

EFFECTO DE LA CONCENTRACIÓN DEL COMBUSTIBLE EN EL DESEMPEÑO DE CELDAS DE COMBUSTIBLE DE ÓXIDO SÓLIDO

Guillermo Andrés Sepúlveda Cepeda (1), Dr. Francisco Elizalde Blancas (2)

1 [Ingeniería en Energía, Universidad Autónoma de Bucaramanga.] | Dirección de correo electrónico: [Gsepulveda169@unab.edu.co]

2 [Departamento de Ingeniería Mecánica, División de Ingenierías, Campus Irapuato-Salamanca, Universidad de Guanajuato] | Dirección de correo electrónico: [franciscoeb@ugto.mx]

Resumen

En este estudio se presentan los resultados de varias simulaciones de una celda de combustible de óxido sólido (SOFC) por medio de dos softwares llamados GAMBIT y FLUENT. En el primero de ellos se desarrolla la geometría de la celda, y en el segundo es donde se le aplican las características cinéticas, químicas, eléctricas y termodinámicas. En este trabajo se buscó determinar mediante una simulación numérica el comportamiento de una celda de combustible de óxido sólido operando a diferente carga.

Abstract

In this study the results of several simulations of a solid oxide fuel cell (SOFC) using two softwares called GAMBIT and FLUENT are presented. In the first one the cell geometry is developed and in the second one the kinetic, chemical, electrical and thermodynamic characteristics of the fuel cell are applied. In this work, by means of numerical simulations the performance of a solid oxide fuel cell operating under different charges was assessed. The results show that the behavior of a fuel cell when the electric charge is increased, the fuel consumption increases and therefore the cell voltage decreases.

Palabras Clave

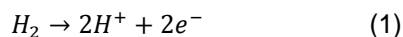
SOFC (Solid Oxide Fuel Cell); Celda de combustible de óxido sólido; Simulación Numérica; Reformado de Metano; Cinética Química.

INTRODUCCIÓN

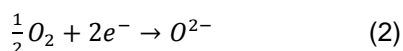
Las celdas de combustible son dispositivos electroquímicos en donde la energía química del combustible y oxidante (experimentando reacciones electroquímicas) se convierte en energía eléctrica directamente, con la promesa de generación de energía con alta eficiencia y bajo impacto ambiental.

Para entender cómo la reacción entre el hidrógeno y el oxígeno produce una corriente eléctrica, y de dónde los electrones vienen, tenemos que tener en cuenta las distintas reacciones que tienen lugar en cada electrodo.

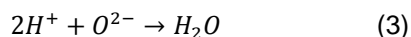
En el ánodo de una celda de combustible de electrolito ácido, el gas de hidrógeno se ioniza, liberando electrones y obteniendo iones H^+ (o protones). La reacción de oxidación del hidrógeno es [1]



La reacción de reducción en el cátodo es



Esta reacción libera energía. En el ánodo, el oxígeno reacciona con los electrones extraídos del electrodo, y los iones H^+ desde el electrolito, para formar agua [1], como se muestra en la siguiente ecuación



La Figura 1 muestra las reacciones y el funcionamiento de una celda de óxido sólido ya descrito anteriormente.

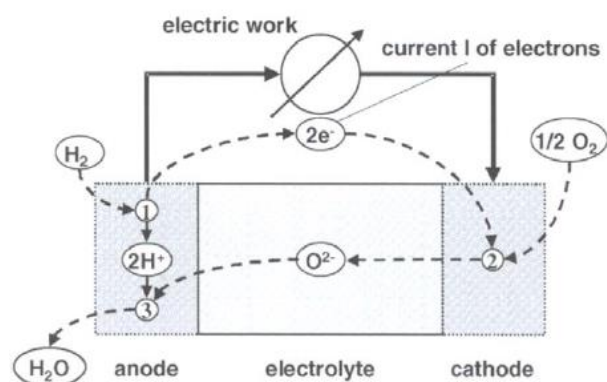


FIGURA 1: Principio de funcionamiento de una celda de combustible de óxido sólido [1].

