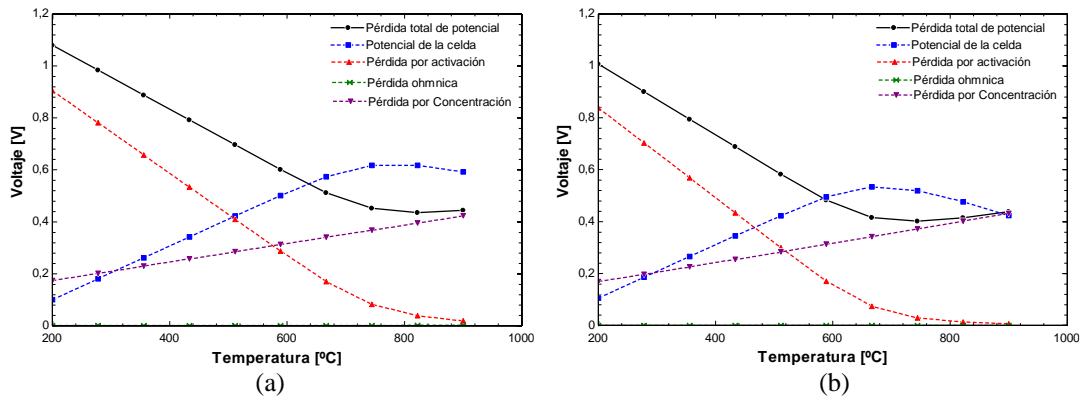
Con el modelo previamente definido se realizan las simulaciones calculando las curvas de polarización de la celda por unidad de área del voltaje, corriente y potencia, además, se hace un análisis del voltaje y las pérdidas de voltaje en función de la temperatura. Adicionalmente, se calcula la eficiencia real en función del factor de uso de combustible, de la temperatura y de la densidad de corriente.

En la figura 1 se muestran los resultados de las curvas de polarización usando hidrógeno y metano. Para el caso del hidrógeno, se considera un factor de uso del 95% mientras que para metano 65%, esto es porque la máxima eficiencia se logra con esos factores de uso en cada caso. La temperatura de referencia es la misma en ambos casos (600°C) y las dimensiones de la celda es la misma.

En la figura 2, se muestran los resultados del cálculo del voltaje usando hidrógeno y metano respectivamente. Se identifica la pérdida total además de desglosar las pérdidas en óhmicas, de concentración y voltaje.



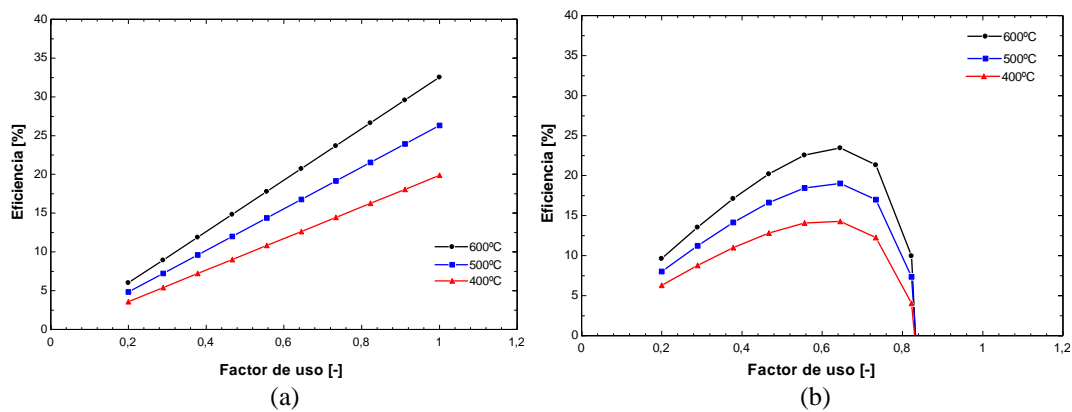
**Figura 1.** Curva de polarización y potencia a diferentes temperaturas (a) Con hidrógeno (b) Con metano.  
Fuente: Elaboración propia



**Figura 2.** Curva de voltaje y pérdidas a diferentes temperaturas (a) Con hidrógeno (b) Con metano.  
Fuente: Elaboración propia

En la figura 1 se puede observar que el punto de máxima potencia de la celda operando con hidrógeno es de aproximadamente con una densidad de corriente de  $11000 A/m^2$  mientras que, con metano, es con una densidad de corriente de  $4500 A/m^2$ .

En ambos casos, las pérdidas se deben principalmente a las de activación y concentración. Esto es algo común en celdas de alta temperatura donde la activación de la celda de combustible es mucho mas lenta por lo que a altas temperaturas logra entrar en régimen.



