



UNIVERSITAT
POLITÈCNICA
DE VALÈNCIA



UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE VALÈNCIA

Escuela Técnica Superior de Ingeniería del Diseño

Estudio de la influencia del diseño de una MEA y de las condiciones de operación sobre su curva de polarización.

Trabajo Fin de Grado

Grado en Ingeniería Mecánica

AUTOR/A: Solana Andreu, Laura

Tutor/a: Sanchis Pacheco, Enrique José

Cotutor/a: Morena Borja, Joaquín de la

CURSO ACADÉMICO: 2022/2023

Resumen

Actualmente los motores de combustión interna presentan como inconveniente las emisiones contaminantes que liberan en la atmósfera, de ahí que cada vez haya más investigaciones para aportar una solución. Entre las más destacadas se encuentran las pilas de combustible. Además, a esto se le suma el hecho de que la Unión Europea ha aprobado una ley que prohibirá vender y producir coches de combustión interna para el 2035.

Lo más relevante de la pila de hidrógeno son sus mejores condiciones, no solamente es cero emisiones, sino que su autonomía es mucho mayor al resto de motores, sobre todo al de combustión interna, y su tiempo de recarga es inmediato. Sin embargo, también posee inconvenientes y es que todavía no se ha podido conseguir en la práctica todas las cualidades por las que son tan conocidos, por lo que se necesita seguir investigando. Por lo tanto, este estudio se llevará a cabo de forma teórica empleando un modelo computacional para la simulación de una MEA (Membrane Electrode Assembly) mediante el programa MATLAB.

Las MEAs están constituidas por diversas capas entre las que se encuentran las capas de difusión, las capas catalíticas, que actúan como ánodo y cátodo, y el electrolito, que en este caso es una membrana de intercambio de protones (PEM por sus siglas en inglés). Para la caracterización de la MEA se recurre a las denominadas curvas de polarización, que relacionan el voltaje y la diferencia de potencial con la intensidad que esta genera. Esta curva depende en gran medida de los parámetros de diseño y de sus condiciones.

En cuanto a los objetivos del trabajo, se estudiará la influencia de las condiciones y parámetros de una MEA en la curva de polarización, sus rendimientos y el efecto que produce la concentración de oxígeno en ellas.

Los resultados obtenidos no solo se comparan con los efectos que han producido las condiciones modificadas con respecto al caso base, sino también con el estudio de M. Fournier sobre las concentraciones de O_2 . Para ello, se necesita comprender que impacto producen cada uno de los parámetros, de ahí el estudio paramétrico que se realiza con antelación.

Palabras clave: PEM, MEA, curva de polarización, modelado, pila de combustible, CL, GDL.

Resum

Actualment els motors de combustió interna presenten com a inconvenient les emissions contaminants que alliberen en l'atmosfera, d'aquí ve que cada vegada hi haja més investigacions per a aportar una solució. Entre les més destacades es troben les piles de combustible. A més, a això se li suma el fet que la Unió Europea ha aprovat una llei que prohibirà vendre i produir cotxes de combustió interna per al 2035.

El més rellevant de la pila d'hidrogen són les seues millors condicions, no solament és zero emissions, sinó que la seua autonomia és molt major a la resta de motors, sobretot al de combustió interna, i el seu temps de recàrrega és immediat. No obstant això, també posseeix inconvenients i és que encara no s'ha pogut aconseguir en la pràctica totes les qualitats per les quals són tan coneguts, per la qual cosa es necessita continuar investigant. Per tant, aquest estudi es durà a terme de manera teòrica emprant un model computacional per a la simulació d'una MEA (Membrane Electrode Assembly) mitjançant el programa MATLAB.

Les Piles estan constituïdes per diverses capes entre les quals es troben les capes de difusió, les capes catalítiques, que actuen com a ànode i càtode, i l'electròlit, que en aquest cas és una membrana d'intercanvi de protons (PEM per les seues sigles en anglés). Per a la caracterització de la PILE es recorre a les denominades corbes de polarització, que relacionen el voltatge i la diferència de potencial amb la intensitat que aquesta genera. Aquesta corba depèn en gran manera dels paràmetres de disseny i de les seues condicions.

Quant als objectius del treball, s'estudiarà la influència de les condicions i paràmetres d'una PILE en la corba de polarització, els seus rendiments i l'efecte que produeix la concentració d'oxigen en elles.

Els resultats obtinguts no sols es comparen amb els efectes que han produït les condicions modificades respecte al cas base, sinó també amb l'estudi de M. Fournier sobre les concentracions d'O₂. Per a això, es necessita comprendre que impacte produeixen cadascun dels paràmetres, d'ací l'estudi paramètric que es realitza amb antelació.

Paraules clau: PEM, MEA, corba de polarització, modelatge, pila de combustible, CL, GDL.

Abstract

The current drawback of internal combustion engines is the pollutant emissions they release into the atmosphere, which is why more and more research is being carried out to find a solution. Fuel cells are among the most important of these. In addition, the European Union has passed a law that will ban the sale and production of internal combustion cars by 2035.

The most relevant aspect of the hydrogen fuel cell is its better conditions: not only is it zero emissions, but its range is much greater than other engines, especially internal combustion engines, and its recharging time is immediate. However, it also has drawbacks in that it has not yet been possible to achieve in practice all the qualities for which it is so well known, so further research is needed. Therefore, this study will be carried out theoretically using a computational model for the simulation of a MEA (Membrane Electrode Assembly) using the MATLAB program.

MEAs are made up of several layers including the diffusion layers, the catalytic layers, which act as anode and cathode, and the electrolyte, which in this case is a proton exchange membrane (PEM). For the characterisation of the MEA, so-called polarisation curves are used, which relate the voltage and potential difference to the current generated by the MEA. This curve is highly dependent on the design parameters and their conditions.

In terms of the objectives of the work, the influence of the conditions and parameters of an MEA on the polarisation curve, its performance and the effect of the oxygen concentration on it will be studied.

The results obtained are not only compared with the effects produced by the modified conditions with respect to the base case, but also with the M. Fournier study on O₂ concentrations. For this, it is necessary to understand the impact of each of the parameters, hence the parametric study carried out beforehand.

Key words: MEA, PEM, polarization curve, modelling, CL, GDL, cell fuel.

Agradecimientos

Me gustaría que estas líneas sirvieran para expresar mi más profundo agradecimiento a todas aquellas personas que con su ayuda han colaborado, de una forma u otra, en la realización de este trabajo. En especial a mi tutor José Enrique Sanchis Pacheco, por guiarme y supervisar el trabajo a cada paso, también a Miguel García Andrés por atender todas mis dudas y explicarme cada una de las partes cuando no las entendía.

Y, por supuesto, a mi familia quienes me han apoyado y motivado en todo momento; aun cuando yo no creía en mí, ellos siempre lo hicieron. GRACIAS.

ÍNDICE GENERAL

Capítulo 1. Introducción	15
1.1 Antecedentes	15
1.2 Motivación del estudio.....	15
1.3 Objetivos.....	16
1.4 Metodología.....	16
Capítulo 2. Revisión bibliográfica.....	18
2.1 Hidrógeno	18
2.2 Pilas	19
2.2.1 Partes y materiales.....	20
2.2.2 Funcionamiento y fenómenos físicos.....	22
2.2.3 Ventajas y desventajas.....	24
2.3 Ecuaciones de transporte de masa y energía, y la continuidad del flujo.	25
Capítulo 3. Explicación del modelo	29
3.1 Caso base	29
3.2 Explicación de las gráficas.....	31
Capítulo 4. Estudio paramétrico	33
III. Humedad relativa.....	40
IV. Saturación del agua líquida	42
Capítulo 5. Calibración del modelo	66
5.1 Resultados	66
5.3 Efecto de la concentración de oxígeno.....	69
Capítulo 6. Conclusiones	70
Bibliografía	72
APÉNDICE A. Pliego de condiciones.....	75
A.1 Introducción	75
A.2 Ordenanza general de Seguridad e Higiene en el Trabajo [34]	75
A.3 Real Decreto 488/1997 del 14 de abril [35].....	78
APÉNDICE B. Presupuesto	80
B.1 Introducción.....	80
B.2 Mano de obra	80
B.3 Hardware	80
B.4 Software	81
B.5 Presupuesto total.....	81

ÍNDICE DE FIGURAS

Fig. 2-1. Representación de una PEMFC.....	20
Fig. 2-2. Representación de una MEA de cinco capas (no a escala real) junto con los diferentes transportes que se producen en ella.....	21
Fig.2-3. Diseño de una pila de combustible.....	23
Fig.2-4. Transporte másico convectivo y difusivo.....	26
Fig.3-1. Pérdidas de la curva de polarización.....	32
Fig. 4 -1. Efecto de la presión a) de referencia b) presión total en el canal de gas del ánodo y cátodo, en la curva de polarización de una PEMFC.....	34
Fig. 4 -2. Perfil de flujo del H ₂ O a través del plano a diferentes voltajes de celda para a) 300kPa de presión de referencia y b) el caso base.....	34
Fig. 4 -3. Fracción molar del H ₂ O a diferentes voltajes de celda para a) 300kPa de presión de referencia y b) el caso base.....	34
Fig. 4-4. Perfil potencial a través del plano a diferentes voltajes de celda para a) 350kPa de presión total y b) el caso base.....	36
Fig. 4 -5. Perfil de flujo del H ₂ O a través del plano a diferentes voltajes de celda para a) 350kPa de presión total y b) el caso base.....	36
Fig. 4 -6. Efecto de la temperatura a) de referencia b) de la capa bipolar del cátodo/ánodo y del canal de gas, en la curva de polarización de una PEMFC.....	37
Fig. 4 -7. Perfiles de flujos a través del plano a diferentes voltajes de celda para a) 100°C de temperatura de referencia y b) el caso base.....	37
Fig. 4 -8. Perfiles de flujo a través del plano a diferentes voltajes de celda para a) 100°C de temperatura del cátodo/ánodo y b) el caso base.....	39
Fig. 4 -9. Perfiles de potencia a través del plano de diferentes voltajes de celda para a) 100°C de temperatura del cátodo/ánodo y b) el caso base.....	40
Fig. 4 -10. Efecto de la humedad relativa a) en el canal de gas del ánodo b) en el canal de gas, en la curva de polarización de una PEMFC.....	41
Fig. 4 -11. Fracción molar del H ₂ O a diferentes voltajes de celda para a) 85% de humedad relativa del ánodo y b) el caso base.....	41
Fig. 4 -12. Fracción molar del H ₂ a diferentes voltajes de celda para a) el 85% de humedad relativa del ánodo y b) el caso base.....	42

Fig. 4 -13. Efecto de la saturación del agua líquida en la curva de polarización de una PEMFC.....	42
Fig. 4 -14. Saturación del agua líquida a diferentes voltajes de celda para a) el 0.01 de s_c y b) el caso base.....	43
Fig. 4 -15. Flujo del agua líquida a diferentes voltajes de celda para a) el 0.01 de s_c y b) el caso base.....	44
Fig. 4 -16. Efecto de la fracción molar a) del hidrógeno en el gas de combustible seco b) del oxígeno en el gas de oxidante seco, en la curva de polarización de una PEMFC....	45
Fig. 4 -17. Efecto del factor de simetría a) HOR b) ORR, en la curva de polarización de una PEMFC.....	46
Fig. 4 -18. Efecto del potencial de fase electrolítica a diferentes voltajes de celda para a) el 0.6 de b_{ORR} y b) el caso base.....	48
Fig. 4 -19. Efecto del espesor de la a) GDL, b) CL y c) capa PEM, en la curva de polarización de una PEMFC.....	49
Fig. 4 -20. Flujo del H_2O a diferentes voltajes de celda para a) 100 μm de GDL y b) el caso base.....	50
Fig. 4 -21. Temperatura durante el proceso a diferentes voltajes de celda para a) 100 μm de GDL y b) el caso base.....	50
Fig. 4 -22. Flujo del H_2 a diferentes voltajes de celda para a) 5 μm de CL y b) el caso base.....	51
Fig. 4 -23. Perfiles de potencia a través del plano a diferentes voltajes de celda para a) 8 μm de la capa PEM y b) el caso base.....	52
Fig. 4 -24. Perfiles de flujo a través del plano a diferentes voltajes de celda para a) 8 μm de la capa PEM y b) el caso base.....	52
Fig. 4 -25. Efecto de la conductividad termal de la a) GDL y b) CL, en la curva de polarización de una PEMFC.....	53
Fig. 4 -26. Temperatura durante el proceso a diferentes voltajes de celda para a) 1.9 $W/(m^*K)$ de $k_{térmica}$ en la GDL y b) el caso base.....	54
Fig. 4 -27. Saturación del agua líquida a diferentes voltajes de celda para a) 1.9 $W/(m^*K)$ de $k_{térmica}$ en la GDL, b) 0.6 $W/(m^*K)$ de $k_{térmica}$ en la CL y c) el caso base.....	55
Fig. 4 -28. Temperatura durante el proceso a diferentes voltajes de celda para a) 0.6 $W/(m^*K)$ de $k_{térmica}$ en la CL y b) el caso base.....	55

Fig. 4 -29. Efecto de la conductividad eléctrica en la a) GDL y b) CL, en una curva de polarización de una PEMFC.....	56
Fig. 4 -30. Flujo de la temperatura a diferentes voltajes de celda para a) 40 S/m de s en la GDL y b) el caso base.....	57
Fig. 4 -31. Flujo electrónico a diferentes voltajes de celda para a) 40 S/m de s en la GDL y b) el caso base.....	58
Fig. 4 -32. Potencial de la fase del electrodo a diferentes voltajes de celda para a) 40 S/m de s en la GDL y b) el caso base.....	58
Fig. 4 -33. Potencial de la fase del electrolito a diferentes voltajes de celda para a) 40 S/m de s en la GDL y b) el caso base.....	58
Fig. 4 -34. Efecto de la porosidad en la a) GDL y b) CL, en una curva de polarización de una PEMFC.....	59
Fig. 4 -35. Flujo del H ₂ O a diferentes voltajes de celda para a) 0.6 ε de la GDL y b) el caso base.....	60
Fig. 4 -36. Efecto de tortuosidad del poro de la GDL a) sin ampliar b) con zona ampliada, en una curva de polarización de una PEMFC.....	61
Fig. 4 -37. Flujo del H ₂ O a diferentes voltajes de celda para a) 1.4 τ de la GDL y b) el caso base.....	61
Fig. 4 -38. Flujo del agua líquida a diferentes voltajes de celda para a) el 1.4 τ de la GDL y b) el caso base.....	62
Fig. 4 -39. Efecto de la permeabilidad de la a) GDL y b) CL, en la curva de polarización de una PEMFC.....	63
Fig. 4 -40. Perfiles de flujos a través del plano a diferentes voltajes de celda para a) 6.15 e-10 m ² de kappa en la GDL y b) el caso base.....	63
Fig. 4 -41. Perfiles de potencia a través del plano a diferentes voltajes de celda para a) 6.15 e-10 m ² de kappa en la GDL y b) el caso base.....	64
Fig. 5-1. Comparación de los diferentes casos al 21% de O ₂ en la curva de polarización de una PEMFC.....	68
Fig. 5-2. Comparación del resultado al a) 40%, b) 60%, c) 80% y d) 100% de O ₂ con el resto de casos, de una PEMFC.....	69

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 3-1. Condiciones del caso base en el MATLAB.....	29-31
Tabla 5-1. Condiciones finales en el MATLAB.....	66-68
Tabla B-1. Coste del personal que ha participado en el proyecto.....	80
Tabla B-2. Coste del equipo informático empleado para este proyecto.....	81
Tabla B-3. Coste de las licencias de los programas informáticos.....	81
Tabla B-4. Coste de amortización del software.....	81
Tabla B-5. Presupuesto total del proyecto.....	81-82

TABLA DE SÍMBOLOS

Nomenclatura

A_{elec}	Superficie del electrodo [m]
a	Densidad de superficie activa [1/m]
C_i	Carga
D_X	Coefficiente de difusión Fickian del gas X [m ² /s]
D^{eff}	Coefficiente de difusión efectiva
F	Constante de Faraday (96 485.333 C/mol)
ΔG	Diferencia de energía libre de Gibbs [J/mol]
ΔH	Entalpía de formación de agua líquida [J/mol]
H_{ad}	Entalpía de ab-/desorción del agua [J/mol]
H_{ec}	Entalpía de evaporación/condensación [J/mol]
h_m	Coefficiente de transferencia
I	Densidad de corriente de la célula [A/m ²]
i	Velocidad de reacción electroquímica [A/m ³]
i_0	Densidad de corriente de intercambio [A/m ²]
j_e	Flujo electrónico [A/m ²]
j_p	Flujo protónico [A/m ²]
j_T	Flujo térmico [W/m ²]
j_λ	Flujo de agua disuelta [mol/m ² s]
j_X	Flujo de gas X [mol/m ² s]
j_s	Flujo de agua líquida [mol/m ² s]
κ	Conductividad térmica [W/mK]
κ_a	Coefficiente de transferencia de absorción de agua [m/s]
κ_c	Coefficiente de transferencia de condensación de agua [m/s]
κ_d	Coefficiente de transferencia de desorción de agua [m/s]
κ_e	Coefficiente de transferencia de evaporación de agua [m/s]
K	Permeabilidad
L	Espesor de la capa [m]
\dot{m}	Transferencia de masa
P	Presión absoluta del gas [Pa]
P_A	Presión de gas en el canal de gas del ánodo [Pa]
P_C	Presión de gas en el canal de gas del cátodo [Pa]
P_{ref}	Presión de referencia (1 atm, 101 325 Pa)
P_{sat}	Presión de vapor de agua de saturación [Pa]
p_c	Presión capilar [Pa]
R	Constante del gas (8,31446 J/mol K)
r_f	Radio de las fibras de carbono
RH	Humedad relativa del gas [-]
RH_A	Humedad relativa en el canal de gas del ánodo [-]
RH_B	Humedad relativa en el canal de gas catódico [-]

s	Saturación de agua líquida [-]
s_c	Saturación en la interfaz GDL/GC del cátodo [-]
s_{im}	Saturación de agua líquida inmóvil [-]
s_{red}	Saturación de agua líquida reducida [-]
S_F	Velocidad de reacción sustancial [mol/m ³ s]
S_e	Velocidad de reacción de electrones [A/m ³]
S_p	Velocidad de reacción de protones [A/m ³]
S_T	Fuente de calor [W/m ³]
S_λ	Velocidad de reacción del agua disuelta [mol/m ³ s]
S_x	Velocidad de reacción del gas X [mol/m ³ s]
S_s	Velocidad de reacción del agua líquida [mol/m ³ s]
S_{ad}	Fuente de ab-/desorción de agua [mol/m ³ s]
S_{ec}	Fuente de evaporación/condensación [mol/m ³ s]
ΔS	Entropía de reacción [J/m ³ s]
ΔS_{HOR}	Entropía de reacción de oxidación del hidrógeno [J/mol K]
ΔS_{ORR}	Entropía de la reacción de reducción del oxígeno [J/mol K]
T	Temperatura absoluta [K]
T_A	Temperatura de la placa anódica y del GC [K]
T_C	Temperatura de la placa catódica y del GC [K]
T_{sur}	Temperatura superficial
T_{ref}	Temperatura de referencia (80 °C, 353,15 K)
U	Tensión de la célula [V]
V_m	Volumen molar de agua líquida [m ³ /mol]
x	Coordenada a través del plano [m]
x_x	Fracción molar del gas X [-]
$x_{H_2O}^A$	Fracción molar de vapor de agua en el ánodo GC [-]
$x_{H_2O}^C$	Fracción molar de vapor de agua en el cátodo GC [-]
$x_{H_2}^A$	Fracción molar de hidrógeno en el ánodo GC [-]
$x_{O_2}^C$	Fracción molar de oxígeno en el GC catódico [-]
x_{sat}	Fracción molar de vapor de agua de saturación [-]
α_{H_2}	Fracción molar de hidrógeno en gas combustible seco [-]
α_{O_2}	Fracción molar de oxígeno en gas oxidante seco [-]
Z_i	Carga
β	Factor de simetría de semirreacción [-]
ε	Fracción de volumen de ionómero [-]
ε_p	Fracción de volumen del espacio poroso (porosidad) [-]
η	Sobrepotencial de activación [V]
λ	Contenido de agua del ionómero [-]
μ	Viscosidad dinámica del agua líquida [Pa*s]
σ_e	Conductividad eléctrica [S/m]
σ_p	Conductividad protónica [S/m]
τ	Tortuosidad de los poros [-]

ϕ_e	Potencial de fase del electrodo [V]
ϕ_p	Potencial de fase del electrolito [V]
$\Delta\phi$	Diferencia de potencial Galvani [V]
$\Delta\phi_0$	Diferencia de potencial reversible [V]

Siglas

AEMFC	Anion Exchange Membrane Fuel Cell
(A)CL	(Anion) Catalyst Layer
(A)GDL	(Anion) Gas Diffusion Layer
(C)CL	(Cathodic) Catalyst Layer
(C)GDL	(Cathodic) Gas Diffusion Layer
HOR	Low Temperature Proton Exchange Membrane Fuel Cell
LT-PEMFC	Hydrogen Oxidation Reduction
MEA	Membrane Electrode Assembly
MPL	Microporous Layer
ORR	Oxygen Oxidation Reduction
PEM	Proton Electrode Membrane
PEMFC	Proton Exchange Membrane Fuel Cell
PEFC	Polymer Electrolyte Fuel Cell
PTFE	Polytetrafluorethylene
PVC	Polyvinyl Chloride
PTL	Porous Transport Layer

Especies químicas

CO ₂	Dióxido de Carbono
H ₂	Hidrógeno
H ₂ O	Agua
Pt	Platino
e-	Electrón

Capítulo 1. Introducción

1.1 Antecedentes

A la hora de la ejecución del trabajo de fin de grado, escogí una de las investigaciones que el Instituto Universitario del CMT (Centro de Motores Térmicos) proporciona a los estudiantes. Entre todas las presentes, seleccioné el estudio de la influencia del diseño de una MEA y de las condiciones de operación sobre su curva de polarización. Primeramente, asimilé los objetivos que se debían de cumplir, así como la metodología que emplearía para conseguirlos. Para su realización, fue necesaria una extensa revisión bibliográfica para comprender todas las partes de las que se componen las pilas de combustible, su funcionamiento y porque son cada vez más conocidas en el campo de la combustión térmica. Además, indagué sobre las propiedades del reactivo de hidrógeno y sobre el empleo y las funciones del programa MATLAB.