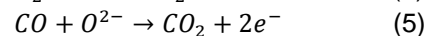
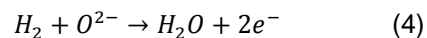
Las celdas de combustible de óxido sólido (SOFC), han crecido en reconocimiento debido a su tecnología que soporta altas temperaturas. Uno de los principales atractivos de las SOFC es su capacidad para manejar una amplia gama de combustibles de hidrocarburos. Su alta temperatura de funcionamiento también produce alta calidad de calor de subproductos para la cogeneración o para su uso en un ciclo de aprovechamiento de calor.

El electrolito en esta celda de combustible es un sólido, no poroso de óxido de metal, por lo general $Y_2O_3-ZrO_2$ estabilizado. La celda opera de $600^\circ C$ a $1000^\circ C$, donde la conducción de iones de oxígeno se lleva a cabo. Típicamente, el ánodo es $Co-ZrO_2$ o $Ni-ZrO_2$ cera-metal, y el cátodo es $LaMnO_3-Sr$ [2].

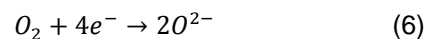
El hidrógeno, así como el monóxido de carbono (CO) e hidrocarburos tales como el metano (CH_4) pueden utilizarse como combustibles en las SOFC. El combustible reacciona con los iones de oxígeno (O^{2-}) que pasan a través del electrolito para producir agua o CO_2 . Los electrones cruzan por un circuito externo (carga), y regresan al cátodo, donde el oxígeno del aire reacciona con los electrones produciendo iones de óxido.

Las reacciones electroquímicas que ocurren en una celda SOFC son las siguientes [6]:

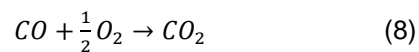
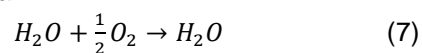
En el Ánodo



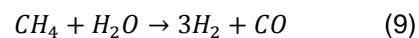
En el Cátodo:



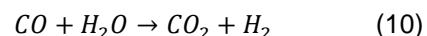
Reacción Global:



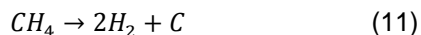
Reacción de Reformado de Metano:



Reacción de Conversión de Monóxido de Carbono:



Descomposición del metano:



Reacción de Boudouard:



MATERIALES Y MÉTODOS

En esta sección se hace una descripción de las herramientas de cómputo que se utilizaron para el desarrollo del proyecto, como lo son GAMBIT y FLUENT, en los cuales se desarrolla la geometría y la simulación numérica de la celda de combustible respectivamente.

GAMBIT:

Por medio del software GAMBIT se desarrolla la geometría de la celda de combustible y la malla de la misma, lo que es necesario para la simulación numérica que se va a desarrollar en el siguiente software. Las dimensiones de la celda de combustible en las coordenadas x, y, z que corresponden al ancho, alto y largo respectivamente, son de 5.42 mm, 5.1 mm y 100 mm. La malla del sistema cuenta con 422400 celdas.

En la Figura 2 se muestra la geometría de la celda de combustible que se desea simular a partir del software FLUENT, en la que se observan partes importantes de la celda como lo son los conductos de entrada de combustible y entrada de aire a la celda.

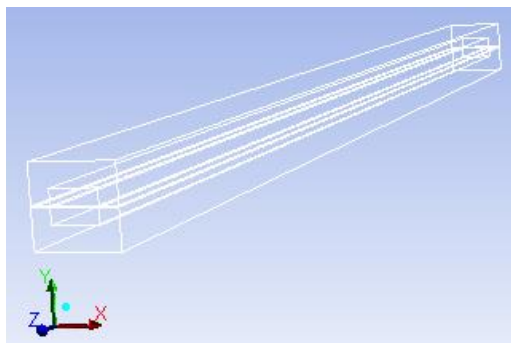


FIGURA 1: Geometría de la celda de combustible de óxido sólido desarrollada en GAMBIT.