**Figura 3.** Curva de eficiencia real en función del factor de uso de combustible (a) Con hidrógeno (b) Con metano.  
Fuente: Elaboración propia

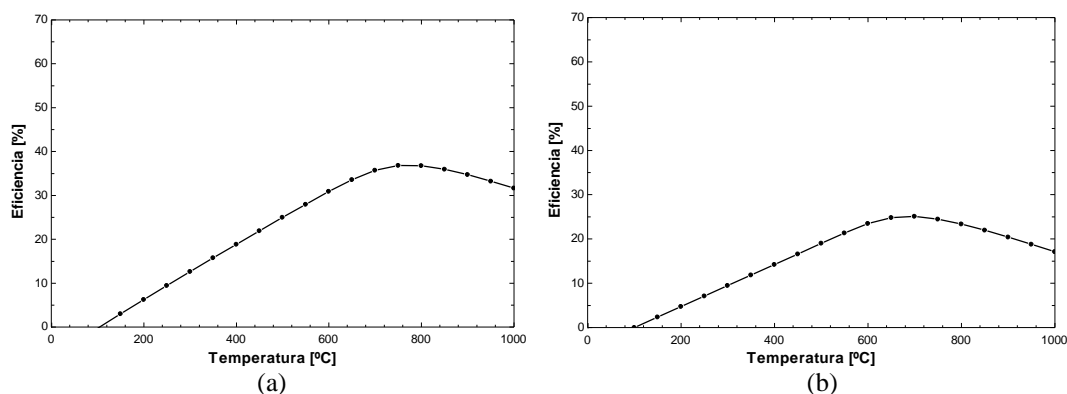
Considerando que la reacción principal es la misma en ambos casos no se presentan muchas diferencias salvo por el efecto de las presiones parciales en el caso del metano obteniéndose pérdidas por concentración ligeramente mas altas debido a la presencia de  $\text{CO}_2$  y  $\text{CO}$  en el cátodo mientras que al usar hidrógeno puro estos gases no están presentes.

En la figura 3 se muestra la eficiencia de la celda de combustible utilizando hidrogeno y metano respectivamente. Se puede ver que, al usar hidrógeno, la eficiencia óptima se obtiene con un factor de consumo de 1 mientras que con metano la eficiencia máxima se obtiene con un factor de consumo cercano al 65%. La explicación para la caída abrupta de la eficiencia con metano se debe a la capacidad de la celda para llevar a cabo las tres reacciones en la interface de los electrodos y electrolito donde básicamente no es posible reformar el 100% del metano inyectado a la celda.

reformar internamente a temperaturas inferiores a menos que el reformado se haga de manera externa. Al hacer el reformado externamente, se recomiendan filtrar los gases para eliminar el carbono, en ese caso, las condiciones de operación corresponden a las mismas que inyectar hidrógeno puro. Trabajos como el de Sahli et al. [12] aportan resultados de la influencia de la humedad en la producción de potencia de la celda Milewski et.al [13] tiene muchas simulaciones con validación empírica del efecto de inyectar hidrógeno con gases inertes ( $\text{N}_2$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ) y aire a diferentes porcentajes de oxígeno en la producción de potencia de la celda.

#### 4. Conclusiones

En este trabajo se llevó a cabo la modelación de una celda de combustible protónica con la finalidad de entregar una línea de base respecto al uso de hidrógeno y metano para producir electricidad a través de una



**Figura 4.** Curva de eficiencia real en función de la temperatura (a) Con hidrógeno (b) Con metano.

Fuente: Elaboración propia

En la figura 4 se muestra la eficiencia en función de la temperatura. Para el caso del hidrógeno se usó como entrada un factor de consumo del 95% y una densidad de corriente de  $11000 \text{ A/m}^2$  mientras que para el hidrógeno se usó un factor de consumo del 65% y una densidad de corriente de  $4500 \text{ A/m}^2$  que corresponden a las condiciones de operación más favorables en ambos casos. Se puede ver claramente que con hidrógeno puro la eficiencia real de la celda aumenta considerablemente al igual que la máxima potencia que se puede generar usando la misma celda.

Otro punto por observar es que el punto de máxima eficiencia con hidrógeno se alcanza a una temperatura de  $750^\circ\text{C}$  mientras que con metano se alcanza a unos  $680^\circ\text{C}$ .

Otro aspecto importante es que el reformado de metano es una reacción que debe ocurrir a temperaturas superiores de  $600^\circ\text{C}$  [11] por lo que no es posible

celda de combustible. La simulación se realizó utilizando el Software EES (Engineering Equation Solver) evaluando la potencia generada, la eficiencia y el potencial en función de la temperatura, uso de combustible y densidad de corriente.

Las principales conclusiones son las siguientes:

- El potencial de la celda de combustible es inversamente proporcional a la temperatura logrando estabilizar las pérdidas en torno a los  $650^\circ\text{C}$ .
- Se recomienda utilizar un factor de uso para hidrógeno cercano a 1 mientras que con metano este no puede superar el 66% debido a que la celda se satura y no es capaz de reformar un porcentaje mayor.
- La eficiencia disminuye al disminuir la temperatura.

- Utilizar hidrógeno es más eficiente y se logra obtener mayor potencia. Sin embargo, el metano es un gas con mayor disponibilidad y no necesita un proceso de electrolisis que consume grandes cantidades de energías. Este análisis queda como perspectiva para futuros trabajos.