En el momento de empezar a realizar la investigación, busqué diferentes artículos que explicarían con más detalle cada uno de los parámetros por los que se constituye una pila de combustible, y seguidamente comencé a la realización del efecto que producen en la curva de polarización, mostrados en el Capítulo 4. Estas comparaciones eran de vital importancia que las realizase lo antes posible para que el resto del equipo de investigación pudiese proseguir con ella. Además, el efecto que producen representa el porqué del cambio de sus valores a la hora de modificar la eficiencia a nuestra voluntad.

Con todos los datos obtenidos, y siempre guiada por mi tutor, presenté mis resultados finales al resto del equipo, y con ello finalicé mi investigación para mi TFG. Cabe mencionar que mis resultados son una ínfima parte de la investigación que se realiza.

1.2 Motivación del estudio

Actualmente, el empleo de motores de combustión interna es cada vez más criticado por los gobiernos y ecologistas, debido a sus notables y diferentes contaminaciones que crean en el medio ambiente. Más aún, el parlamento europeo ha prohibido la venta de motores de combustión para el 2035 con el fin de bajar las emisiones. Esto sumado a la creciente subida de precios del combustible tradicional, obliga a las compañías de transporte a buscar diferentes soluciones mediante investigaciones con el empleo de otros reactivos o motores que produzcan menos contaminación y más eficiencia.

En este contexto muchas de las investigaciones que se están realizando hoy en día son acerca de motores eléctricos, los cuales a un medio plazo pueden ayudar a la reducción de estas contaminaciones, ya sean las emisiones de la capa de ozono como el ruido. Pero, a largo plazo esta solución creará los mismos problemas y otros nuevos, con respecto al medio ambiente, ya que, sus baterías son extremadamente contaminantes al igual que la

producción de energía eléctrica. Además, a todo esto, hay que sumarle el hecho del aumento de los precios de la electricidad y el tiempo de recarga de estos motores.

Es por todo lo mencionado anteriormente que las pilas de combustible mediante el reactivo de hidrógeno son una solución más ecológica, eficiente y económica, al menos en un futuro próximo. El hidrógeno es el reactivo más abundante de todo el universo, asimismo se puede crear mediante la electrólisis, un proceso que descompone el agua creando el hidrógeno y oxígeno. Por tanto, si unimos todas sus características reparamos en la gran ventaja que tiene frente a otros métodos.

Por consiguiente, su inmediata investigación es primordial para conseguir las tan ansiadas condiciones que nos ofrecen las pilas de combustible y de esta forma, emplearlas en un futuro próximo.

1.3 Objetivos

Una vez comentada la motivación del estudio acerca de las características y eficiencia de las pilas de combustible, es necesario fijar unos objetivos de acuerdo con la investigación realizada por el tutor a cargo del trabajo de fin de grado.

Entre ellos se encuentra la exploración de los diferentes parámetros que condicionan una pila de combustible, con sus valores más habituales y con su consiguiente comparación de los efectos que provocan en la curva de polarización. Además, se propone averiguar qué condiciones al ser modificadas suscitan que la curva de polarización sea igual o similar a la curva del estudio de M. Fournier.

Por otra parte, se va a ejecutar una comparación de la concentración del oxígeno en los resultados finales y averiguar qué porcentaje es que produce una mayor eficiencia a la pila.

1.4 Metodología

En este apartado se va a proceder a explicar el plan de acción de cada uno de los apartados del trabajo de fin de grado.

En primer lugar, una vez realizado un resumen del tema a tratar en este estudio, se elaboran los antecedentes, la motivación por la cual se ha realizado este trabajo y los objetivos a cumplir.

En el Capítulo 2, se ha realizado una revisión bibliográfica sobre el reactivo que hace que un motor de combustión esté libre de emisiones, el hidrógeno. En ese apartado se explicarán sus propiedades, su origen y sus principales características en el mercado. Consecutivamente, se explica el tema principal de este estudio, las pilas de combustible. Este apartado se ha dividido en tres subapartados: las partes y los materiales, donde se

describirán las funciones de cada una de las piezas empleadas para la construcción de una pila de combustible, subrayando la MEA debido al enorme interés en esta investigación; el funcionamiento general, mencionando cada una de las reacciones que ocurren dentro de la MEA; y las ventajas y desventajas. Por último, se procede a describir los transportes de masa y de energía, así como la continuidad del flujo, para explicar con mayor detenimiento como los reactivos, el calor y el agua se mueven a través de las capas.

En el Capítulo 3, se nombran los valores iniciales del estudio para una posterior comparación en los próximos dos capítulos. Además, se describe detalladamente el desempeño de una curva de polarización, empleadas durante todo el estudio para comparar resultados y obtener la conclusión.

En el Capítulo 4, se realiza un estudio paramétrico de todos los parámetros que consideramos importantes, empleando las curvas de polarización y las gráficas de flujos y potencias, obtenidas todas ellas con el programa MATLAB. Cada una de las condiciones se ha comparado su valor inicial con uno mayor y otro menor para luego proceder al análisis de los efectos producidos.

En el Capítulo 5, se encuentran los resultados de las gráficas finales con los valores empleados para obtenerlas, valiéndose de los resultados del capítulo anterior. Asimismo, se han cotejado los diferentes impactos que produce la concentración de O_2 , y el porqué de su importancia.

Finalmente, en el Capítulo 6 se analizan los resultados obtenidos en el Capítulo 4 y 5, llegando a una conclusión en cuanto a la mejor concentración de O_2 .

Capítulo 2. Revisión bibliográfica

2.1 Hidrógeno

El hidrógeno es el elemento que mayor concentración posee la Tierra, constituye aproximadamente el 75% de la materia del universo. No es una fuente de energía primaria, sino que es un vector energético, es decir se trata de un elemento que necesita ser fabricado para poder ser usado. Entre las diferentes aplicaciones que tiene, se hayan los motores de combustión interna, las pilas de combustible, el transporte aéreo y la generación de energía eléctrica.

El primer documento que menciona el hidrógeno como combustible, es la novela “*La isla misteriosa*” del escrito Julio Verne en 1875. A partir de ese momento, numerosos científicos predijeron que el hidrógeno sería el futuro como un medio para conseguir una fuente de energía inagotable. Más tarde entre los años 20 y 30, Erren y su equipo convirtieron más de 1000 coches y camiones en sistemas que empleaban el hidrógeno junto con gasolina como combustible, pero fue Lawaczec quien esbozó los primeros conceptos para su uso en el transporte.

Entre los años 60 y 70, se originó la economía del hidrógeno producido por el sol, la cual afirmaba que el hidrógeno no solamente era más eficiente que los combustibles convencionales, sino que además era favorable para la contaminación y mucho más económico. Aunque, no ha sido hasta las últimas 2 décadas, cuando los programas de investigación han recibido la atención de los gobiernos y las empresas, todo gracias al rápido desarrollo que se ha producido en las pilas de combustible.

Actualmente hay más de 200 estaciones de reabastecimiento alrededor del mundo, y los países más desarrollados, como es el caso de EE. UU., Canadá, los países de la Unión Europea y Japón, ya han empezado a proponer e implementar estrategias para la transición a la economía de hidrógeno. El objetivo principal, hoy en día, es reducir las emisiones contaminantes, mejorar la seguridad del abastecimiento de la energía y fortalecer la economía.

El hidrógeno tiene como característica principal almacenar y distribuir la energía cuando se requiere, sin embargo, esto acarrea diversos problemas.

El almacenamiento es uno de los mayores obstáculos debido a sus características químicas y físicas. La más destacada es su alta densidad de energía gravimétrica que en comparación con la baja densidad de energía volumétrica, requiere tanques de mayor volumen para almacenar el mismo contenido energético.

En cuanto a su distribución, el hidrógeno necesita de infraestructuras, ya sea para transportarlo como gas comprimido o en forma líquida, para su disponibilidad a gran escala y para sus diferentes aplicaciones. Estas infraestructuras dependen del tipo de

proceso con el que se haya elaborado el hidrógeno, normalmente se emplean tuberías o camiones que lo transportan por carretera, y son muy costosas.

Por otro parte, está el tema de su producción, que presenta una gran variedad de métodos para ser convertido en energía útil, eficiente y limpia; entre los que se encuentran la generación con combustibles fósiles, con biomasa, con agua a través de ciclos termoquímicos, mediante electrólisis del agua, el hidrógeno fotoeléctrico y el fotobiológico. A pesar de su amplia gama de procesos, la fuente principal de producción son los combustibles fósiles, como el gas natural, el petróleo y el carbón; siendo esta la responsable de aproximadamente el 95% de la producción del hidrógeno. Esto se debe a la madurez de sus tecnologías con respecto al resto de procesos de creación del hidrógeno, no obstante, al igual que el resto, se necesita optimizarlas para su producción a gran escala. Entre sus diferentes tecnologías se encuentran el reformado catalítico con vapor, la oxidación parcial y la gasificación; siendo la más empleada la primera por ser el más económico de las tres. Además, dependiendo del proceso y fuente primaria usada, su generación estará acompañada de la captura y el almacenamiento del CO₂, para que esta sea sostenible a medio o largo plazo. Los problemas que posee la generación de hidrógeno son los que se explican, más adelante, en el apartado de ventajas y desventajas sobre las pilas.

2.2 Pilas

Las pilas de combustible son conversores de energía electroquímica, es decir, son dispositivos que transforman la energía química del combustible directamente en electricidad evitando de esta manera todos los procesos que involucra la conversión de energía habitual, realizando un simple paso. Esto las hace mucho más eficientes que los dispositivos usados actualmente, sin embargo, todavía se siguen realizando investigaciones para superar ciertos obstáculos de ingeniería y economía para que sean totalmente comerciables en un futuro próximo.

Se encuentran varios tipos de pilas de combustible, basadas en la temperatura de funcionamiento, la aplicabilidad o los diferentes electrolitos empleados. En esta última se encuentran dos tipos: las pilas de combustible de membrana de intercambio de protones (PEMFCs) y las pilas de combustible de membrana de intercambio de aniones (AEMFCs). Las dos se diferencian en sus aplicaciones, debido a sus diversas características. En este trabajo se investigarán las PEMFCs, las cuales son idóneas para aviones, vehículos marinos y aplicaciones portátiles, en especial para el transporte de vehículos, por su alta eficiencia, arranque rápido y bajas emisiones, lo que la hace una de las fuentes de energía que, en un futuro, podría sustituir a los combustibles fósiles. La reducción de las emisiones contaminantes, como el CO₂ o el SO₂, es uno de los principales motivos por el que se quiere implementar esta tecnología.

2.2.1 Partes y materiales

Para entender cómo funciona una pila de combustible, es fundamental primero conocer cada una de las partes que la componen y los materiales con los que están hechas. Una PEMFC consiste en placas bipolares, placas finales, conjuntos de electrodos de membrana (MEA) y canales de flujos de gas, intercaladas unas con otras como se muestra en la Fig. 2-1.

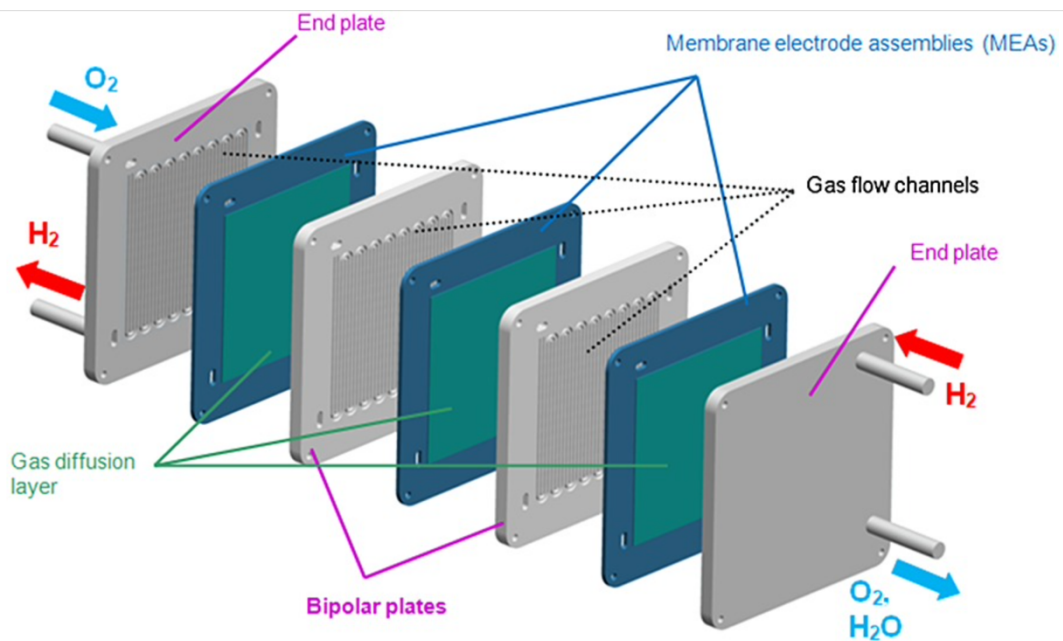


Fig. 2 - 1 Representación de una PEMFC.

Primero se encuentran las placas finales, cuyo objetivo es mantener en su lugar todas las capas de la pila, transmitiendo uniformemente las fuerzas de compresión. Suelen estar hechas a partir de acero inoxidable, grafito, polietileno o PVC, y dado que no suele haber flujos de gas o líquido, la única forma de transferir el calor es mediante la conducción, por lo que es necesario que un lado de la placa esté expuesto a un material aislante [2].

Asimismo, las placas bipolares están hechas de grafito y acero inoxidable, aunque suele ser mucho más común el acero, ya que al ser el grafito de naturaleza porosa hace que sea perjudicial para las pilas. Su misión es distribuir el combustible y el oxidante a las capas difusoras de gas (GDL), recoger la corriente eléctrica producida y actuar como una estructura de soporte. A causa de los gases reactivos el material escogido tiene que ser resistente a la corrosión, químicamente inerte e impermeable a los gases, además de tener una alta conductividad. Estas placas se encuentran alternadas con las MEAs.

Con relación a los canales de flujos de gas, son los responsables de que los reactivos puedan transportarse a lo largo de la pila en las placas bipolares y finales; y conectan electrónicamente una célula a otra. Estos pueden ser moldeados directamente en ellas y tienen diversas formas: rectangulares, circulares, triangulares, etc. Si los canales están formados en ambos lados de la misma placa, un lado sirve como placa catódica y el otro como anódica para la celda adyacente, como se muestra en la Fig. 2-1.

Sin embargo, en este trabajo nos hemos centrado en el MEA, que consiste en una membrana (PEM) recubierta de una capa catalítica (CL) en cada lado, y que esta, está a su vez, recubierta de una capa difusiva (GDL). Básicamente, tanto la PEMFC como la MEA forman sándwiches con los elementos que las componen. En la Fig. 2-2, se puede apreciar cada una de estas capas y los elementos que se transportan en cada una de ellas.

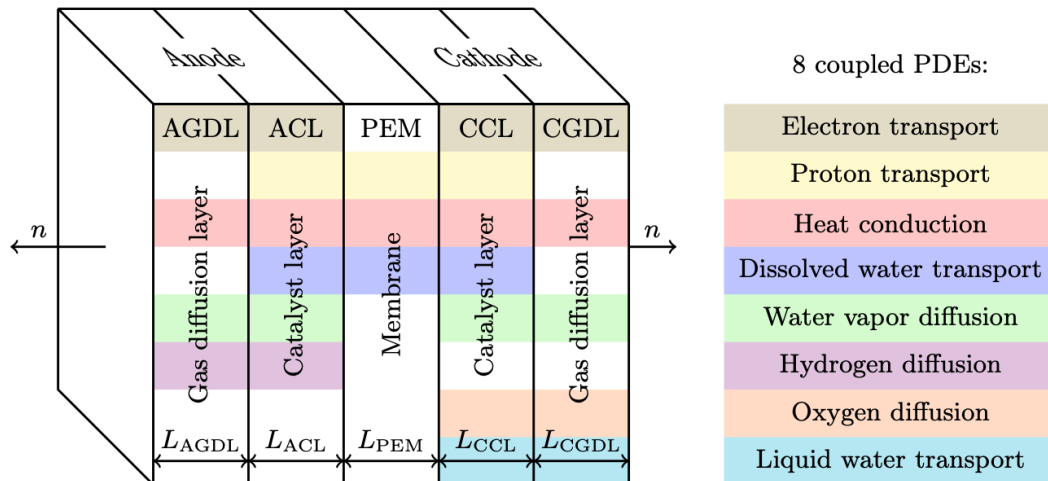


Fig. 2 - 2 Representación de una MEA de cinco capas (no a escala real) junto con los diferentes transportes que se producen en ella.

La diferencia entre las capas de un lado de la membrana y del otro es el hecho de ser anódicas o catódicas, es decir, que muestra por donde se lleva a cabo la oxidación y la reducción dependiendo del elemento que se haya introducido, si el O_2 o el H_2 . Si juntamos la Fig. 2-2 y la Fig. 2-1, vemos que en la zona anódica se inyecta el O_2 y sale H_2 , por tanto, es donde se produce la oxidación, mientras que en la zona catódica ocurre justo lo contrario. Esto, unido a las características de cada capa, es lo que origina cada uno de los transportes.

La capa difusiva (GDL) es una capa porosa que permite la distribución de los reactivos a lo largo de la capa hasta llegar a la capa catalítica, se asegura de su transporte, mientras recoge electrones, y se ocupa de la gestión del agua. Está situada entre la capa catalizadora y las placas bipolares, y consiste en 2 capas: un sustrato de fibra de carbono (GDS) y una capa microporosa (MPL). El GDS, localizado al lado de las placas bipolares, es el que proporciona la distribución de los reactivos y del agua, mencionados anteriormente, además de un soporte estructural al MEA. Mientras que la MPL, tiene

como papel principal la gestión del agua, en concreto se encarga de su eliminación para evitar inundaciones en las otras dos capas de la PEMFC. Se combina fácilmente con el sustrato para reducir la resistencia de contacto en la interfaz GDL-CL, evitando que el catalizador se filtre en el sustrato durante el proceso de preparación. Los materiales más comúnmente empleados son el papel de carbón Toray, para la conductividad eléctrica, mezclado con PTFE (politetrafluoretileno), para la hidrofobicidad [1]. El PTFE mejora la hidrofobia, ya que, aleja las gotitas de agua de donde se producen cerca de la membrana; sin embargo, repercute gravemente en el rendimiento y el funcionamiento de la pila de combustible. Intercaladas entre la capa difusiva y la membrana se encuentran las capas catalíticas (CLs). Es la capa más activa de un MEA porque es donde se producen todas las reacciones electroquímicas, mostradas en la Fig. 2-2, otorgando vías de transporte de electrones, protones, reactivos y productos, y favoreciendo la reacción de hidrógeno (HOR) en el ánodo y la reacción de reducción de oxígeno (ORR) en el cátodo [10]. Uno de los mayores obstáculos a evitar es la obstrucción de la CL por un exceso de agua, cuya única solución es ser descargada a través de la GDL inmediatamente. De la misma forma, una falta de agua causaría también graves problemas, dado que reduciría la conductividad iónica, e induciría una resistencia de contacto severa entre la membrana y la CL. Por lo que corresponde a los materiales que la componen, los más habituales son partículas de platino apoyadas en carbono, unidas por un aglutinante de ionómero, generalmente Nafion. Una de las características que más destaca es el hecho de que los tres elementos que componen la capa no poseen la misma humectabilidad [15]. Además, cabe recalcar que la relación ionómero/carbono y su interacción en el medio de dispersión influye en la estructura porosa de la CL, así como en su temperatura.

Por último, la membrana de intercambio de protones, también conocida como la membrana de electrolito de polímero (PEM), es una membrana polimérica delgada permeable a los protones, cuya finalidad es transportar los protones de hidrógeno del ánodo al cátodo y prohibir la conducción de electrones. No solamente eso, sino que proporciona la puesta en marcha a temperatura ambiente, la eliminación de muchos problemas de corrosión y el potencial de bajas pérdidas de resistencia. Estas pérdidas resistivas son consecuencia de la disminución de la conductividad protónica después de la excesiva pérdida de agua en el electrolito; es más, posee el mismo problema con el agua que la capa catalítica. El material que la compone es un polímero de ácido persulfónico, el famoso Nafion de DuPont [10], caracterizado por su estabilidad contra ataques químicos.