FLUENT:

Por medio de la geometría exportada a partir del software GAMBIT se prosigue al desarrollo de los parámetros que se requieren para la simulación numérica del sistema, por lo cual para una celda de combustible de óxido sólido (SOFC) se cuenta con la siguiente información: Para el electrolito que es el conductor eléctrico de la celda de combustible y el que contiene los iones de las reacciones, se tiene que el espesor de éste es de 0.1 mm y su resistividad es de 0.1 ohm-m. La densidad de corriente de intercambio del ánodo es de 34829 A/m², y la densidad de corriente de intercambio del cátodo es de 7215.29 A/m². Para el campo eléctrico de la celda se tienen tres regiones eléctricamente conductoras. Para los colectores de corriente del cátodo y ánodo, se definió una conductividad eléctrica de 769000 1/Ohm-m, para el ánodo la conductividad eléctrica es de 30300 1/Ohm-m, y para el cátodo una conductividad eléctrica de 12800 1/Ohm-m. Se sabe que una celda de combustible de óxido sólido maneja altas temperaturas de operación ya que dentro de esta ocurren diferentes reacciones como el reformado de metano, por lo cual los materiales que se utilizan varían según las condiciones de operación. En la Tabla 1 se muestran las propiedades de los materiales utilizados en la simulación de una SOFC.

Tabla 1. Propiedades de los materiales de una celda de combustible.

Material	Densidad (kg/m ³)	Calor Específico (J/kg-K)	Conductividad Térmica (W/m-K)
Colector	7450	600	27
Cátodo	6570	800	1.86
Ánodo	6870	640	5.84
Electrolito	5900	640	2.16

Una "mixtures reaction" alberga un número determinado de reacciones, donde el coeficiente estequiométrico varía entre ellas, debido a la naturaleza propia de cada reacción, las cuales son

mencionadas en las ecuaciones (9) y (10). La ecuación de Arrhenius, que permite calcular la velocidad de una reacción es:

$$k = A * e^{-\frac{E_a}{RT}}$$

en donde k es la constante de reacción y esta es dependiente de la temperatura, A es el factor pre-exponencial, E_a es la energía de activación, R la constante universal de los gases y T la temperatura absoluta.

En este trabajo se consideró la cinética química del reformado de metano y conversión de monóxido de carbono, representadas con las ecuaciones (9) y (10).

Los parámetros de Arrhenius como son factor pre-exponencial, energía de activación y exponente de temperatura son 3.215×10^8 , 2.313×10^8 J/kg mol y 2 para la reacción del reformado de metano y para la reacción de conversión de monóxido de carbono a hidrógeno son 1256, 1039×10^8 J/kg mol y 2, respectivamente.

El combustible utilizado fue tomado de [6]. Por las características de operación de la celda, se sabe que puede utilizarse combustible con un porcentaje determinado de metano debido a que las altas temperaturas reformarían el metano y evitarían el envenenamiento de la celda. La composición del combustible usado es el que se reporta en la Tabla 2.

Tabla 2. Composición molar del combustible utilizado en la simulación [6].

Componente	% Molar
Composición Combustible	
CH ₄	17.10%
H ₂	26.26%
H ₂ O	49.34%
CO	2.94%
CO ₂	4.36%
Composición del aire	
O ₂	21%
N ₂	79%

Se obtuvo una segunda concentración tomada de la literatura [8] la cual se utilizó para comparar el desempeño de la celda y esta se muestra en la Tabla 3.

Tabla 3. Composición molar del combustible de la literatura [8].

Componente	% Molar
Composición Combustible	
CH ₄	9.6%
H ₂	26.9%
H ₂ O	28.4%
CO	5.6%
CO ₂	23.4%
N ₂	6.1%
Composición del aire	
O ₂	21%
N ₂	79%

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En el software FLUENT, se simuló una celda de combustible de óxido sólido variándole la corriente de operación. En la Figura 3 se observa el comportamiento de la celda en función de la densidad corriente.

Al obtener los resultados de las ocho simulaciones realizadas se observó y se verificó el funcionamiento de la celda al variar la corriente ya que se obtuvieron valores bajos de voltaje a un alto nivel de corriente, principalmente esto se da, primero por la energía de activación del sistema la cual es necesaria para que la celda obtenga su principio de funcionamiento, y segundo por la ley de ohm en donde la resistencia eléctrica del sistema baja cuando la aumenta la temperatura.