Este modelo arroja una aproximación bastante buena para evaluar el desempeño de una celda de combustible en términos generales, sin embargo, para lograr resultados mas exactos se necesita detallar el comportamiento de la celda en régimen transiente evaluando la geometría y la velocidad de las reacciones. Se debe considerar además la presencia de humedad y otros gases que no participan de la reacción electroquímica, pero si inciden en las presiones parciales lo cual es perjudicial para la generación de potencia y eficiencia.

## 5. Agradecimientos

Agradecimientos a mi familia por el apoyo y comprensión por mis horas de ausencia destinadas a este trabajo. Al Departamento de Ingeniería Mecánica, por facilitar el espacio que me permite trabajar día a día realizando investigación y docencia.

Este trabajo es posible gracias al financiamiento de la Agencia Nacional de Investigación y Desarrollo ANID, Gobierno de Chile, a través de la Beca de Doctorado Nacional otorgada el año 2023.

Finalmente agradecer a mis profesores guía y coguía, Dr Cristian Cuevas (DIM) y Dr. Felipe Sanhueza (DIMAT) respectivamente por el apoyo incondicional al trabajo realizado y la motivación para participar en estas instancias.

## 6. Referencias

- [1] E. Fabbri, L. Bi, D. Pergolesi, and E. Traversa, "Towards the Next Generation of Solid Oxide Fuel Cells Operating Below 600 °C with Chemically Stable Proton-Conducting Electrolytes," *Advanced Materials*, vol. 24, no. 2, pp. 195–208, Jan. 2012, doi: 10.1002/adma.201103102.
- [2] Q. Zhang, Y. Guo, J. Ding, and G. Jiang, "New approaches for the determination of electrochemical parameters in the model of proton-conducting solid oxide fuel cell," *Electrochim Acta*, vol. 318, pp. 560–571, Sep. 2019, doi: 10.1016/j.electacta.2019.06.053.
- [3] Y. Sahli, "Thermodynamic Modeling and Analysis of Proton Ceramic Fuel Cells: Power Optimization," *Arab J Sci Eng*, vol. 47, no. 5, pp. 6355–6363, May 2022, doi: 10.1007/s13369-021-06262-7.
- [4] M. Tian, Z. Yu, H. Zhao, and J. Yin, "Thermodynamic analysis of an integrated solid oxide fuel cell, Organic Rankine Cycle and absorption chiller trigeneration system with CO<sub>2</sub> capture," *Energy Convers Manag*, vol. 171, pp. 350–360, Sep. 2018, doi: 10.1016/j.enconman.2018.05.108.
- [5] F. Ranjbar, A. Chitsaz, S. M. S. Mahmoudi, S. Khalilarya, and M. A. Rosen, "Energy and exergy assessments of a novel trigeneration system based on a solid oxide fuel cell," *Energy Convers Manag*, vol. 87, pp. 318–327, Nov. 2014, doi: 10.1016/j.enconman.2014.07.014.
- [6] Jaroslaw Milewski, Konrad Swirski, Massimo Santarelli, and Pierluigi Leone, *Advanced Methods of Solid Oxide Fuel Cell Modeling*.
- [7] K. J. Albrecht, A. Dubois, K. Ferguson, C. Duan, R. P. O'Hayre, and R. J. Braun, "Steady-State and Dynamic Modeling of Intermediate-Temperature Protonic Ceramic Fuel Cells," *J Electrochem Soc*, vol. 166, no. 10, pp. F687–F700, Jun. 2019, doi: 10.1149/2.0651910jes.
- [8] L. Q. Le *et al.*, "Proton-conducting ceramic fuel cells: Scale up and stack integration," *J Power Sources*, vol. 482, p. 228868, Jan. 2021, doi: 10.1016/j.jpowsour.2020.228868.
- [9] F. Ranjbar, A. Chitsaz, S. M. S. Mahmoudi, S. Khalilarya, and M. A. Rosen, "Energy and exergy assessments of a novel trigeneration system based on a solid oxide fuel cell," *Energy Convers Manag*, vol. 87, pp. 318–327, Nov. 2014, doi: 10.1016/j.enconman.2014.07.014.
- [10] S.-W. C. W. G. C. F. B. P. RYAN O'HAYRE, *FUEL CELL FUNDAMENTALS*, Third Edition. ISBN 9781119114208, 2016.
- [11] S.-W. C. W. G. C. F. B. P. RYAN O'HAYRE, *FUEL CELL FUNDAMENTALS*, Third Edition. ISBN 9781119114208, 2016.
- [12] Y. Sahli, "Thermodynamic Modeling and Analysis of Proton Ceramic Fuel Cells: Power Optimization," *Arab J Sci Eng*, vol. 47, no. 5, pp. 6355–6363, May 2022, doi: 10.1007/s13369-021-06262-7.
- [13] Jaroslaw Milewski, Konrad Swirski, Massimo Santarelli, and Pierluigi Leone, *Advanced Methods of Solid Oxide Fuel Cell Modeling*.