2.2.2 Funcionamiento y fenómenos físicos.

En una pila de combustible se encuentran los reactivos (Hidrógeno y Oxígeno) y los electrones, los cuales constituyen las fases triples de una PEMFC, contando cada uno de ellos con una ruta de transporte diferente.

En primera instancia la placa bipolar introduce los reactivos gaseosos en la capa difusiva: el hidrógeno en el ánodo y el oxígeno en el cátodo. Esta capa tiene como función principal transportar los reactivos a la capa contigua, la capa catalítica. En esta, el hidrógeno se oxida a protones como portadores de carga, pasa al electrolito y vuelve a la capa catalítica, pero de la zona catódica, permaneciendo en todo momento en estado iónico. En este momento se han producido dos reacciones: la reacción de Tafel y la reacción de transferencia de carga de “Volmer” [1]. La primera es una etapa disociativa de quimisorción, que sugiere que el H₂ primero se absorbe en la superficie, antes de que suceda la reacción química, y luego se disocia en los átomos de H₂,



La segunda produce el protón y el electrón,



La unión de estas dos reacciones es la reacción de la oxidación del hidrógeno,



Seguidamente, los protones reaccionan con el oxígeno, el cual se transporta por difusión molecular y/o convección en la capa difusiva catódica, para formar agua y algo de calor residual [10],

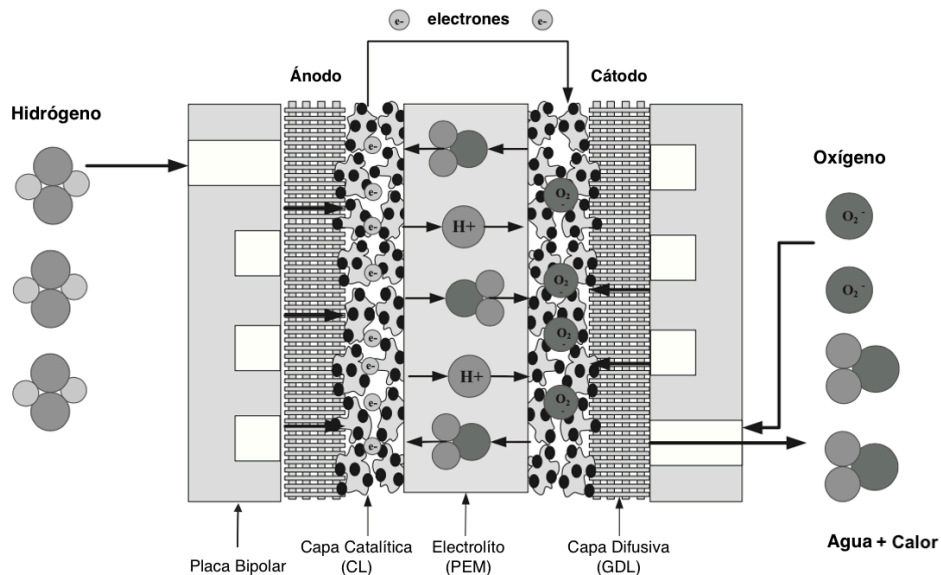
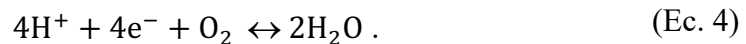


Fig.2- 3. Diseño de una pila de combustible.

Al mismo tiempo los electrones se mueven por la AGDL hasta la ACL, donde son transportados a través de un ciclo externo hasta la CCL, es decir, no llegan a pasar por el

electrolito. Estos son atraídos por materiales conductores, y solo viajan cuando es necesario. Cabe destacar que las moléculas no pueden permanecer en estado iónico debido a su naturaleza, sino que se unen con otras moléculas para volver a su estado neutro. Todo el proceso se muestra en la Fig. 2-3.

2.2.3 Ventajas y desventajas.

Las pilas de combustible de membrana de electrolito polimérico son fuentes de energía alternativa bastante prometedoras para afrontar los diversos problemas que, hoy en día, presentan las tecnologías de conversión de energía convencionales. Sin embargo, todavía no están preparadas para su funcionamiento, ya que necesitan un mayor desarrollo.

Las propiedades que las hacen más atractivas, pero que al mismo tiempo provocan que sigan en constante investigación, son las mostradas a continuación [2] [4] [5] [8] [9] [11] [12] [13] [15] .

- Compromiso de una alta eficiencia. La eficiencia de una pila de combustible es mucho mayor que la de la combustión interna de los motores, lo que la hace atractiva para aplicaciones automovilísticas. No obstante, la gestión térmica, la degradación de los mecanismos de las pilas, la inanición por combustible u oxidante y la gestión del agua han provocado problemas que afectan al rendimiento y a la fiabilidad. En las PEMFC se producen tres degradaciones diferentes: la mecánica, debido a fisuras, grietas o rasgaduras; la térmica, por las altas temperaturas que provocan que el Nafion se descomponga; y la electroquímica, que origina agujeras en la membrana. En cuanto a la gestión del agua, se emplean 2 requisitos para que esta sea adecuada. El primero, es mantener húmeda tanto la membrana como la capa catalítica; y el segundo, evitar el secado o la inundación de las células.
- Compromiso de emisiones cero o bajas. Este es uno de los aspectos que más interesa en vista de la creciente relevancia que, en la actualidad, se otorga a las emisiones contaminantes. El único deshecho que causa es el aire y el agua no usados; aun así, al no tener un hidrógeno listo para su uso, se siguen generando emisiones, incluido el CO₂, aunque mucho más bajas.
- Simplicidad y ninguna parte móvil. Creadas a partir de componentes repetitivos y sin movimiento en sus partes hace que sea óptima la producción en masa y que tenga un bajo mantenimiento.
- Promesa del bajo coste. Al poder ser producidas en masa, su coste disminuye en gran medida, sin embargo, todavía está lejos de equipararse con los motores tradicionales. Esto se debe, en su mayoría, a los altos precios de los materiales como el Nafion y el catalizador de platino, a la dificultad de su venta y a la costosa tecnología de reforma del combustible de hidrógeno.

- Silenciosa. Inherentemente silenciosas, lo que las hace atractivas por su variedad de aplicaciones, así como potencia portátil, energía de reserva y aplicaciones militares.
- Durabilidad. Uno de los objetivos a cumplir es mejorar el uso de la generación de potencia estacionaria para aumentar la duración de las pilas (>40000 -80000h), no obstante, en la actualidad solo llega a las 5000h. Su baja durabilidad, en comparación con los motores de combustión, es a causa de las impurezas del aire, las corrientes de combustible, las variaciones de temperatura fuera del rango de los fabricantes y algunas condiciones de funcionamiento, como es el caso de las cargas cíclicas, los arranques y las paradas frecuentes.
- Tamaño y peso. Al ser creadas con una variedad de tamaños poseen una amplia variedad de aplicaciones.
- Tecnología del hidrógeno. Una de las grandes ventajas del hidrógeno es que puede producirse de diferentes maneras, pero pese a esto, hoy por hoy esta tecnología aún no es lo suficientemente madura. El amplio uso del hidrógeno como combustible requeriría una infraestructura de hidrógeno, la cual sería muy costosa, pesada y precisaría de energía para funcionar.

2.3 Ecuaciones de transporte de masa y energía, y la continuidad del flujo.

Transporte de masa

El transporte másico es el estudio del flujo de especies cuyas pérdidas son denominadas pérdidas de concentración. Estas pérdidas pueden afectar considerablemente el rendimiento de las pilas de combustible y se pueden minimizar optimizando el transporte de masa en las placas de campo de flujo, en la capa difusiva y en el catalizador. El transporte másico de las placas de flujo está dominado por la convección, mientras que el transporte de las otras dos está dominado por la difusión. Aparte del transporte másico por convección y difusión también se realizan cálculos de flujo de masa total, o balances de masa y para la conservación de esta.

Los balances de masa son necesarios para averiguar los caudales de una pila de combustible. Para ello se precisa de la masa que entra y que sale de cada proceso en los subsistemas. El procedimiento habitual es:

1. Producir un diagrama de flujo, anotando suficiente información para obtener un resumen de cada proceso.
2. Escribir las ecuaciones de balances de masas para determinar los caudales.

Entre los caudales de flujo que se introducen en la pila se encuentran el hidrógeno, el oxígeno, el aire, el vapor de agua de estos tres elementos y el nitrógeno, que al no ser usado en ninguna de las reacciones su valor a la salida es el mismo que de la entrada.

Además del nitrógeno, los otros caudales de masa que se expulsan son el hidrógeno no usado, el aire agotado y el oxígeno, aunque en menor medida.

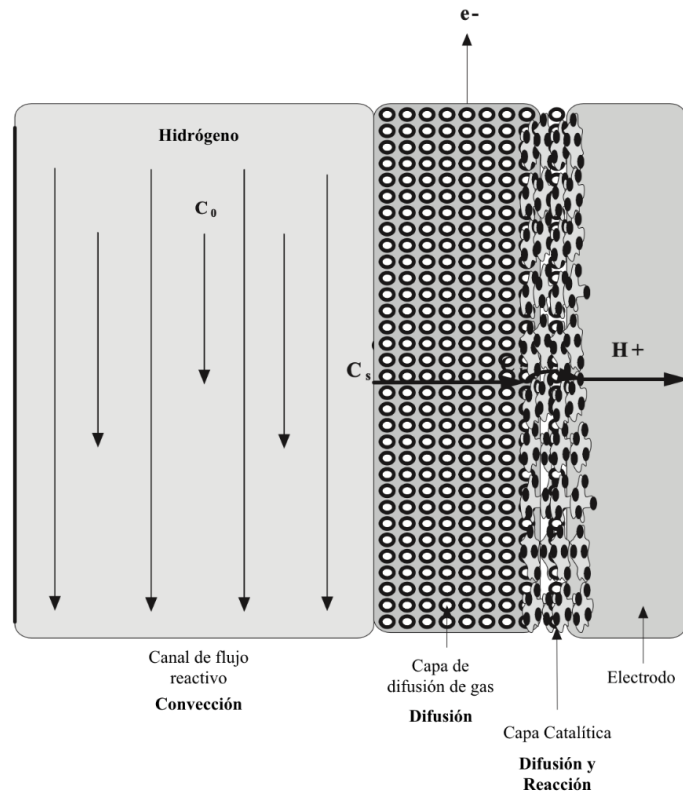


Fig.2- 4 Transporte másico convectivo y difusivo.

El transporte de masa por convección se produce en los canales de flujo del reactivo. Si nos fijamos en la Fig. 2-4, el reactivo posee una concentración C_0 , y por medio de la convección se transporta por el canal de flujo hasta la concentración superficial C_s del electrodo. La tasa de transferencia de masa es en este caso: (Ec. 5)

$$\dot{m} = A_{\text{elec}} h_m (C_0 - C_s)$$

donde A_{elec} es la superficie del electrodo, y h_m es el coeficiente de transferencia de masa. Aparte de esta ecuación hay otras que se emplean para la transferencia de masa al electrodo, como la de Nerst-Planck:

$$J_i(\mathbf{x}) = -D_i \frac{\partial C_i(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} - \frac{z_i F}{RT} D_i C_i \frac{\partial \phi(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} + C_i v(\mathbf{x}) \quad (\text{Ec. 6})$$

Esta ecuación es unidimensional en el eje x siendo D_i el coeficiente de difusión, z_i y C_i la carga, $v(x)$ la velocidad, $\frac{\partial C_i(x)}{\partial x}$ el gradiente de concentración y $\frac{\partial \phi(x)}{\partial x}$ el gradiente de potencial.

En el momento en el que el reactivo pasa a la capa difusiva se transporta por medio de la difusión, pasando por el catalizador, donde se produce la reacción, hasta llegar al electrodo. La tasa de transferencia de masa por difusión, empleando la Ley de Fick es:

$$\dot{m} = -D \frac{dC}{dx} \quad (\text{Ec. 7})$$

El transporte de difusión en estado estacionario es:

$$\dot{m} = A_{\text{elec}} D^{\text{eff}} \frac{C_s - C_i}{\delta} \quad (\text{Ec. 8})$$

donde C_i es la concentración del reactivo, δ es el espesor de la capa difusiva y D^{eff} es el coeficiente de difusión efectiva. Las pérdidas de concentración se deben, en este caso, al agotamiento del reactivo que puede producir la reacción. Están determinadas por la diferencia entre el reactivo de la capa catalítica y la concentración del producto; y expresadas por la ecuación:

$$v_{\text{conc}} = c \ln \frac{i_L}{i_L - i} \quad (\text{Ec. 9})$$

en la que c es una constante, i_L es la corriente de densidad limitante e i es la densidad de corriente fija. Por último, tanto el transporte por convección como por difusión pueden presentar resistencia, y para calcular la resistencia total al transporte del reactivo se combinan las ecuaciones Ec. 10 [1]:

$$\dot{m} = \frac{C_0 - C_i}{\left(\frac{1}{h_m A_{\text{elec}}} + \frac{\delta}{D^{\text{eff}} A_{\text{elec}}} \right)} \quad (\text{Ec. 10})$$

Transporte de energía

En el transporte de energía es necesario tener en cuenta la energía que sale y que entra en cada proceso de las pilas de combustible y en las propias pilas, para poder calcular la energía general del proceso. Para ello se realizan balances, empleando el mismo procedimiento que en el transporte de masa, añadiendo dos pasos más: la determinación de las entalpías y escribir la ecuación del balance de energía. En el balance se establecen las temperaturas, el uso del H_2 y O_2 , la potencia esperada producida y el porcentaje de pérdida de calor. El balance de energía se calcula mediante el balance genérico de calor:

$$\sum Q_{\text{in}} - \sum Q_{\text{out}} = W_{\text{el}} + Q_{\text{dis}} + Q_c \quad (\text{Ec. 11})$$

donde Q_{in} es la entalpía de los gases reactivos de entrada y Q_{out} de salida, W_{el} es la electricidad generada, Q_{dis} es el calor disipado en los alrededores y Q_c es el calor apartado de la pila por enfriamiento. Descrito de forma más genérica sería la suma de las energías de entrada es igual a la suma de las energías de salida [1]:

$$\sum (h_i)_{\text{in}} = W_{\text{el}} + \sum (h_i)_{\text{out}} + Q \quad (\text{Ec. 12})$$

Otro aspecto a tener en cuenta es la acumulación de los canales de gas, la cual podemos dividir en cuatro términos [4]:

$$\frac{\partial (\rho u)^j}{\partial t} = \left[\underbrace{\frac{\partial}{\partial z} \left(\sum_i v^j c_i^j h_i (T^j) \right)}_{1^\circ \text{término}} \right] + \underbrace{\lambda^j \frac{\partial^2 T^j}{\partial z^2}}_{2^\circ \text{término}} + \underbrace{\frac{\alpha_1}{\delta^j} (T - T^j)}_{3^\circ \text{término}} - \underbrace{\sum_i \frac{\dot{n}_i^j}{\delta^j} h_i (T^j)}_{4^\circ \text{término}} \quad (\text{Ec. 13})$$

El primer y cuarto término hacen referencia al transporte de energía por flujo convectivo, uno en dirección z y el otro entre los canales de gas y el MEA. El segundo término es la describe la conducción de calor según la Ley de Fourier:

$$j_T = -k \nabla T \quad (\text{Ec. 14})$$

representando el flujo de calor, siendo κ la conductividad térmica [6]. Y el tercer término es la transferencia de calor entre las partes del MEA y los canales de gas.

Ecuación de continuidad

Los fluidos de las pilas de combustible actúan según la Ley de continuidad, que sostiene que el fluido se ralentiza en las paredes del canal mientras que en el centro se acelera [1]. Cada uno de estos flujos tiene una ecuación de continuidad, en total encontramos ocho, una para cada transporte que se produce en la pila, como se indica en la Fig.2-2, equiparando cada flujo con un término S [6]:

- Ley de Ohm para electrones: $\nabla \cdot j_e = S_e$ (Ec. 15)

- Ley de Ohm para protones: $\nabla \cdot j_p = S_p$ (Ec. 16)

- Conducción de calor de Fourier: $\nabla \cdot j_T = S_T$ (Ec. 17)

- Transporte de agua en ionómero: $\nabla \cdot j_\lambda = S_\lambda$ (Ec. 18)

- Difusión del vapor de agua de Fickian: $\nabla \cdot j_{H_2O} = S_{H_2O}$ (Ec. 19)

- Difusión del hidrógeno de Fickian: $\nabla \cdot j_{H_2} = S_{H_2}$ (Ec. 20)

- Difusión del oxígeno de Fickian: $\nabla \cdot j_{O_2} = S_{O_2}$ (Ec. 21)

- Transporte de agua líquida según Darcy: $\nabla \cdot j_s = S_s$ (Ec. 22)

Cada uno de los flujos tiene una variable dependiente. Si se representaran las ecuaciones de continuidad con estas variables, se transformarían en no lineales.

También es importante destacar las relaciones que existen entre la continuidad y la conservación de la energía, y las cuales son de obligatorio cumplimiento en los flujos. Podemos dividir las en tres, la primera es que el flujo en una unión tiene que ser el mismo que el flujo fuera de esta, la segunda es que los caudales tendrán una caída de presión según el caudal que los atraviese y, por último, es que la suma algebraica de estas caídas debe ser igual a cero [2].

Capítulo 3. Explicación del modelo

El modelo empleado en este trabajo es trifásico no isotérmico de estado estacionario para pilas de combustible PEM de baja temperatura (LT-PEMFC), simulado mediante el uso del programa MATLAB. Está basado principalmente en la MEA, dividida en cinco subdominios o capas en las que se implementan los procesos de transporte más fundamentales a través del plano.

Para poder llevar a cabo este estudio, se han empleado tres tipos de gráficas, generadas automáticamente por MATLAB: la curva de polarización, los potenciales y los flujos a través de las capas. Estas gráficas se emplearán más adelante para comprobar si los datos modificados concuerdan con los conocimientos previos sobre este tema, y verificar la mejora del rendimiento.

3.1 Caso base

Antes de modificar alguna condición de la pila de combustible, se necesitan obtener todas las gráficas relacionadas con las condiciones de funcionamiento típicas, también conocido como caso base. En la Tabla 3-1, están enumeradas cada una de las condiciones que más adelante serán comentadas.

Todos los parámetros que se explican se pueden dividir en cuatro categorías. La primera las constantes, son aquellos parámetros cuyo valor no varía ni se modifica durante todo el proceso. Parte de estas condiciones son constantes universales y otras, como la temperatura, son constantes que se han establecido para esta pila en particular. La segunda son las condiciones de funcionamiento; estas tenderán a variar a medida que el proceso vaya avanzando, sobre todo nos centraremos en la fracción molar del oxígeno. Las últimas dos categorías son los parámetros electroquímicos y del material, cuyos valores ayudarán a modelar la pila para mejorar su rendimiento.

Condiciones	Valor	Unidades
Constantes		
Masa molar del agua	18 e-3	$\frac{Kg}{mol}$
Zero grados Celsius	273.15	K
Constante universal del gas	8.31446	$\frac{J * mol}{K}$
Constante de Faraday	96485.333	$\frac{C}{mol}$
Presión de referencia	101325	Pa
Temperatura de referencia	80	°C
Condiciones de funcionamiento		

Presión total en el canal de gas del ánodo/cátodo	1.5 e5	Pa
Humedad relativa en el canal de gas del ánodo	0.90	-
Humedad relativa en el canal de gas del cátodo	0.90	-
Saturación del agua líquida en la interfaz de la GDL/GC	0.12	-
Temperatura de la placa bipolar ánodo y canal de gas	70	°C
Temperatura de la placa bipolar cátodo y canal de gas	70	°C
Fracción molar del hidrógeno en el gas de combustible seco	1	-
Fracción molar del oxígeno en el gas de oxidante seco	0.21	-
Parámetros electroquímicos		
Factor de simetría HOR	0.5	-
Factor de simetría ORR	0.5	-
Parámetros del material		
Espesor de la AGDL	160e-6	m
Espesor de la CGDL	160e-6	m
Espesor de la ACL	10e-6	m
Espesor de la CCL	10e-6	m
Espesor de la capa PEM	25e-6	m
Conductividad térmica de la GDL	1.6	$\frac{W}{m * K}$
Conductividad térmica de la CL	0.27	$\frac{W}{m * K}$
Conductividad térmica de la PEM	0.3	$\frac{W}{m * K}$
Conductividad eléctrica de la GDL	1250	S/m
Conductividad eléctrica de la CL	300	S/m
Porosidad de la GDL	0.76	-
Porosidad de la CL	0.4	-
Permeabilidad absoluta de la GDL	6.15e-12	m ²
Permeabilidad absoluta de la CL	1e-13	m ²
Tortuosidad del poro en la GDL	1.6	-

Tortuosidad del poro en la CL	1.6	-
-------------------------------	-----	---

Tabla 3 - 1 Condiciones del caso base en el MATLAB.

Es importante señalar las limitaciones que este modelo posee, ya que afectarán a los resultados que se obtengan. Estas limitaciones son debidas a la simplicidad del programa, donde se han descuidado intencionalmente varios procesos químicos y físicos. Entre las más importantes se encuentran: los efectos de la convección de calor y de gas, la resistencia al contacto eléctrico y térmico, las deformaciones mecánicas, la permeación de especies de gas e hidráulica, el flujo de agua líquida a través de los medios porosos y las interfaces, etc. Aunque sin duda la más destacada de todas es la inanición del oxígeno, la cual se explicará en más detalle más abajo [6].