Para poder comparar el desempeño de una celda SOFC, se tomó de una referencia bibliográfica [8] la curva de polarización a una concentración de combustible distinta a la utilizada en este trabajo. En la Figura 3 se comparan las curvas de polarización para la concentración simulada en este trabajo y la tomada de la literatura. Se observa claramente que el desempeño de la SOFC simulada en este trabajo es mayor al de la celda tomada de [8].

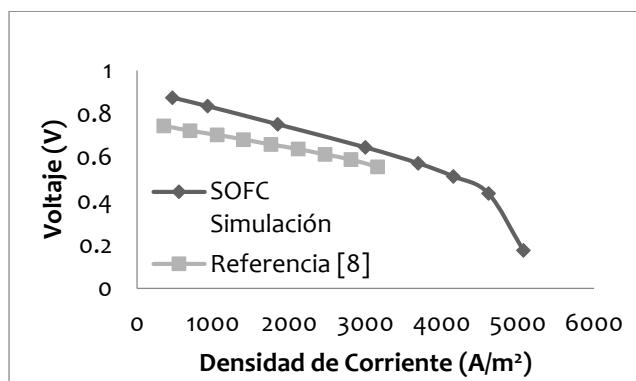


FIGURA 3: Curva de polarización de una SOFC a diferentes concentraciones de combustible.

CONCLUSIONES

El desempeño de la SOFC obtenido mediante simulación numérica en este trabajo es mayor al reportado en [8]. Al comparar las concentraciones de los dos combustibles, se observa que la suma de la concentración de las especies potencialmente combustible (CH_4 , H_2 y CO) es mayor para el caso simulado en este trabajo que el tomado de [8] (46.3% vs 42.1%). El mejor desempeño entonces se puede atribuir a una mayor concentración total de combustible.

A pesar de que ambos combustibles tienen prácticamente la misma concentración de hidrógeno (26.26% y 26.9%), siendo mayor en [8], el mejor desempeño se presenta en el caso de menor concentración de hidrógeno a la entrada. Este comportamiento se puede justificar debido a una mayor conversión de metano a hidrógeno mediante el proceso de reformado ya que se tiene casi el doble de metano en el combustible simulado en este trabajo. Además, la concentración de agua es prácticamente el doble, lo que ayuda a una mayor velocidad de reacción.

El desempeño de una SOFC no depende únicamente de la concentración de hidrógeno sino de la concentración de metano, monóxido de carbono y agua.

AGRADECIMIENTOS

Especialmente a mi familia que hizo posible mi participación en México en el verano de investigación en la Universidad de Guanajuato junto a la UNAB.

REFERENCIAS

- [1] Subnash C Singhal and Kevin Kendall; (2003); High Temperature Solid Oxide Fuel Cell: Fundamentals, Design and Applications; ELSEVIER.
- [2] EG&G Technical Services, Inc.; (2004); Fuel Cell Handbook; National Technical Information Service, U.S. Department of Commerce.
- [3] James Larminie and Andrew Dicks; (2003); Fuel Cell Systems Explained; John Wiley & Sons Ltd, The Atrium, Southern Gate, Chichester, West Sussex.
- [4] Néstor Ramírez Morales; (2004); La Tecnología de Celdas de Combustible y su Interface Electrónica de Potencia para Aplicaciones Domesticas e Industriales; Centro Nacional de Investigación y Desarrollo Tecnológico.
- [5] Wei Zhang; (2006); Simulation of Oxide Fuel Cell-Based Power Generation Process with CO_2 Capture.
- [6] E. Achenbach, (1995), Modelling and Evaluation of Advanced SOFC, Institute of Energy Process Engineering, (IEV).
- [7] Lorena Atares Huerta, (2005), Problemas Básicos de Cinética Química, Universidad Politécnica de Valencia.
- [8] M. Minutillo, A. Perna, E. Jannelli, (2014), SOFC and MCFC system level modeling for hybrid plants performance prediction.