3.2 Explicación de las gráficas

Entre las tres gráficas que se emplean en esta investigación la más destacada es la curva de polarización. Se la puede definir como “*la medida estándar de rendimiento para los sistemas de pilas de combustible*” [1], para ello representa la relación entre corriente y tensión. La curva de polarización se ve afectada por más de 50 parámetros relacionados con los materiales, el transporte o las reacciones. Esto se ve reflejado en la dependencia del voltaje con las condiciones de funcionamiento, como la temperatura o la carga aplicada.

Uno de los aspectos más estudiados es la caída de tensión. Por lo general, estas pérdidas se dividen en tres zonas: polarización de activación, polarización óhmica y polarización de concentración.

Como se observa en la Fig. 3-1, las pérdidas de activación se desarrollan en bajas densidades de corriente, ocasionadas por sobrepotenciales de reacciones electroquímicas; las pérdidas óhmicas están situadas en un rango intermedio de densidad de corriente; y la polarización de concentración se produce a densidades muy altas debido a las pérdidas del transporte de masa. Estas últimas pérdidas podrían no llegar a suceder si se detuviera el proceso antes de conseguir corrientes tan altas, sin embargo, estas son de especial interés para aplicaciones automovilísticas [1] [10]. Para explicarlo en más detalle, al producirse densidades de corriente altas se produce un exceso de agua en el cátodo, lo que conduce a un flujo de dos fases gas-líquido. Este flujo es el causante de la disminución del rendimiento, y por consiguiente un mecanismo limitante [3].

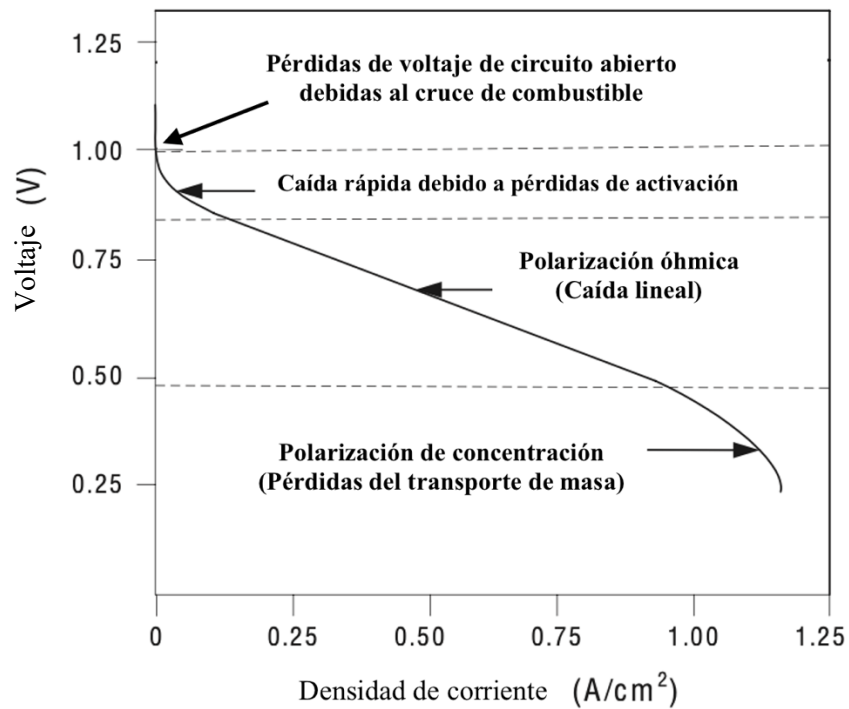


Fig.3 - 1 Pérdidas de la curva de polarización.

Para este estudio se ha servido de un generador equipado con una pila de 35 celdas, cada una de las cuales tiene un área de electrodo activa de 232 cm². Por tanto, a la hora de obtener la curva de polarización es imprescindible tener en cuenta estos datos.

Por último, las otras 12 gráficas que se generan en el programa representan los flujos y los potenciales correspondientes a través de las capas de MEA. Es importante mencionar que las líneas verticales divisorias que aparecen en ellas hacen referencia a la interfaz entre capas.

Capítulo 4. Estudio paramétrico

En este apartado, se observará que ocurre al modificar los valores de entrada del Matlab, tanto al disminuirlos como al aumentarlos; con la finalidad de determinar la influencia de cada uno de ellos en las curvas de polarización. Para ello se han creado diferentes modelos a medida que cambiamos estos parámetros, cuyos valores iniciales están resumidos en la Tabla 3-1.

Este estudio es fundamental, ya que nos va a permitir conocer cuales con los parámetros que debemos modificar para obtener las gráficas finales.

Se han dividido en diferentes subapartados cada una de las condiciones que se han considerado más relevantes.

I. Presión

En primer lugar, se encuentra la presión, en la que encontramos dos: la de referencia y la total en el canal de gas del ánodo y cátodo. La primera mejora sus características al disminuirse, ya que produce un aumento del voltaje y de la densidad de potencia en la zona baja y media intensidad; la cual es la zona de funcionamiento real del modelo [6].

$$D_X = \frac{\epsilon_p}{\tau^2} (1 - s)^3 D_{X,\text{ref}} \left(\frac{T}{T_{\text{ref}}} \right)^{1.5} \frac{P_{\text{ref}}}{P} \quad (\text{Ec. 23})$$

Al fijarnos en la Ec. 23, al aumentar la presión de referencia aumenta el factor de escala para difusividades de gas, el cual afecta directamente a los flujos de gas, mostrado en la Ec. 24.

$$j_X = -CD_X \nabla x_X \quad (\text{Ec. 24})$$

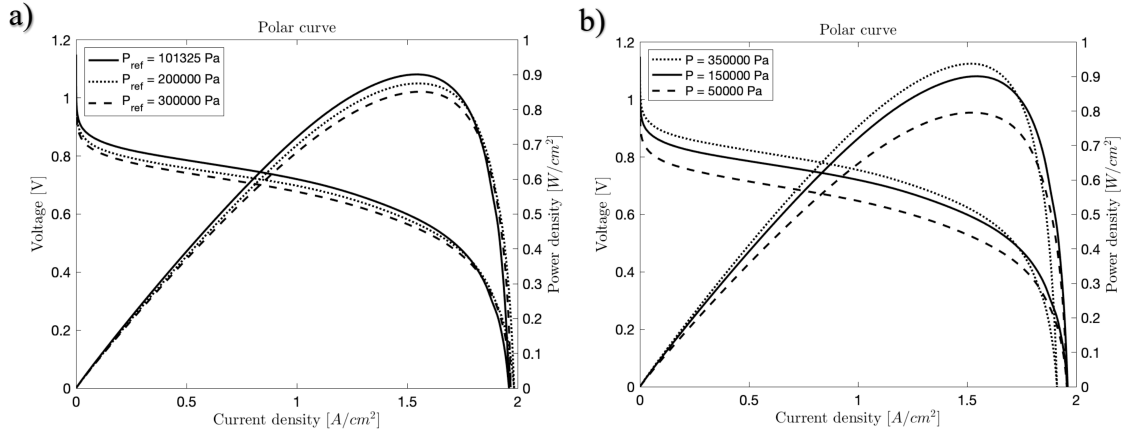


Fig. 4 - 1 Efecto de la presión a) de referencia b) presión total en el canal de gas del ánodo y cátodo, en la curva de polarización de una PEMFC.

De hecho, si observamos la Fig. 4-2 y comparamos las dos gráficas comprobamos que ese aumento de la presión de referencia afecta, en particular, al flujo de gas de H_2O , en la zona del cátodo, provocando que el flujo sea homogéneo y aumentando su máximo hasta $13.1363 \text{ mol/cm}^2\text{s}$.

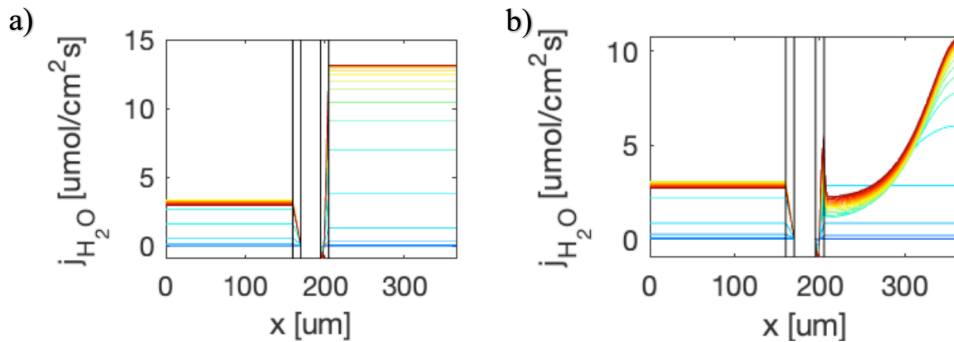


Fig. 4 - 2 Perfil de flujo del H_2O a través del plano a diferentes voltajes de celda para a) 300kPa de presión de referencia y b) el caso base.

Esta homogeneidad también ocurre en el cátodo de la fracción molar del H_2O , Fig. 4-3. Además, este aumento también afecta a la temperatura de la pila, la cual disminuye, aunque no en gran medida; provocando de esta forma, una pequeña modificación del flujo de calor.

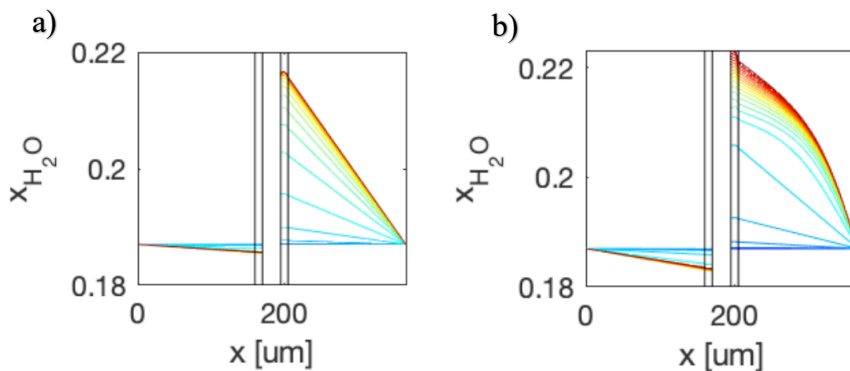


Fig. 4 - 3 Fracción molar del H_2O a diferentes voltajes de celda para a) 300kPa de presión de referencia y b) el caso base.

Por otro lado, este parámetro también afecta al sobrepotencial de la capa catalítica:

$$\eta = \begin{cases} \Delta\phi - \Delta\phi_0 & \text{in ACL} \\ \Delta\phi_0 - \Delta\phi & \text{in CCL} \end{cases} \quad (\text{Ec. 25})$$

$$\Delta\phi = \phi_e - \phi_p \quad (\text{Ec. 26})$$

$$\Delta\phi_0 = \begin{cases} -\frac{T\Delta S_{\text{HOR}}}{2F} - \frac{RT}{2F} \ln \left[\frac{p_{\text{H}_2}}{P_{\text{ref}}} \right] \\ -\frac{\Delta H - T\Delta S_{\text{ORR}}}{2F} + \frac{RT}{4F} \ln \left[\frac{p_{\text{O}_2}}{P_{\text{ref}}} \right] \end{cases} \quad (\text{Ec. 27})$$

Combinando la Ec. 25, Ec. 26 y Ec. 27, obtendremos la fórmula del sobrepotencial empleada en el modelo de Matlab, según el cual averiguamos que este modifica la velocidad de reacción electroquímica y la conservación del calor. Este último sería la causa por la que disminuye la temperatura, ya mencionada antes. Así mismo, afecta al intercambio de la densidad de corriente del ORR,

$$i_{\text{ORR}} = 2.45 \times 10^{-8} \text{ A/cm}^2_{\text{Pt}} \left(\frac{p_{\text{O}_2}}{P_{\text{ref}}} \right)^{0.54} \times \exp \left[\frac{67 \text{ kJ/mol}}{R} \left(\frac{1}{T_{\text{ref}}} - \frac{1}{T} \right) \right] \quad (\text{Ec. 28})$$

en otras palabras la media reacción limitante de velocidad que modifica solamente el cátodo. Uno de sus rasgos más importantes es que modela la concentración y la dependencia de la temperatura de la intensidad con mucha precisión.

En cuanto a la presión total en el canal de gas del ánodo y cátodo, ocurre lo opuesto a la presión de referencia; aumentarla mejora el voltaje y la densidad de potencia, disminuyendo la densidad de corriente. Una similitud es el efecto que tiene sobre el sobrepotencial, con referencia a las Ec. 25, 26 y 27.

Por otra parte, una de las diferencias entre la presión en el ánodo y el cátodo, es que únicamente la presión en el cátodo afecta al intercambio de la densidad de corriente del ORR; como se muestra en la Ec. 28, donde cabe mencionar que $p_{\text{O}_2} = x_{\text{O}_2} P_C$. Al mismo tiempo, tanto la presión en el cátodo como el ánodo, altera la fracción molar del vapor de agua y del agua de saturación, y la concentración de gas intersticial de la capa catalítica, en las dos, y de la difusiva, en el cátodo.

$$C = \frac{P_A}{R \times T} \quad C = \frac{P_C}{R \times T} \quad (\text{Ec. 28})$$

$$x_{\text{sat}} = \frac{P_{\text{sat}}}{P_A} \quad x_{\text{sat}} = \frac{P_{\text{sat}}}{P_C} \quad (\text{Ec. 29})$$

$$x_{H_2O}^A = RH_A P_{sat}(T_A) / P_A \quad (Ec. 30)$$

$$x_{H_2O}^C = RH_C P_{sat}(T_C) / P_C$$

Las últimas tres ecuaciones se pueden estudiar en la Fig. 4 - 4. La fracción molar del vapor de agua pasa de tener un máximo de 0.22 a 0.096 en la capa catalítica del cátodo. Y lo mismo ocurre con la fracción molar del O₂ y del H₂, aunque al contrario que en la del vapor de agua, en estas aumentamos tanto el mínimo como el máximo valor de las dos.

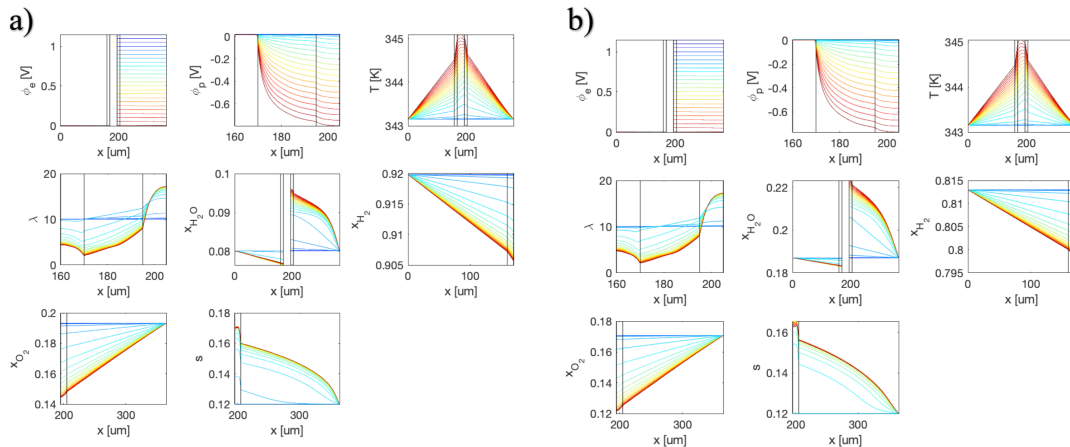


Fig. 4 - 4 Perfil potencial a través del plano a diferentes voltajes de celda para a) 350kPa de presión total y b) el caso base.

Se debe agregar que, el flujo del H₂O pasa de tener un máximo de 10.604 mol/cm²s a 6.749 mol/cm²s en la capa difusiva del cátodo; y de 2.683 mol/cm²s a 2.395 mol/cm²s en la capa difusiva del ánodo. Estas variaciones se muestran en la Fig. 1-5.

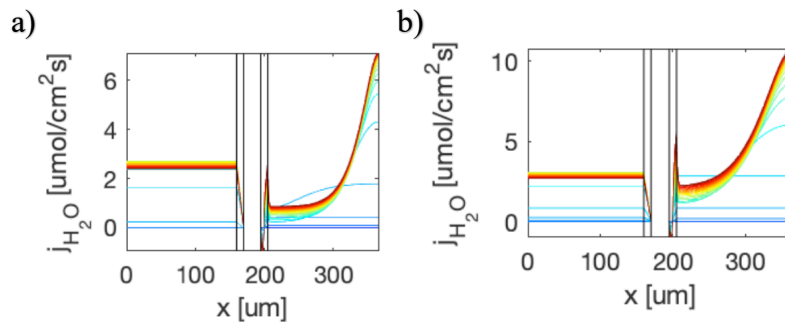


Fig. 4 - 5 Perfil de flujo del H₂O a través del plano a diferentes voltajes de celda para a) 350kPa de presión total y b) el caso base.

II. Temperatura

En relación con la temperatura encontramos los mismos tipos que en la presión, una de referencia y otra relacionada con el ánodo y el cátodo. Por lo que se refiere a la temperatura de referencia, aumenta el voltaje y la densidad de potencia al disminuirla;

además también se detecta a simple vista un aumento bastante considerable de la intensidad.

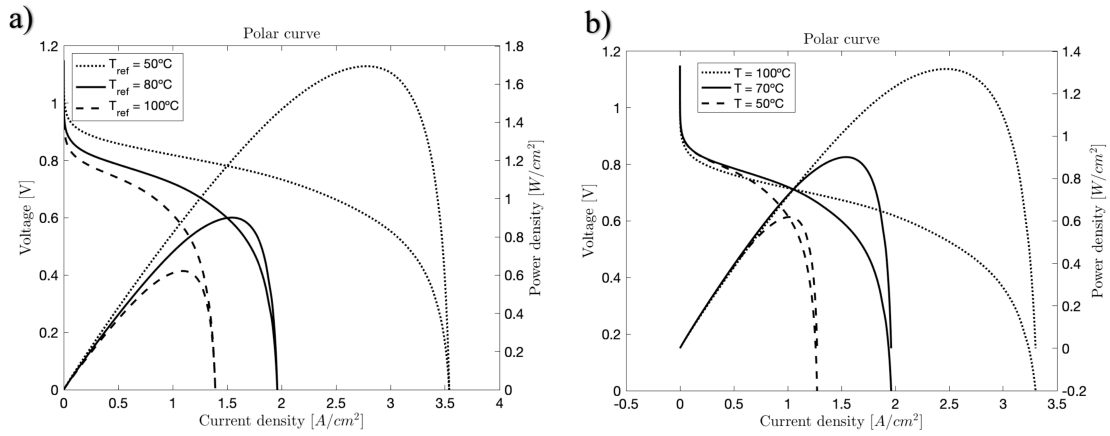


Fig. 4 - 6 Efecto de la temperatura a) de referencia b) de la capa bipolar del cátodo/ánodo y del canal de gas, en la curva de polarización de una PEMFC.

Al fijarnos en la Ec. 23 se entiende estas variaciones sufridas en el proceso, y si comparamos los flujos de gas, como se hizo previamente con la presión, se detectan cambios en todos los flujos; no solamente en el de los gases sino también en el resto de ellos.

En cada de una de las gráficas de la Fig. 4-7 encontramos una variación si las comparamos con las gráficas del caso base, Fig. 2-3. Para entender la variación de flujo de los gases (H_2O , O_2 , H_2) se sustituiría la Ec. 23 en la Ec. 24, la cual hace referencia a ley de Fick para un modelo transporte simple. Este aumento de la temperatura de referencia produce una disminución de los flujos de estos gases cuando están al máximo de su concentración de O_2 .

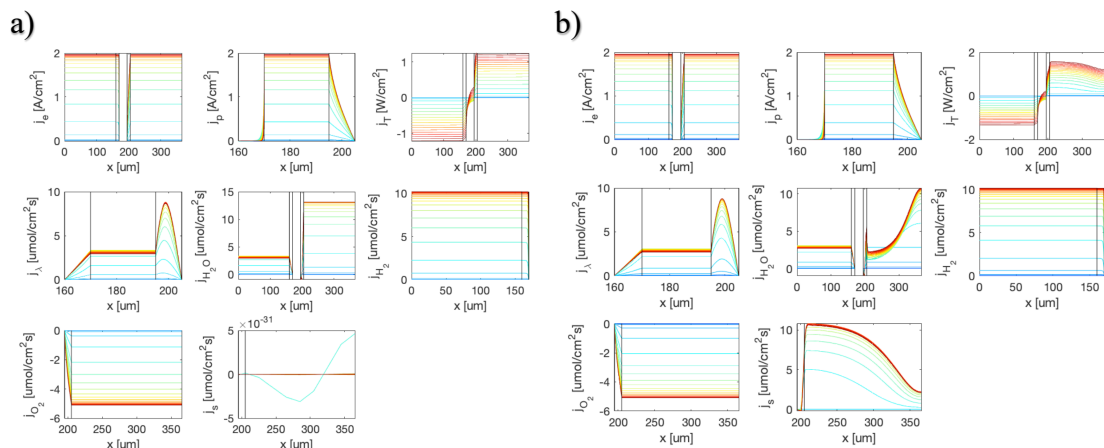


Fig. 4 - 7 Perfiles de flujos a través del plano a diferentes voltajes de celda para a) 100°C de temperatura de referencia y b) el caso base.

Aparte de afectar al factor de escala para difusividades de gas, también modifica la corrección de Arrhenius (Ec. 32); la cual, indirectamente, altera no solamente la densidad de corriente HOR (Ec. 31) y ORR (Ec. 28), como ocurre con la temperatura de

referencia, sino también a la conductividad de protones del Nafion (Ec. 33), al coeficiente de difusión del agua en el Nafion (Ec. 36), al coeficiente de transferencia de masa para la adsorción de vapor de Nafion (Ec. 34) y a la concentración total de gas intersticial (Ec. 37) para la capa difusiva del ánodo [6].

$$i_{0_{\text{HOR}}} = 0.27 \text{ A/cm}_{\text{Pt}}^2 \exp \left[\frac{16 \text{ kJ/mol}}{R} \left(\frac{1}{T_{\text{ref}}} - \frac{1}{T} \right) \right] \quad (\text{Ec. 31})$$

$$A = \exp \left[\frac{15 \text{ kJ/mol}}{R} \left(\frac{1}{T_{\text{ref}}} - \frac{1}{T} \right) \right] \quad (\text{Ec. 32})$$

La conductividad de protones del Nafion (Ec. 33) modifica el flujo de protones en las dos capas catalíticas y en la capa PEM, de esta forma, al aumentar la temperatura de referencia disminuye el flujo de 1.961 A/cm² a 1.391 A/cm².

$$\sigma_p = \epsilon_i^{1.5} 116 \frac{\text{S}}{\text{m}} \max\{0, f - 0.06\}^{1.5} \times \exp \left[\frac{15 \text{ kJ/mol}}{R} \left(\frac{1}{T_{\text{ref}}} - \frac{1}{T} \right) \right] \quad (\text{Ec. 33})$$

El coeficiente de transferencia de masa para la adsorción de vapor de Nafion (Ec. 34) cambia los valores del flujo de temperatura, el de agua disuelta y el del H₂O, en las dos capas catalíticas. Esto ocurre de forma indirecta, mediante una ecuación de por medio, la velocidad de reacción de la absorción y desorción (Ec. 35). Al igual que los otros flujos comentados anteriormente, varía sus valores disminuyéndolos.

$$k_{a,d} = a_{a,d} f \exp \left[\frac{20 \text{ kJ/mol}}{R} \left(\frac{1}{T_{\text{ref}}} - \frac{1}{T} \right) \right] \quad (\text{Ec. 34})$$

$$S_{\text{ad}} = \begin{cases} \frac{k_a}{LV_m} (\lambda_{\text{eq}} - \lambda) & \text{if } \lambda < \lambda_{\text{eq}} \text{ (absorption)} \\ \frac{k_d}{LV_m} (\lambda_{\text{eq}} - \lambda) & \text{if } \lambda > \lambda_{\text{eq}} \text{ (desorption)} \end{cases} \quad (\text{Ec. 35})$$

El coeficiente de difusión del agua en el Nafion (Ec. 36) concierne al flujo del agua disuelta tanto en las dos capas catalíticas como en la capa PEM. Si nos fijamos en sus gráficas de las Fig. 2-2 y Fig. 2-3, encontramos dos separaciones, las cuales hacen referencia a las diferentes capas de la pila, en concreto, las dos capas catalíticas y la capa PEM. Esta última solo sufre modificaciones por la Ec. 36, mientras que las otras dos tanto por la Ec. 36 como por la Ec. 34, posteriormente comentado.

$$D_\lambda = \epsilon_i^{1.5} \frac{3.842\lambda^3 - 32.03\lambda^2 + 67.74\lambda}{\lambda^3 - 2.115\lambda^2 - 33.013\lambda + 103.37} 10^{-6} \frac{\text{cm}^2}{\text{s}} \times \exp \left[\frac{20 \text{ kJ/mol}}{R} \left(\frac{1}{T_{\text{ref}}} - \frac{1}{T} \right) \right] \quad (\text{Ec. 36})$$

Para finalizar, la concentración de gas intersticial para la capa difusiva del ánodo (Ec. 37), afecta al flujo de hidrógeno y de vapor de agua. El primero pasa de tener 2.684 mol/cm²s a 2.071 mol/cm²s y el segundo de 10.162 mol/cm²s a 7.206 mol/cm²s, lo cual concuerda con lo comentado anteriormente, que los flujos sufren una disminución.

$$C = \frac{A}{R * T} \quad (\text{Ec. 37})$$

Por otro lado, la temperatura total de la capa bipolar del ánodo y cátodo (Fig. 4-6 b)), produce una reacción opuesta a la temperatura de referencia, al aumentar la temperatura aumenta la intensidad y la densidad de potencia; sin embargo, disminuye el voltaje en la zona de baja intensidad de la pila.

Asimismo, al igual que en el otro caso, este parámetro modifica los flujos, pero en vez de disminuir sus valores los aumenta. Este aumento lo visualizamos al comparar la Fig. 4-8 a y b. Uno de los cambios que se producen no es solamente ese aumento, sino que, en algunos de los flujos, sobre todo en el flujo del H₂O, O₂, el del agua líquida y el del calor, encontramos el máximo de la concentración de O₂ suministrada durante un periodo del proceso más largo. Dicho de otra manera, tendremos la máxima concentración de O₂ incluso al ir disminuyendo el flujo. Esto se puede notar en la gráfica del flujo de agua líquida, que pasa de tener un máximo de la fracción molar de O₂, en este caso al 21%, en un intervalo de 0.2162 mol/cm²s a 3.1128 mol/cm²s en la capa de difusiva del cátodo.

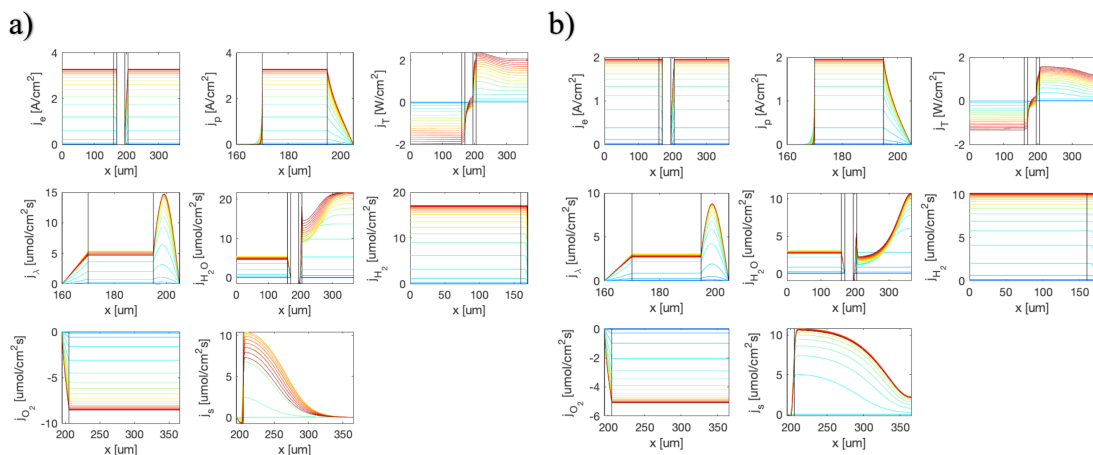


Fig. 4 - 8 Perfiles de flujo a través del plano a diferentes voltajes de celda para a) 100°C de temperatura del cátodo/ánodo y b) el caso base.

En principio la temperatura del ánodo y cátodo solo se encuentra en dos ecuaciones: la fracción molar del H₂O (Ec. 30) y la temperatura total (Ec. 38). La primera sirve para obtener la fracción molar del O₂ (Ec. 39) y del H₂ (Ec. 39), por tanto, tenemos las fracciones molares de todos los gases que participan en el proceso. Cada uno de ellos son los responsables de los cambios producidos en cada uno de los flujos restantes, así que, con otras palabras, la variación de la temperatura del ánodo y cátodo modifica

indirectamente el resto de los flujos de la pila. Esto se consigue mediante diferentes ecuaciones [6].

$$T = \frac{T_A + T_C}{2} \quad (\text{Ec. 38})$$

$$\begin{aligned} x_{\text{H}_2}^A &= \alpha_{\text{H}_2}(1 - x_{\text{H}_2\text{O}}^A) \\ x_{\text{O}_2}^C &= \alpha_{\text{O}_2}(1 - x_{\text{H}_2\text{O}}^C) \end{aligned} \quad (\text{Ec. 39})$$

En primer lugar, el H₂O modifica el contenido de agua en equilibrio del ionómero y la velocidad de reacción de evaporación/condensación de la capa difusiva del cátodo; en segundo lugar, el H₂ modifica la velocidad de reacción electroquímica y el sobrepotencial de la capa catalítica del ánodo; por último, el O₂ modifica el sobrepotencial de la capa catalítica del cátodo. Todos ellos a su vez son los responsables de las variaciones que se producen en cada uno de los flujos.

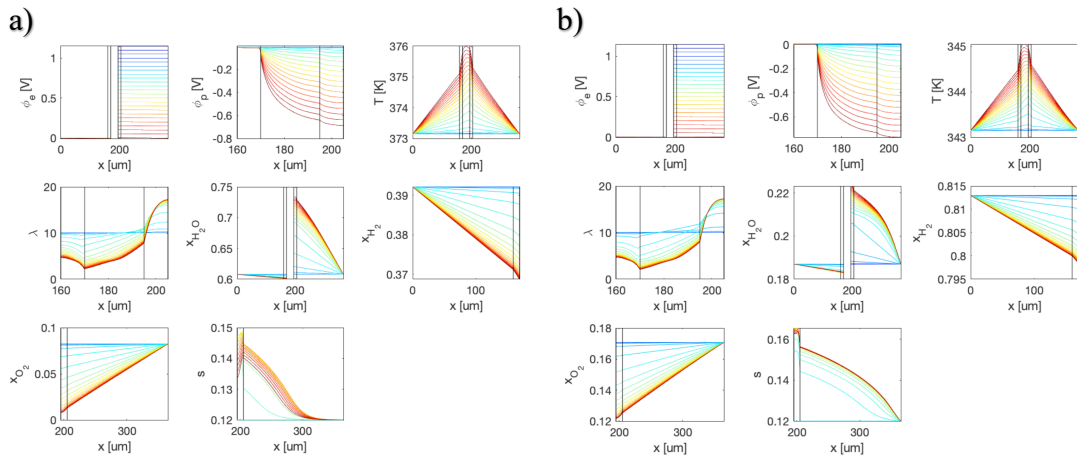


Fig. 4 - 9 Perfiles de potencia a través del plano de diferentes voltajes de celda para a) 100°C de temperatura del cátodo/ánodo y b) el caso base.

Ahora bien, al fijarse en las potencias las variaciones se producen mayormente en la saturación del agua líquida, las fracciones molares de los diferentes gases y la temperatura. Esta última se produce por la Ec. 38, la cual afecta a la temperatura total del proceso.

III. Humedad relativa

A propósito del impacto que tiene la humedad relativa si nos fijamos en la Fig. 4-10 a) al aumentar la del ánodo aumenta el voltaje, la densidad de potencia y la intensidad, aunque al final de la zona de media de intensidad y la zona de alta intensidad, en otras palabras, en la zona de la caída de tensión y de densidad de potencia, la cual no nos sirve ya que no es la zona real de funcionamiento de la pila.

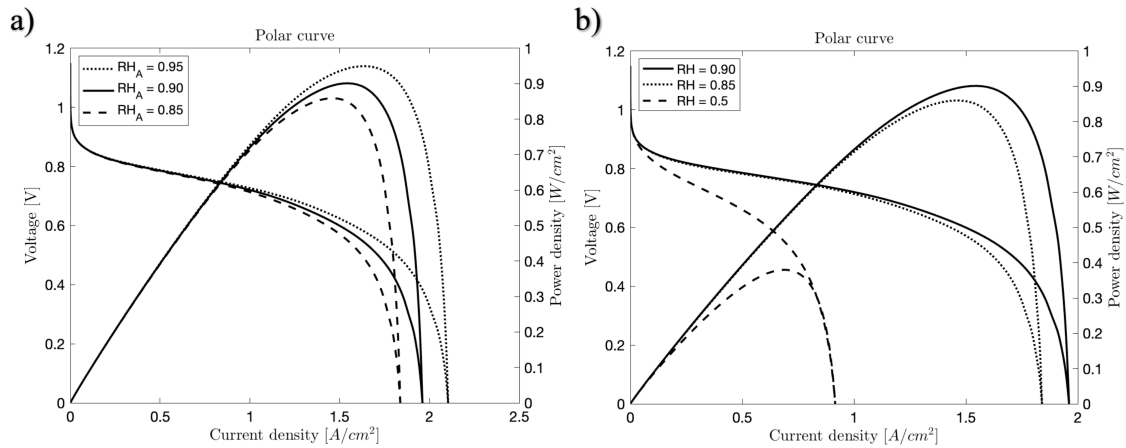


Fig. 4 - 10 Efecto de la humedad relativa a) en el canal de gas del ánodo b) en el canal de gas, en la curva de polarización de una PEMFC.

En cuanto a la Fig. 4-10 b) ocurre lo mismo que al aumentar la humedad relativa del ánodo; sin embargo, en este caso a disminuirlo mucho su valor se produce una caída de tensión y de densidad de potencia inmediata. Además, si decidiéramos aumentar más su humedad relativa total, como con la del ánodo, el programa de Matlab nos daría error. Esto último se puede deber al no impacto que produce el cambio de la humedad relativa del cátodo.

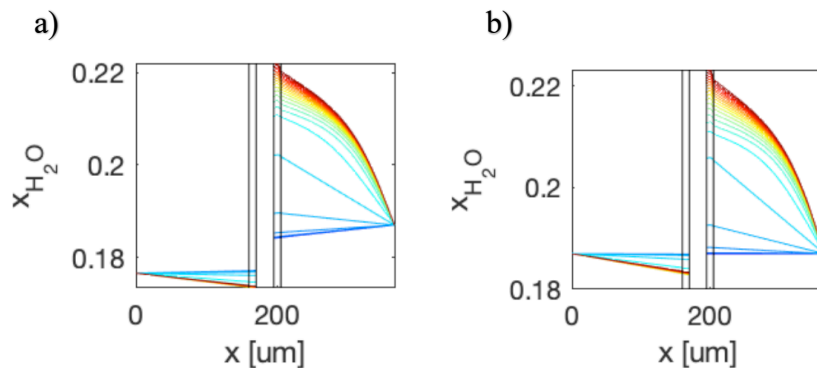


Fig. 4 - 11 Fracción molar del H_2O a diferentes voltajes de celda para a) 85% de humedad relativa del ánodo y b) el caso base.

En este caso, al igual que en la temperatura total del ánodo y cátodo afecta de forma muy parecida a los flujos y potencias, si disminuimos la humedad relativa del ánodo disminuiríamos los flujos y las potencias, la única diferencia es que al solo cambiar el valor del ánodo solo afectaría a sus capas correspondientes, como se puede observar en la Fig. 4-11 y a aquellos parámetros que se encuentran en esas capas, como es el caso del H_2 (Fig. 4-12).

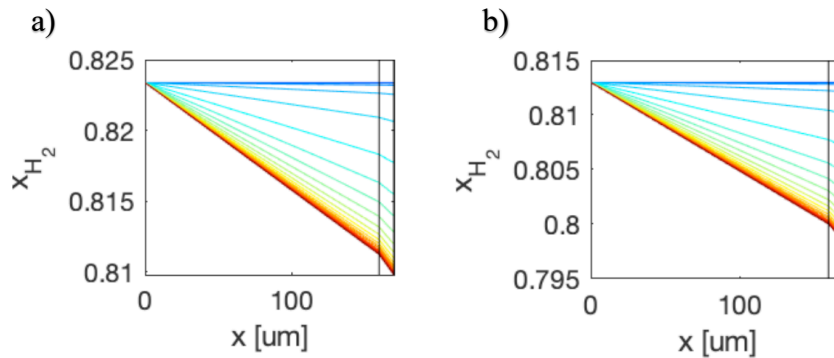


Fig. 4 - 12 Fracción molar del H_2 a diferentes voltajes de celda para a) el 85% de humedad relativa del ánodo y b) el caso base.

Lo mismo ocurre al disminuir la humedad relativa del cátodo, aunque a diferencia de la del ánodo, el resto de los parámetros que tienen una relación ya sea directa o indirectamente, se ven muy poco afectados.

IV. Saturación del agua líquida

La saturación del agua líquida es la fracción del espacio de poros lleno de agua líquida, que no provoca ningún tipo de impacto en la curva de polarización, por tanto, si únicamente se buscará modificarla no sería necesario cambiar su valor.

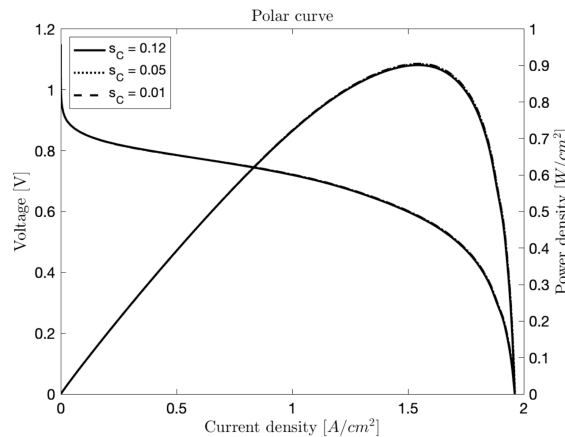


Fig. 4 - 13 Efecto de la saturación del agua líquida en la curva de polarización de una PEMFC.

Con todo esto dicho, pese a que no afecta al voltaje, la densidad de potencia o a la intensidad, sí que altera el proceso de transporte en la pila, pero, solo de los parámetros relacionados con el agua, y de las capas catalítica y difusiva del cátodo.

Un primer aspecto a considerar es la saturación inmóvil la cual tiene el mismo valor que la saturación del agua líquida (Ec. 40). Este parámetro es el que se encuentra en las ecuaciones que explican matemáticamente, los cambios que se aprecian en las gráficas de potencia y flujos [6].

$$s_c = s_{im} \quad (\text{Ec. 40})$$

Además, este parámetro no contribuye a las vías de transporte o al cambio de fase, ya sea por el aislamiento espacial o por otro factor. La ecuación principal, que hace que varíen el resto de los parámetros, es la saturación reducida del agua líquida (Ec. 41). Esta se ramifica en dos partes: una modifica los flujos del H₂O, la temperatura y la saturación del agua líquida; y la otra modifica el parámetro que estamos comentando, alterando en los dos casos las propiedades de los materiales.

$$s_{\text{red}} = \frac{s - s_{\text{im}}}{1 - s_{\text{im}}} \quad (\text{Ec. 41})$$

En el modelo de Matlab empleado, se adopta la teoría del flujo insaturado de Natarajan & Nguyen, el cual se ha convertido en el modelo estándar de la MEA bifásica macro-homogénea. Junto a esta teoría usamos la Ley de Darcy, para obtener la Fig. 4-14, y la transformamos en una ecuación dirigida por la saturación de agua líquida, o en este caso la saturación inaccesible (Ec. 42).

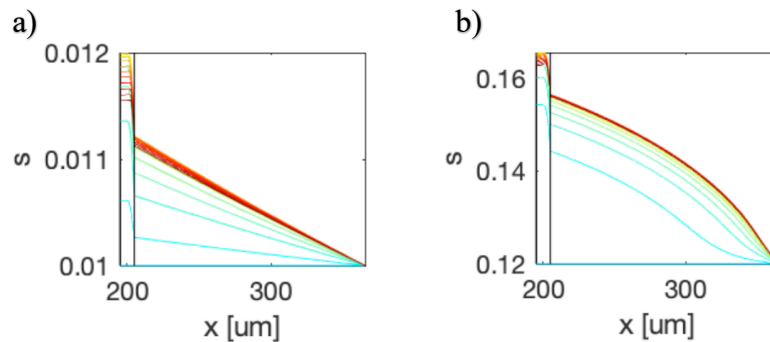


Fig. 4 - 14 Saturación del agua líquida a diferentes voltajes de celda para a) el 0.01 de s_c y b) el caso base.

Como ya se ha mencionado anteriormente, las ecuaciones usadas, a lo largo del proceso, cambian las propiedades de los materiales; debido a la permeabilidad hidráulica dependiente de saturación y a la relación diferencial entre la presión capilar y la saturación. Esta primera, produce un gran impacto en la distribución del agua líquida saturada.

$$j_s = -(\kappa/\mu V_w)(\partial p_c/\partial s)\nabla s \quad (\text{Ec. 42})$$

Al observar la Fig. 4-14, se aprecia claramente que el mínimo valor de saturación es el alterado, y que al haber disminuido su valor disminuimos con ello su máximo, el cual se encuentra en los casos en la capa catalítica del cátodo. Además, al examinar las gráficas se repara perfectamente que al disminuirla se vuelve más lineal, al no manifestarse los términos base en términos de las variables dependientes.

También, hay que tener en cuenta las condiciones límite, las cuales nos señalan que entre capas se pasa de un valor nulo, a la ecuación de continuidad de la saturación, al valor de la saturación de agua líquida. Por este motivo, en ninguna de las gráficas de la Fig. 4-15, al terminar el proceso y llegar a la última capa se consigue un valor nulo. En

cuanto a los flujos, las propiedades de los materiales cambian debido a la velocidad de condensación y evaporación.

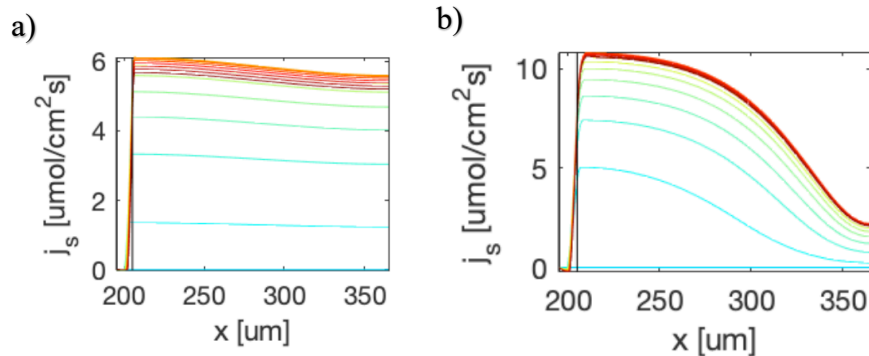


Fig. 4 - 15 Flujo del agua líquida a diferentes voltajes de celda para a) el 0.01 de s_c y b) el caso base.

Para terminar, es importante destacar la variación que sufre el flujo de agua líquida con respecto al caso base. Si nos fijamos en la Fig. 4-15, nos damos cuenta de la gran diferencia que hay. Al disminuir su valor, disminuimos su máximo; pasamos de 10.79 mol/cm²s a 6.112 mol/cm²s. Más aún, al final de la capa difusiva del cátodo, la disminución de este valor en la Fig. 4-15 a) no es muy extensa, solo disminuye medio punto, aproximadamente; mientras que en la Fig. 4-15 b) se puede apreciar una caída de este valor.

Esto está relacionado con el hecho de que la relación presión-saturación capilar, que usamos en la fórmula de Darcy para los valores de la saturación de agua líquida y que modifica los atributos de los materiales, no afecta a los límites del flujo de agua líquida en su última capa; sino que, al contrario, los valores de este flujo serán tales que se cumpla los condiciones límite de esta relación; la cual se obtiene de la Ec. 43.

$$p_c/\text{Pa} = -0.00011 \exp[-44.02(s - 0.496)] + 278.3 \exp[8.103(s - 0.496)] - 191.8 \quad (\text{Ec. 43})$$

V. Fracción molar

En el siguiente punto tratamos la fracción molar, el cual es el parámetro más importante en este trabajo, sobre todo la del oxígeno, ya que, uno de los objetivos es explicar el porqué de las pérdidas de oxígeno, que comentaremos en el próximo capítulo con más detalle, junto con nuestros resultados. Por tanto, en este apartado explicaremos en profundidad el efecto de la fracción molar.

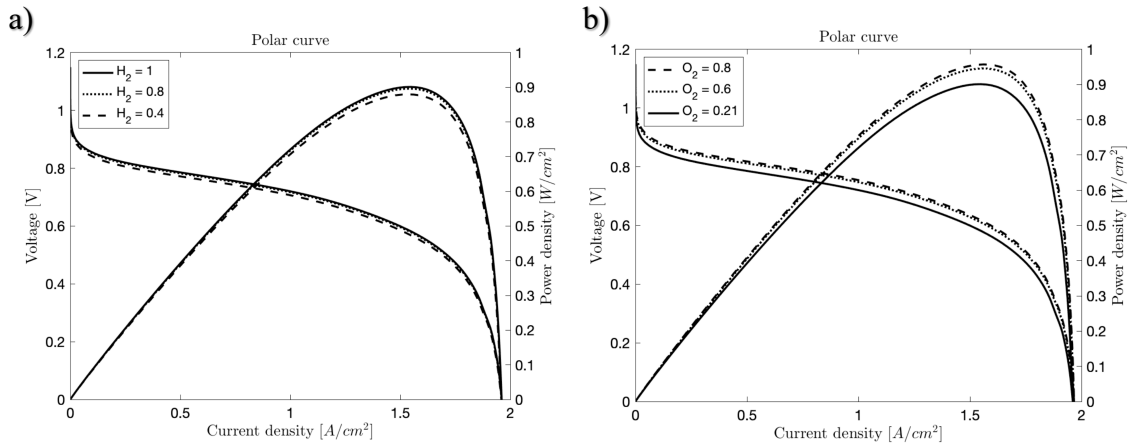


Fig. 4 – 16 Efecto de la fracción molar a) del hidrógeno en el gas de combustible seco b) del oxígeno en el gas de oxidante seco, en la curva de polarización de una PEMFC.

Primeramente, hay que comentar que, en los dos casos al aumentar su cifra se obtiene un aumento de voltaje y de densidad de potencia, es decir, una mejora en su eficiencia, como se ve en la Fig. 4-16. Aunque, notablemente, las variaciones de la concentración de O_2 son mayores.

La concentración de O_2 del caso base es del 21%, la cual al ser la misma concentración que la que posee el aire es la que se emplea en este estudio. No obstante, al ir aumentando su fracción molar es necesario disponer de otros sistemas de alimentación. El más usado es el PSA (*Pressure Swing Adoption*), el cual separa el oxígeno del aire y lo enriquece, llegando a concentraciones de un 95%. Si se necesitará un 100% de O_2 , se requeriría otro sistema de alimentación [5][29]. Como se observa en la Fig. 4-16 b), al emplear el 21% de O_2 se obtienen las condiciones óptimas de funcionamiento, pero su rendimiento no es el más deseado. Estos resultados no son nuevos ya que, existen estudios previos que los demostraba. En este trabajo, en particular, la fracción molar de O_2 modifica algunos potenciales y flujos de la pila de combustible, al igual que la mayoría de las condiciones de este estudio paramétrico. Sin embargo, estas modificaciones son casi imperceptibles en su gran mayoría.

Una de las características que más afecta a la fracción molar de O_2 es el grado de inundación. Al aumentarlo, disminuye la concentración, lo que provoca un aumento de la concentración de los potenciales y una disminución del rendimiento de la pila. Lo mismo ocurre si se disminuye la difusividad efectiva [30].

En cuanto al hidrógeno, se obtienen los mismos resultados sobre los potenciales y los flujos que al modificar el oxígeno, a excepción de la curva de polarización, como se comentó anteriormente. En las dos concentraciones la Ley de Faraday tiene un papel fundamental dado que, es la que determina el consumo del H_2 en la capa catalítica anódica y el consumo del O_2 en la capa catalítica catódica, junto con la producción del agua [6]:

$$S_F = \frac{i}{2F} \quad (\text{Ec. 44})$$

en la que la velocidad de reacción electroquímica se establece según las concentraciones. Otro de los factores a mencionar son las pérdidas que se ocasionan durante el funcionamiento de la pila. Si observamos la Fig. 4-16, al aumentar la concentración, tanto del O_2 como del H_2 , aumenta la densidad de corriente, aunque en muy poca medida, y esto unido a los aumentos de los otros dos parámetros de la curva de polarización, hace que se obtenga una mayor caída de tensión y potencia. Además, otra de las razones para que las caídas de tensión sean mayores, es por el aumento de la presión parcial de O_2 en el oxidante, provocado por el aumento de la concentración de O_2 . Para mejorar estas pérdidas se puede reducir el espesor de la capa difusiva, aumentar la porosidad o aumentar la difusividad efectiva [1].

VI. Factor de simetría

Tenemos un factor de simetría diferente para cada una de las dos reacciones que se producen en la pila: la oxidación del hidrogeno (HOR) y la reducción del oxígeno (ORR). La primera se produce en el ánodo, mientras que la otra se produce en el cátodo; además estas reacciones se originan al mismo tiempo; aunque a velocidades completamente diferentes.

Al fijarnos en la Fig. 4-17 se observa la gran diferencia que hay entre ellas al modificar sus valores. Se debe añadir que, al usar factores de simetría, en nuestro programa de Matlab, la suma de los dos parámetros unidos debería ser igual a 1. Sin embargo, para hacer este análisis solo hemos modificado uno de los dos para poder observar mejor sus diferencias.

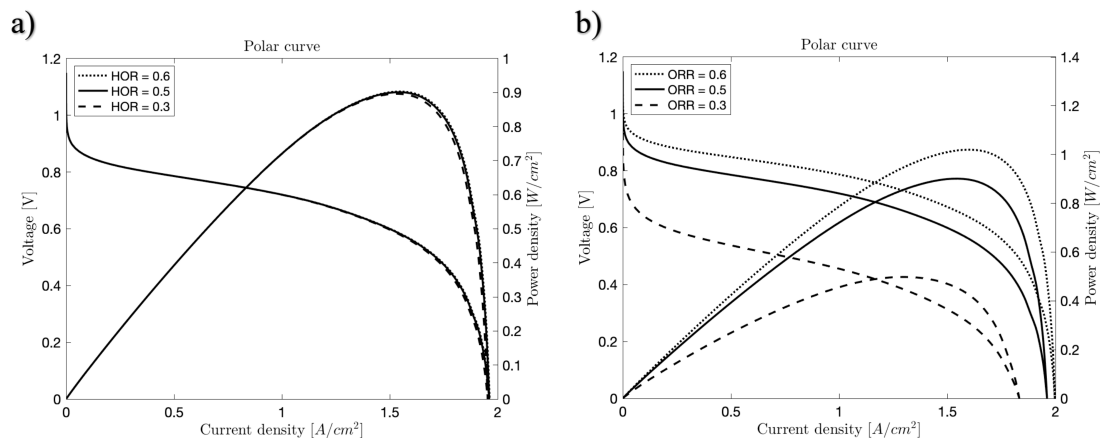


Fig. 4 - 17 Efecto del factor de simetría a) HOR b) ORR, en la curva de polarización de una PEMFC.

El factor de simetría está descrito por la ecuación de la cinética de Butler-Volmer, en otras palabras, la velocidad de reacción electroquímica (Ec. 45), la cual es la única ecuación que modifica directamente estos parámetros. Dentro de esta, se encuentra el intercambio de la densidad de corriente (i_0) de la que hay una ecuación diferente para cada reacción.

$$i = i_0 a \left(\exp \left[\frac{\beta 2F}{RT} \eta \right] - \exp \left[-\frac{(1 - \beta) 2F}{RT} \eta \right] \right) \quad (\text{Ec. 45})$$

Si nos fijamos en la Ec. 45 se encuentra el factor de simetría β en los dos términos de la resta. El sobrepotencial η en el ánodo es positivo, lo que provoca que el primer término de la ecuación sea despreciable en comparación con el segundo, y por tanto predomina la reacción de oxidación. Si se diera como resultado, una corriente de signo negativo se estaría indicando que los electrones están dejando el electrodo y por consiguiente, una reacción de oxidación neta. Por el contrario, el sobrepotencial en el cátodo es negativo, provocando que el segundo término sea despreciable, predominando, en este caso, la reacción de reducción. En los dos casos, $\Delta\phi > \Delta\phi_0$. Esta explicación concuerda con el hecho de que, el HOR solo se encuentre en la capa catalítica del ánodo y el ORR en la del cátodo.

Asimismo, el ORR no solo tiene el sobrepotencial negativo, sino que, también es de un valor muy grande, lo que ocasiona la necesidad del empleo de catalizadores. Al tener estas altas cifras, la alteración de la intensidad es mucho mayor a la que se produce en el HOR, y uniendo esto al hecho de que el HOR es mucho más rápido que el ORR y que el cátodo es el que mayor influencia tiene, obtenemos los resultados de la Fig. 4-17.

Uno de los elementos que podemos visualizar en gráficas es el potencial de fase electrolítica (ϕ_p), el cual es parte esencial para poder deducir el sobrepotencial, en particular el término referente a la diferencia de potencial de Galvani entre las fases de conducción de electrones y protones (Ec. 46).

$$\Delta\phi = \phi_e - \phi_p \quad (\text{Ec. 46})$$

En la Fig. 4-18 se representa el efecto del potencial de fase electrolítica, donde se aprecia con claridad la gran diferencia que hay al aumentar el factor de simetría en ORR. Este parámetro ocurre entre 3 capas: las dos capas catalíticas y la capa PEM; y se obtiene una diferencia de 0.067 V, aproximadamente. Es verdad que numéricamente se podría decir que no es muy notable, pero al tener unos valores que van desde 0 a -1 se considera que es bastante influyente; sobre todo si se tiene en cuenta que con él se calcula el sobrepotencial.

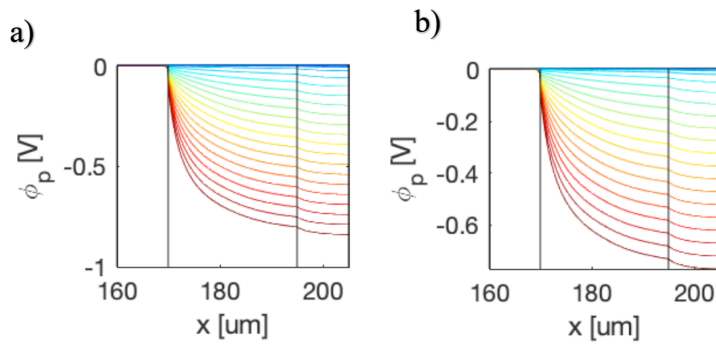


Fig. 4 - 18 Efecto del potencial de fase electrolítica a diferentes voltajes de celda para a) el 0.6 de β_{ORR} y b) el caso base.

También se observan pequeños aumentos de valor en algunas de las gráficas de las potencias y flujos, pero solo en los voltajes más grandes, en concreto entre 0.9 y 0.85 V. En cuanto al resto de parámetros no notamos ningún tipo de cambio, ni en ORR ni en HOR, ya que, como se ha comentado anteriormente, solo afecta a la densidad de corriente y, por consiguiente, a la densidad de potencia.

Otro aspecto a destacar es que las reacciones electroquímicas en una pila de combustible implican más de 1 electrón y, por tanto, más de un paso a realizar. Por este motivo, siempre y cuando la pila se encuentre en estado estacionario, la tasa de cada uno de los pasos debe ser igual, y se establecerá por el paso más lento, denominado “*rate-determinate step*”, el cual se encontrará en el cátodo, al ser la ORR la reacción más lenta [4].

Para terminar, cabe mencionar que la estructura del carbón poroso tiene importantes efectos en la actividad de ORR; por lo que, habrá que tenerlo en cuenta a la hora de la elección del material [8].

VII. Espesores

El espesor de cada capa es uno de los parámetros más importantes, ya que, es uno de los que más modifica la curva de polarización, es decir, afecta en gran medida al rendimiento, la durabilidad y las propiedades de los materiales.

En nuestro modelo de Matlab solo se diferencian 5 capas de un total de 7: las dos difusivas, las dos catalíticas y la capa PEM; es por eso por lo que solo hay 3 gráficas, una para cada capa, alterando el cátodo y ánodo al mismo tiempo, con el mismo valor. Las otras dos capas son los elementos que constituyen la GDL, y se analizarán como dos capas totalmente diferentes, aunque al final modifiquen la misma gráfica.

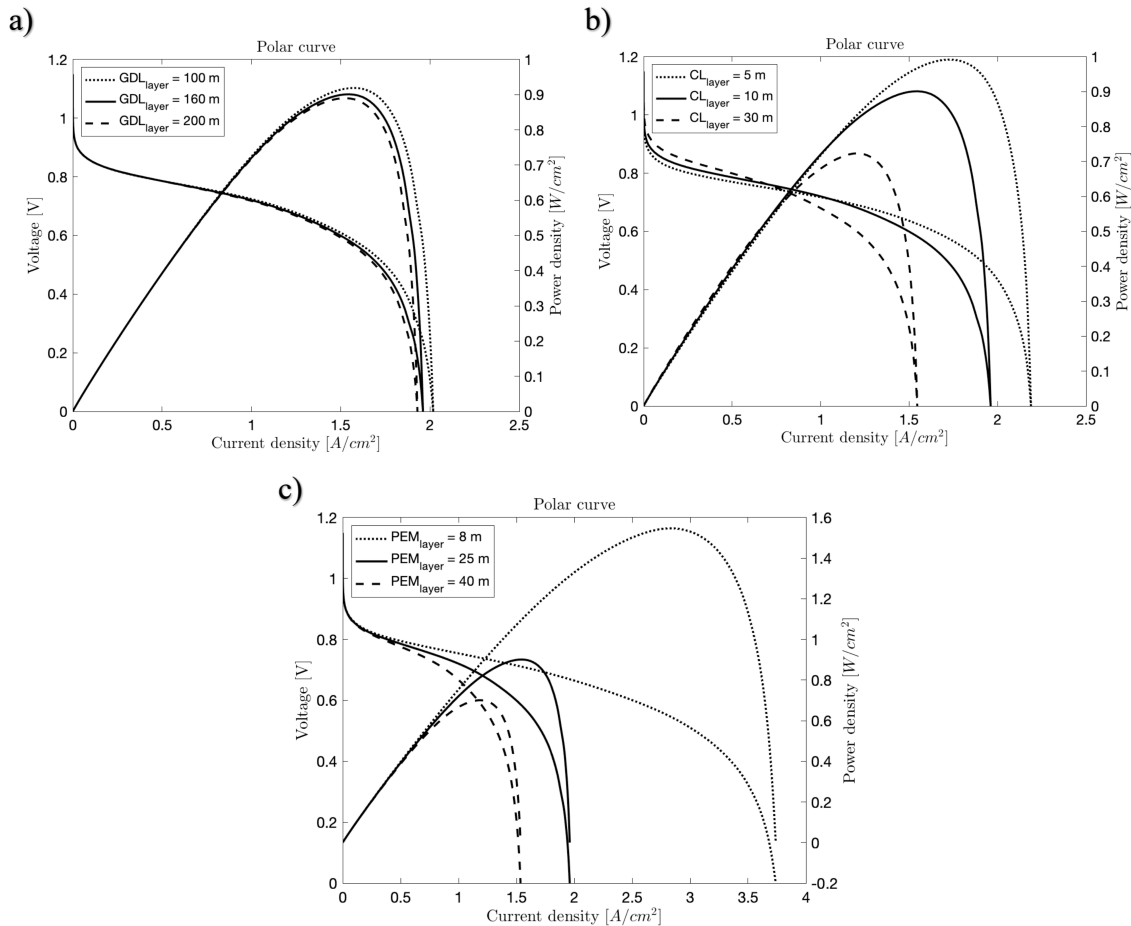


Fig. 4 - 19 Efecto del espesor de la a) GDL b) CL c) capa PEM, en la curva de polarización de una PEMFC.

En primer lugar, la capa difusiva, Fig. 4-19 a) no presenta grandes cambios, más bien, solo modifica la curva de polarización durante la caída de tensión o de densidad de potencia, es decir la zona de alta intensidad; pese a que, haya una pequeña alteración a partir de los 0.5 A/cm^2 de intensidad de corriente.

Como ya se sabe, esta capa se puede dividir en dos: la MPL y la GDS o el sustrato. Aunque es verdad que no varía en gran medida la curva de polarización, su espesor se suele modificar para mejorar la estructura del poro y con ello reducir la resistencia de contacto, con el fin de evitar que el catalizador se filtre en el sustrato y mejorar la gestión del agua; todo ello en la MPL.

En relación con lo explicado en el Capítulo 2, apartado 2.2, el agua generada en la capa difusiva debe ser evacuada inmediatamente para evitar inundaciones en la capa catalítica y para ello, se aumenta el grosor de las MPL, aliviando de esta forma la acumulación de agua líquida en la región interfacial de CL-GDL, debido a que hace que los poros sean más grandes gradualmente. Kitahara et al. concluyeron que el diámetro medio de los poros debe tener un tamaño adecuado para impedir el transporte posterior del agua desde el sustrato al electrodo.

Al mismo tiempo al modificar el espesor de la capa microporosa también se modifican las propiedades de la masa. Mientras tanto, Nitta et al. presentaron que al disminuirse las resistencias de contacto entre la capa catalítica y la microporosa, no linealmente, disminuye el espesor de la capa difusiva debido a la presión de compresión que se forma a causa de la naturaleza rugosa y agrietada de sus superficies, que al entrar en contacto forman una brecha en la interfaz [13].

La otra capa que completa la capa difusiva es la GDS, en la que se han hecho estudios sobre el contenido de politetrafluoretlenos (PTFE) en esta capa. A mayor incrustación de PTFE en la GDS, mayor será el espesor de la MPL, mejorando de esta forma el rendimiento, ya que, ofrece la ventaja de evitar la permeación de MPL en los poros del sustrato [11].

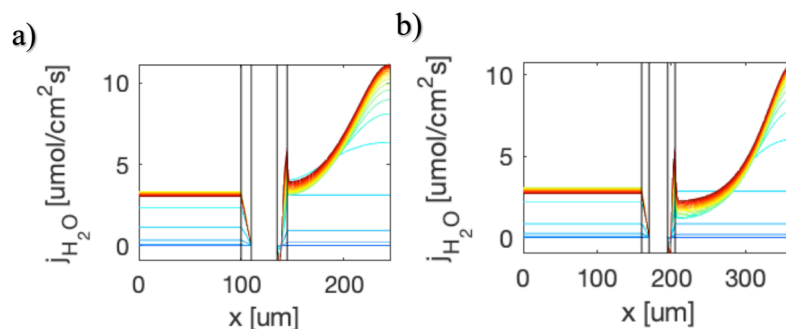


Fig. 4 - 20 Flujo del H_2O a diferentes voltajes de celda para a) $100 \mu\text{m}$ de GDL y b) el caso base.

Como se puede observar en la Fig. 4-20, se produce un cambio bastante notable en el flujo del H_2O al cambiar el valor del espesor de la capa difusiva. En este caso, al disminuirlo el flujo de agua aumentará lo que podría provocar una inundación, mientras que si aumentáramos su valor este flujo disminuiría, lo cual se contrasta con lo comentado anteriormente.

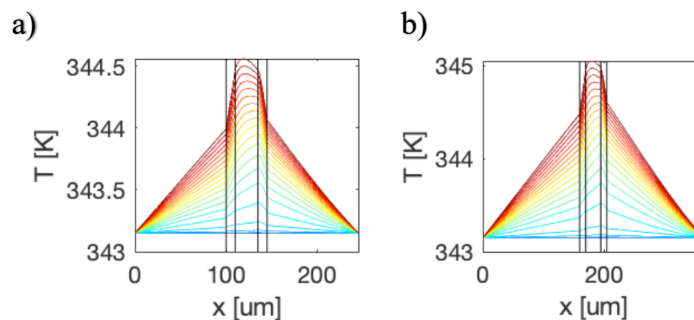


Fig. 4 - 21 Temperatura durante el proceso a diferentes voltajes de celda para a) $100 \mu\text{m}$ de GDL y b) el caso base.

En cuanto a la Fig. 4-21, se percibe una variación de $0.5 K$ desde un voltaje de $0V$ hasta el máximo de $1.15V$. Según la Ec. 47, la temperatura de la superficie se ve alterada por diversos parámetros entre ellos el espesor, y en este caso, al tratarse de la superficie de la pila se emplea el espesor de la capa difusiva. Si nos fijamos, la temperatura disminuye al disminuir el espesor por tanto el segundo término de la ecuación será negativo, pero no más grande que el primer término. No obstante, lo habitual a la hora de

medir la temperatura es usar un termopar y no la Ec. 47. Esto se debe a que mediante cálculos teóricos la medición de la temperatura muestra una variación no lineal.

$$T_{sur} = \frac{1}{\left(\frac{k_1 A}{L_{sur}} + hA\right) \cdot \sum R_t} \cdot T_0 + \left(1 - \frac{1}{\left(\frac{k_1 A}{L_{sur}}\right) \cdot \sum R_t}\right) \cdot T_\infty \quad (\text{Ec. 47})$$

También cabe destacar la modificación de la coordenada transversal, que se observa en las dos figuras anteriores, y que, igualmente, se pueden ver en cada una de las gráficas de las potencias y los flujos, tanto de la capa difusiva como de las otras dos, las cuales comentaremos más adelante.

A continuación de la capa difusiva se encuentra la capa catalítica representada en la Fig. 4-19 b), y que a diferencia de la capa anterior en esta se muestran cambios bastante significativos al cambiar su valor. Si disminuimos su espesor, disminuiríamos su voltaje y densidad de potencia en la zona de baja intensidad, mientras que, estos mismos resultados aumentarían al ir aumentando la intensidad. En consecuencia, se aumentará su intensidad final, su caída de tensión y de densidad de potencia será mucho mayor, y al tener una disminución y un aumento en la misma curva de polarización habrá un punto donde coincidirán numéricamente con los resultados del caso base. Por el contrario, si aumentamos su espesor ocurrirá exactamente lo opuesto.

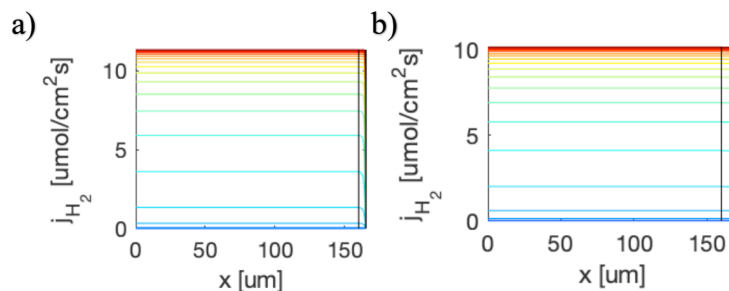


Fig. 4 - 22 Flujo del H₂ a diferentes voltajes de celda para a) 5 μm de CL y b) el caso base.

Asimismo, al disminuir su espesor se suministran más vías para la transferencia de combustible H₂ desde el lado de la capa difusiva; lo cual se puede apreciar en la Fig. 4-22, en la que observamos una disminución del flujo de H₂ en su máximo voltaje. Al mismo tiempo, el catalizador de Pt se localiza frente a la capa PEM, lo que ocasiona el aumento de límites de triple fase (TPB), y que, al llevarse a cabo la oxidación del combustible H₂ en esta zona, hace que la mejora de las TPB haga que se produzcan más electrones en el ánodo, y que, por tanto, al alcanzar el cátodo reduzcan el O₂. Como resultado, el rendimiento de la pila mejora [8].

Una de las características más destacadas de este parámetro es que, a diferencia de los espesores de las otras capas, se suele variar el valor de la capa catódica y anódica de forma diferente. Esto se debe a que, la estructura de la CCL es mucho más eficaz para mejorar la eficiencia de la célula y su durabilidad, esta última siendo muy influenciada por la degradación, no uniforme, de partículas de catalizadores a través de este espesor.

A parte, este espesor se halla en la Ec. 35, referente a la absorción y desorción del vapor de agua, que modifica, en concreto, las conservaciones del agua disuelta, vapor de agua y calor [9]. Además, al disminuir el espesor, la coordenada transversal disminuye el mismo valor en todas las gráficas de potencias y flujos.

Por último, justo en el centro de la PEMFC, se encuentra la capa de la membrana de electrodo de protones (PEM), la cual, modificando su espesor, en concreto disminuyéndolo, se puede conseguir mayores mejoras en el rendimiento, ya que, aumenta en gran medida su voltaje y densidad de potencia, aumentando a su vez la intensidad; sin acarrear ningún cambio en la zona de intensidad muy baja. Al mismo tiempo, produce una caída de tensión y de densidad de potencia mucho menos brusca.

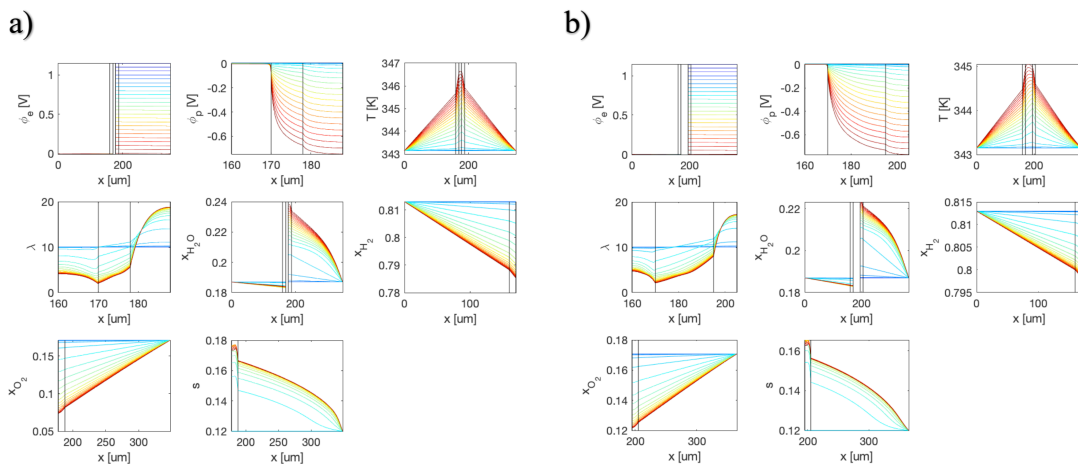


Fig. 4 - 23 Perfiles de potencia a través del plano a diferentes voltajes de celda para a) $8 \mu\text{m}$ de la capa PEM y b) el caso base.

En cuanto a los flujos y las potencias, se obtiene un aumento muy considerable, al igual que en la curva de polarización; y disminuye la coordenada transversal en aquellos elementos que funcionan durante el proceso en la capa PEM. Todo esto se puede observar en las Fig. 4-23 y Fig. 4-24.

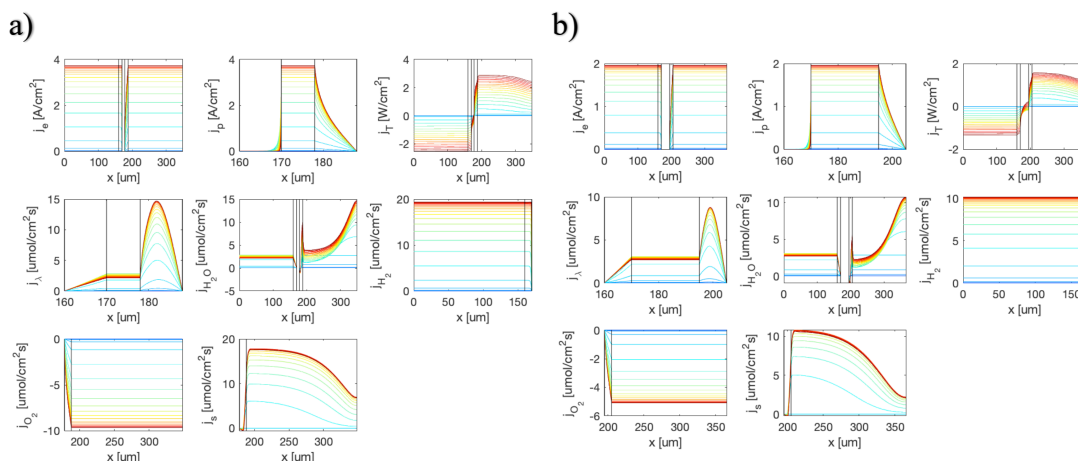


Fig. 4 - 24 Perfiles de flujo a través del plano a diferentes voltajes de celda para a) $8 \mu\text{m}$ de la capa PEM y b) el caso base.

Si nos fijamos, tanto el valor máximo como el mínimo de la temperatura y la fracción molar de O_2 , aumenta, y por supuesto, se aprecia en gran medida la disminución del espesor de la capa PEM.

Por último, cabe destacar que al aumentar la interfaz entre la capa PEM y la capa catalítica, mejora el rendimiento, especialmente en el régimen de pérdida óhmica, con otras palabras, no se pierde resistencia de la pila. Si atendemos a la Ley de Ohm, no se perderá voltaje y la intensidad no disminuirá [1].

VIII. Conductividad termal

En la Fig. 4-25 se observa el efecto de la conductividad térmica solamente en dos de las tres capas que hay en la PEMFC, esto ocurre a que en la capa de la membrana no se producen cambios; por tanto, no se ha añadido junto con el resto de las gráficas.

En este caso, el valor de la conductividad térmica de la capa difusiva se ha modificado, simplemente, para observar que cambios produce en la curva de polarización, pero, durante el funcionamiento de la pila su valor suele variar debido a los cambios de presión de compactación, la temperatura, el contenido de PTFE, diferentes tipos de tejido usados en los materiales y a la humedad [18].

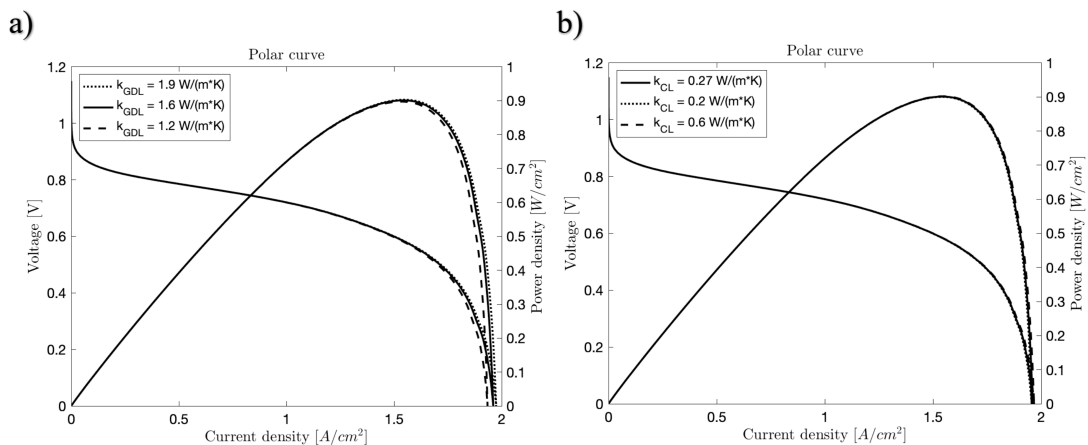


Fig. 4 – 25 Efecto de la conductividad termal de la a) GDL y b) CL, en la curva de polarización de una PEMFC.

Otro de los aspectos por el que la conductividad térmica en la capa difusiva puede variar es si esta está en el plano o si va a través del plano. En el caso de la conductividad eléctrica es mucho más alta si se encuentra en el plano, es por esto, que durante muchos años se postuló que ocurría lo mismo en la térmica. Sin embargo, Zamel et al. comprobaron experimentalmente que la conductividad térmica en el plano es entre 5 y 10 veces mayor a la conductividad a través del plano, todo dependiendo de la presión de compactación a la que se encuentre la capa [18].

A la hora de escoger los materiales también es importante fijarse en la conductividad térmica, ya que, tienen un papel imprescindible en esta, a causa de la diferencia de estructura en los sustratos en la GDL. Por ejemplo, en el caso de los

materiales compuestos, estos tendrán una mayor conductividad térmica que los materiales puros. En este trabajo, como ya se ha comentado anteriormente, para la capa difusiva se ha escogido el material Toray TGP-H-060, el cual, tiene una elevada presión a compresión y, en consecuencia, una alta conductividad térmica.

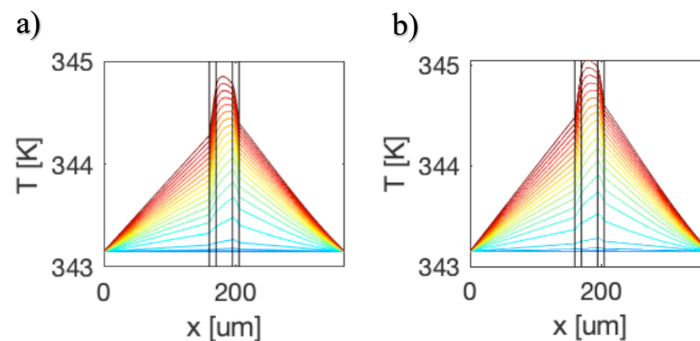


Fig. 4 - 26 Temperatura durante el proceso a diferentes voltajes de celda para a) $1.9 \text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$ de $k_{\text{térmica}}$ en la GDL y b) el caso base.

En la Fig. 4-26, se observan los cambios que se producen en la temperatura, al aumentar la conductividad térmica disminuye la temperatura máxima, pasa de 345.051°K a 344.849°K ; y hace que esta esté mucho más uniforme al ayudar a disipar el calor del MEA. Además, si este aumento de la conductividad lo unimos a un cambio de fase del agua, no solamente variaría la temperatura, sino que, este cambio sería mucho mayor en el cátodo. Cabe añadir que los resultados en la Fig. 4-25 a) muestran un aumento de la corriente de intensidad al aumentar la conductividad térmica.

Dentro de la capa difusiva se encuentra la capa microporosa, la cual al ser muy delgada podría parecer que su conductividad térmica no es muy influyente, no obstante, ocurre justo lo contrario, su efecto es muy importante en la distribución general de la temperatura en un PEMFC. En un estudio de Thomas et al. se mostró que el gradiente de temperatura contribuye al transporte de agua y al aumento de la temperatura que ayuda a mantener el agua en fase gaseosa [24].

A parte, es muy relevante el papel que tiene el agua líquida, ya que, aumenta al aumentar la conductividad térmica, humedeciendo la membrana, lo que ocasiona una mejora en la conductividad iónica, y, por ende, el rendimiento de la célula.

El agua no solamente afecta a la capa difusiva, sino que es una de las características que más influencia la capa catalítica, junto con el contenido de PTFE. La conductividad térmica de la capa catalítica es una de las menos investigadas, sin embargo, es muy importante para las aplicaciones reales de las pilas por la degradación que sufre el ionómero, los soportes de carbono y las nanopartículas de platino que están asociadas con las variaciones de temperatura en esta capa.

El agua y el contenido de PTFE tienen un efecto opuesto en la conductividad térmica de la CL, la primera aumenta al aumentar la conductividad térmica, como ocurre en la capa difusiva, mientras que la segunda produce una disminución de la conductividad

térmica. Según Khandelwal y Mench, esta diferencia sucede debido a que el agua líquida como líquido permitirá que las fibras aumenten el número de puntos de contacto deslizándose a un lado cuando se aplica presión de compactación, mientras que, el PTFE al ser almacenado en los espacios más pequeños entre las fibras y sin la presencia de la presión de compactación, disminuirá su energía superficial provocando un daño en la ruta de conducción de calor de las fibras; con otras palabras, disminuirán los puntos de contacto entre ellas [23].

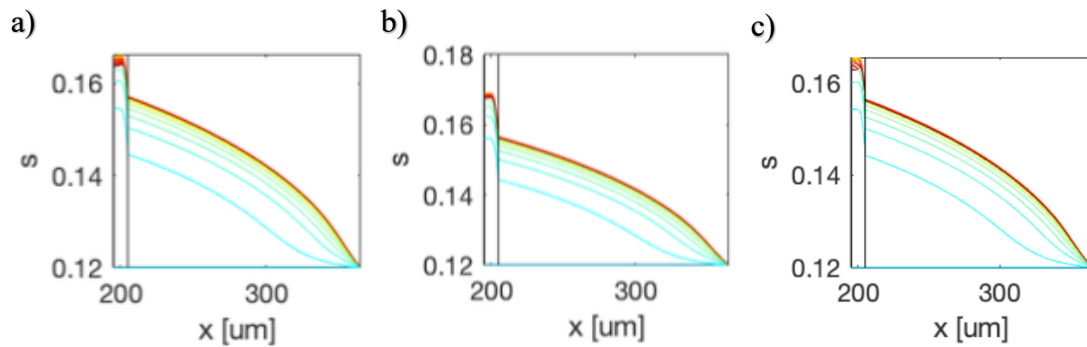


Fig. 4 - 27 Saturación del agua líquida a diferentes voltajes de celda para a) $1.9 \text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$ de $k_{\text{térmica}}$ en la GDL, b) $0.6 \text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$ de $k_{\text{térmica}}$ en la CL y c) el caso base.

Si nos fijamos, en la Fig. 4-27 vemos que la saturación de agua líquida es diferente en cada uno de los tres casos, sin embargo, es en la CL donde se observa la mayor variación de las tres; pasa de un 16.555 % en el caso base a un 16.897% al aumentar la conductividad térmica; lo cual concuerda con lo comentado anteriormente sobre la importancia del agua en este parámetro.

La temperatura máxima también disminuye al aumentar la conductividad térmica en esta capa, al igual que en la capa difusiva; pero, asimismo se observa un aumento de las temperaturas de las capas catalíticas y de las difusivas.

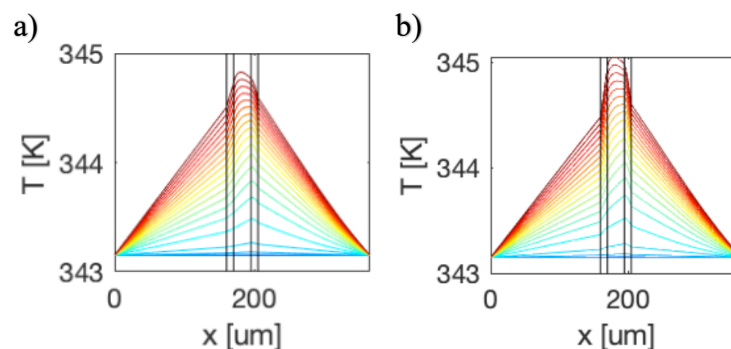


Fig. 4 - 28 Temperatura durante el proceso a diferentes voltajes de celda para a) $0.6 \text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$ de $k_{\text{térmica}}$ en la CL y b) el caso base.

Si nos fijamos en la Fig. 4-28, la diferencia de temperatura entre las 3 capas ha disminuido en gran medida, lo que hace que la capa catalítica se acerque al valor de la temperatura máxima.

Por último, cabe mencionar que al aumentar la conductividad térmica aumentará con ella el espesor de las capas de transporte poroso (PTL), sin modificar el valor de la porosidad [23].

IX. Conductividad eléctrica

La conductividad es “la capacidad del material para soportar el flujo de carga a través del material” [1], y en el caso de la conductividad eléctrica, el flujo de carga referido a la electricidad. Es una de las propiedades más importantes que hay en la PEMFC, debido a que, es el producto final, por lo cual, tiene que ser transportado fuera de la célula con la menor pérdida posible.

En este apartado, se tratará también la resistencia eléctrica, propiedad inversa a la conductividad, cuyo factor que tiene en cuenta el material es la resistividad.

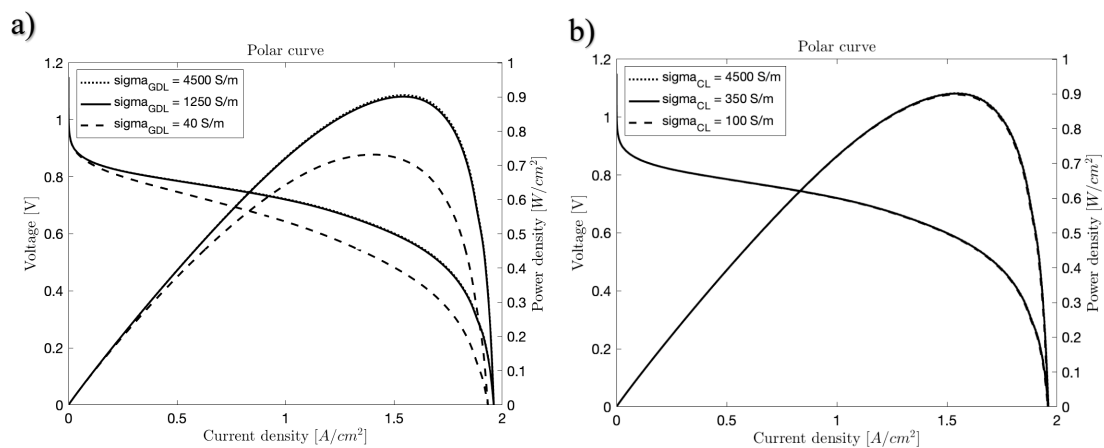


Fig. 4 - 29 Efecto de la conductividad eléctrica en la a) GDL y b) CL, en una curva de polarización de una PEMFC.

La resistencia eléctrica es uno de los factores por los cuales se producen pérdidas de tensión en la PEMFC, es por esto por lo que la hace ser más importante que la conductividad. Las pérdidas de resistencia al contacto eléctrico están influenciadas por la rugosidad de la superficie de la pila y la tipología de sus componentes; la primera causada por tratamientos en la superficie, por lo cual, se llevan a cabo estudios para predecir la resistencia eléctrica teniendo en cuenta los perfiles de la superficie. Así pues, para mejorar el rendimiento es necesario mejorar la resistencia interna [2].

En la Fig. 4-29 se muestra la gran diferencia que hay al modificar la conductividad eléctrica de la capa difusiva y de la catalítica. En la Fig. 4-29 a), se producen grandes cambios, solo si se disminuye la conductividad eléctrica, mientras que si la aumentamos aumentará muy poco el voltaje y la densidad de potencia, sin embargo, no se observará ningún cambio en la intensidad.

Los mismos pocos cambios encontramos en la Fig. 4-29 b), tanto al aumentar la conductividad eléctrica como al disminuirla. Buchi y Scherer demostraron que la conductividad eléctrica es independiente de la densidad de corriente cuando la membrana

tiene un espesor igual o menor a 120µm, lo cual atañe a la capa catalítica; pero, que al tener una membrana gruesa sí que se producirían cambios en la intensidad [2].

Al igual que todas las otras propiedades descritas en este capítulo, en este modelo, sus valores son teóricos y experimentales, por tanto, no es necesario el uso de ecuaciones para calcularlos. No obstante, sus menciones sirven para corroborar resultados obtenidos o afirmaciones hechas anteriormente. En este caso, la Ec. 48 nos reafirma que la resistencia eléctrica es la inversa de la conductividad. Además, es característica del tamaño, la forma y las propiedades del material empleado.

$$R = \frac{L_{\text{cond}}}{\sigma A_{\text{cond}}} \quad (\text{Ec. 48})$$

La conductividad térmica y eléctrica han sido relacionadas más de una vez en diversos estudios. Una de las muchas características que tienen en común la modificación de la temperatura, la cual aumenta al aumentar la resistividad, y, por consiguiente, una menor conductividad eléctrica. Este hecho se puede comprobar en la Fig.4-30, con la variación del flujo de la temperatura, la cual, pasa de tener un valor máximo de 345.051°K a 344.889°K.

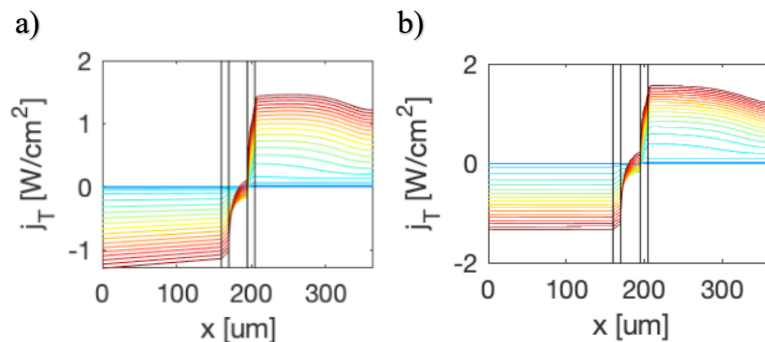


Fig. 4 - 30 Flujo de la temperatura a diferentes voltajes de celda para a) 40 S/m de σ en la GDL y b) el caso base.

Aparte del flujo de la temperatura, también se producen variaciones en los flujos de los gases, todos ellos con un aumento de sus cifras al disminuir la conductividad eléctrica. Las membranas de las pilas de combustible son capaces de almacenar agua y la conductividad eléctrica depende de ese contenido en agua que poseen las capas. Por este motivo, al originar un cambio en el flujo de H₂O, se ocasionan también cambios en los otros dos gases, debido a su dependencia del primero.

Por supuesto, se observa igualmente una alteración en el flujo de electrónico (Fig. 4-31) con una disminución de su valor máximo, de 0.04 A/cm², aproximadamente.

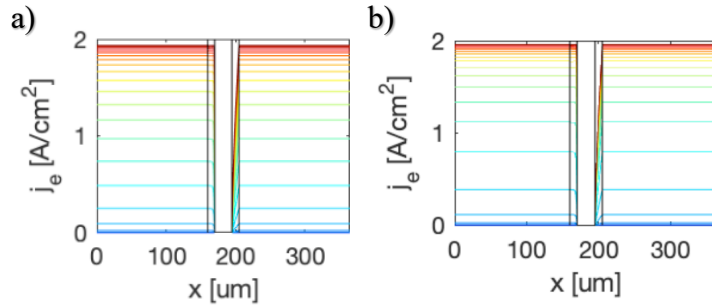


Fig. 4 - 31 Flujo electrónico a diferentes voltajes de celda para a) 40 S/m de σ en la GDL y b) el caso base.

En cuanto a las potencias, cabe destacar el potencial de la fase del electrodo y del electrolito. Los electrodos y las placas bipolares hacen que aumente la conductividad eléctrica, por tanto, al disminuir esta se crea esa variación en la gráfica.

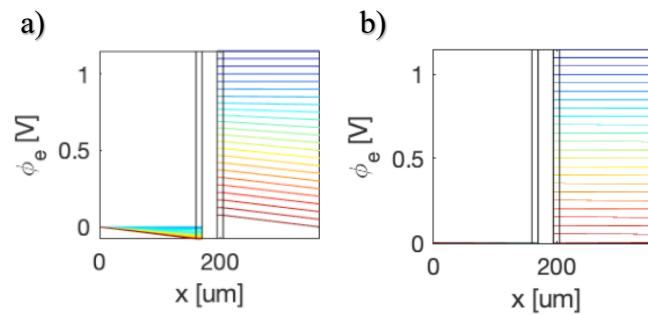


Fig. 4 - 32 Potencial de la fase del electrodo a diferentes voltajes de celda para a) 40 S/m de σ en la GDL y b) el caso base.

Además, en la Fig. 4-32, se observa como pasamos de un potencial en el ánodo nulo a uno donde hay valores por debajo del 0, en el mismo momento que el potencial del cátodo es nulo. Y en el potencial de la fase del electrolito ocurre lo mismo (Fig. 4-33), pasando de un valor nulo en la capa a una disminución del 0.07 V. Por tanto, en los dos casos, se originan pérdidas resistivas o también denominadas óhmicas.

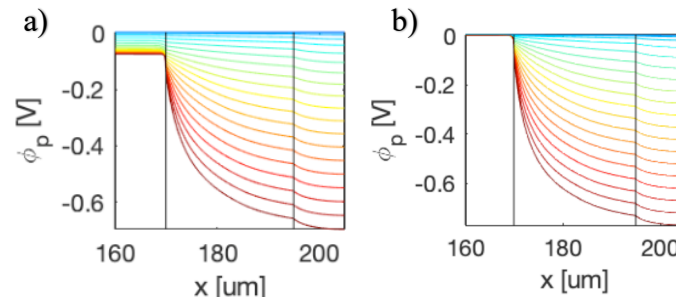


Fig. 4 - 33 Potencial de la fase del electrolito a diferentes voltajes de celda para a) 40 S/m de σ en la GDL y b) el caso base.

Otras características a tener en cuenta son la relación que posee con la Ley de Ohm, con el transporte masivo y con el contenido de PTFE. La conductividad en la capa difusiva puede transformarse en un factor limitante por su geometría o composición, y la Ley de Ohm toma esto en consideración:

$$i_1 = -\sigma_0 \epsilon_1^{1.5} \nabla \Phi_1 \quad (\text{Ec. 49})$$

El transporte masivo es necesario para el funcionamiento de la pila de combustible, lo cual lo hace igual de importante que la conductividad eléctrica. A causa de esto, es primordial encontrar el equilibrio entre ambos para poder elegir una buena presión de compactación, la cual, al aumentar, aumenta la conductividad eléctrica, pero inhibe el transporte masivo. Por último, el contenido de PTFE causa una disminución de la conductividad eléctrica en la MPL [18].

X. Porosidad

La porosidad es la propiedad que representa los espacios vacíos que hay en la estructura del material. La encontramos en la capa difusiva y en la catalítica, aunque en los medios de difusión tiene mayor importancia, ya que, por definición son porosos.

Este hecho se puede observar en la Fig. 4-34, en la que se encuentra una pequeña modificación de la curva al cambiar el valor de la capa difusiva mientras que, en la catalítica se mantiene igual.

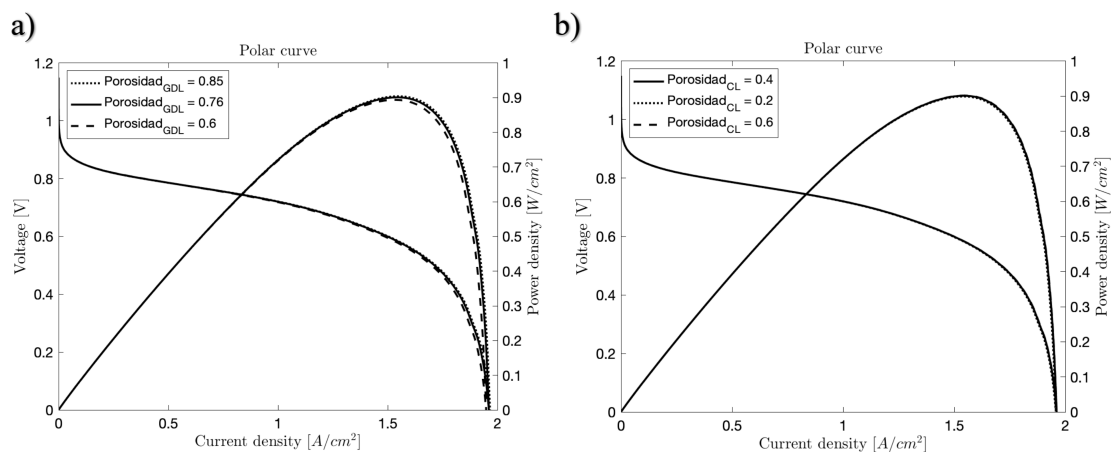


Fig. 4 - 34 Efecto de la porosidad en la a) GDL y b) CL, en una curva de polarización de una PEMFC.

La porosidad suele ir unida a la tortuosidad, debido a que, representan los factores de corrección del poro, por eso suelen aparecer juntas en muchas de las ecuaciones, modificando casi los mismos parámetros. Unas de las ecuaciones es las difusividades de gas de Fickian (Ec. 23), la cual hace referencia a los flujos de los tres gases que aparecen en la pila. Por tanto, al aumentar la porosidad aumentará, con ellos, el coeficiente de difusión, y, por tanto, el flujo de los gases [20].

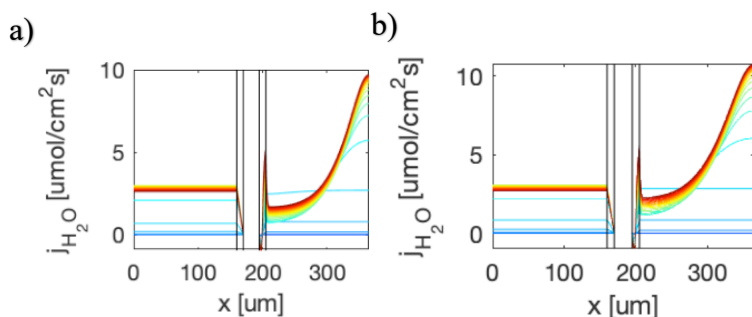


Fig. 4 - 35 Flujo del H₂O a diferentes voltajes de celda para a) 0.6 ϵ de la GDL y b) el caso base.

El flujo en el que se aprecia con más claridad su cambio es el de H₂O, como demuestra la Fig. 4-35, disminuyéndolo en su capa difusiva, sobre todo en la zona del cátodo. Esto lo demostró Popov con su experimento de permeación del H₂O ex-situ, el cual indicó que la resistencia al flujo de agua de la capa difusiva aumenta, al aumentar el contenido de PTFE en la capa microporosa, que se debe a la disminución de la porosidad junto con el aumento de la hidrofobicidad [28]. En cuanto a los otros dos flujos también tenemos esa disminución, pero es menor que la del agua.

En la Fig. 4-34 a), al aumentar la porosidad aumenta, aunque en muy poca medida, la intensidad de corriente, el voltaje y la densidad de potencia; con otras palabras, aumenta el rendimiento. Esto fue probado experimentalmente por otros científicos como Yan et al. y Prasanna et al [2]. Los primeros desarrollaron un modelo bidimensional de transporte de masas para investigar la sección transversal del canal de flujo de gas ánodo y los efectos de la porosidad, y los segundos estudiaron papeles de carbono con diferentes contenidos de PTFE; llegando en los dos casos al mismo resultado que se ha obtenido con esta investigación. El papel de carbono es el material usado en nuestro modelo, debido entre otros a su alta porosidad.

Sin embargo, al aumentar los valores hacia el final de la curva de polarización trae consigo mayores pérdidas, por tanto, para mejorarlas haría falta aumentar la porosidad. Además, debido al hecho que la mayor parte de la caída de presión se produce en los medios porosos, es decir, en la capa difusiva, hace que la uniformidad del flujo entre los canales individuales y entre las células dependa de la porosidad, así como, de otros parámetros en concreto, de su espesor.

La porosidad tiene otras características las cuales mencionaremos a continuación pero que, experimentalmente no podemos comprobar debido a la limitada capacidad del modelo. Entre ellas se encuentra el espesor de la capa difusiva y la permeabilidad, parámetros que ya tienen unos valores predeterminados antes de obtener los resultados. En los dos casos su valor disminuye al disminuir la porosidad.

Asimismo, al reducir la porosidad en la capa difusiva disminuyen las distancias entre las fibras de carbono conductoras y mejora el contacto entre ellas, produciendo que las conductividades tengan una dependencia lineal del espesor comprimido GDL.

XI. Tortuosidad

La tortuosidad es una propiedad de los materiales que tiene como finalidad regir el transporte de reactivos y productos en la PEMFC, es decir, es una característica del comportamiento del flujo de fluido a través de las capas. En nuestro modelo de Matlab la encontramos en la capa difusiva y catalítica, sin embargo, no posee variación alguna en la capa catalítica, por tanto, solo nos fijaremos en la capa difusiva.

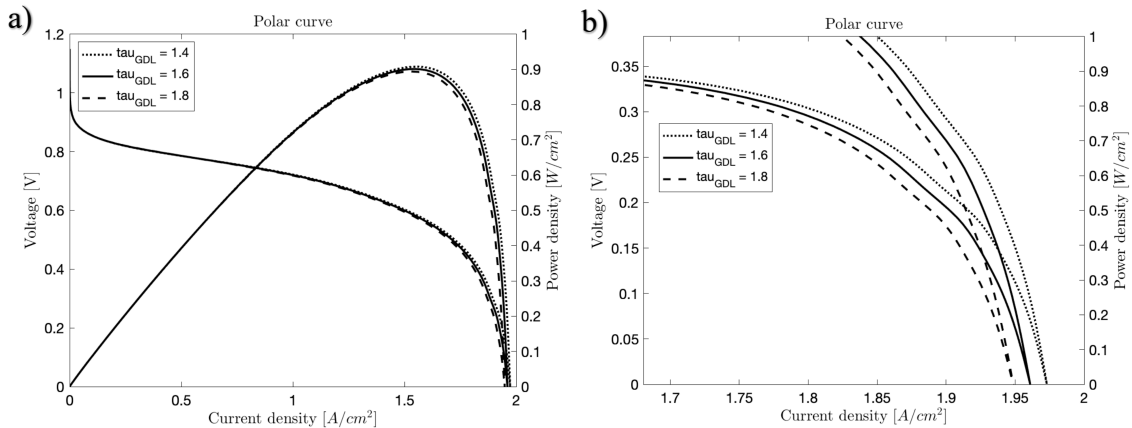


Fig. 4 - 36 Efecto de tortuosidad del poro de la GDL a) sin ampliar b) con zona ampliada, en una curva de polarización de una PEMFC.

La porosidad se puede dividir en 3 tipos: hidráulica, iónica y eléctrica. La tortuosidad hidráulica o también denominada tortuosidad gaseosa, describe la difusión de especies, como lo indica Zhang y Jia [21]. Con otras palabras, tiene un papel importante en el análisis microestructural cuando se comprime la GDL. La compresión de esta capa afecta en gran medida a este parámetro, ya que, al comprimir la GDL aumenta la tortuosidad hidráulica, lo que provoca que aumente la resistencia al transporte en fase gaseosa; ocurriendo de forma opuesta a la porosidad y a la permeabilidad.

Esta relación entre la tortuosidad y la porosidad ya se mencionó en el apartado anterior, y, por consiguiente, se sabe que tanto una como otra afectan a la ecuación de las difusividades (Ec. 23); aunque en este caso tendrá el efecto opuesto a la porosidad. Esto se puede apreciar en la Fig. 4-37, en la que al igual que en la porosidad, se aprecia con mayor claridad el cambio en el flujo de agua, aun cuando este produce en los tres gases.

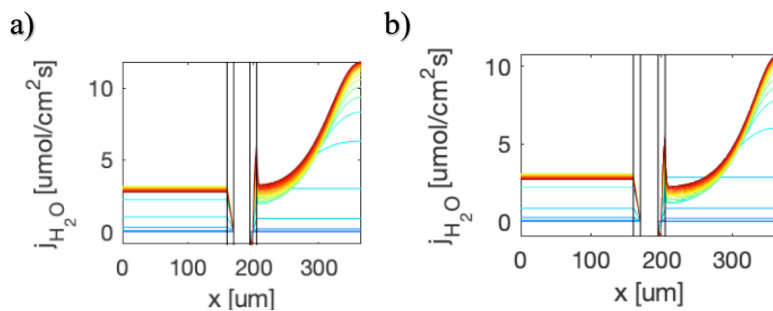


Fig. 4 - 37 Flujo del H_2O a diferentes voltajes de celda para a) 1.4 τ de la GDL y b) el caso base.

Por otra parte, al disminuir su valor, mejora el rendimiento de la pila, sobre todo a altas densidades de corriente, porque facilita mayores tasas de transferencia de masa de O₂ a la capa catalítica, y la cual es modificada con la compresión. Comprobado experimentalmente, en la Fig. 4-36, donde se puede observar ese aumento del voltaje y de la densidad de potencia cuanto mayor es la intensidad.

Uno de los grandes inconvenientes de la tortuosidad es lo poco investigada que está, lo cual hace que sea más complicado generar valores numéricos comprobados científicamente. Esto mismo le ocurrió a Uchida et al. y a Xie et al., en sus estudios lograron que fueran muy intuitivos y que se comprendiera la microestructura de los electrodos, pero no lograron obtener valores numéricos clave [22].

En este modelo, la porosidad sirve para obtener una serie de resultados y no se explica cómo se obtuvo, simplemente se añadió un valor que se ha usado más veces en otros estudios. Sin embargo, esta se puede calcular de varias formas, una de ellas es la ecuación de Tomadakis y Sotirchos (Ec. 50):

$$\tau = \left(\frac{1 - \varepsilon_p}{\varepsilon - \varepsilon_p} \right)^\alpha \quad (\text{Ec. 50})$$

donde ε es la porosidad de la capa y la ε_p es la porosidad umbral de percolación [20].

Paralelamente a la compresión en la capa, se encuentra el espesor de la GDL y la relación Ionómero-Carbono (I/C) como propiedades que van ligadas a la porosidad. El primero tiene diversos estudios que verifican que al aumentar la porosidad disminuye el espesor, o viceversa, como el método de Lattice Boltzmann. Además, si se aumenta el espesor la tortuosidad de la región central del papel de carbono Toray se vuelve más heterogénea. El segundo tiene un efecto contrario al anterior, al aumentar la tortuosidad aumenta la relación I/C.

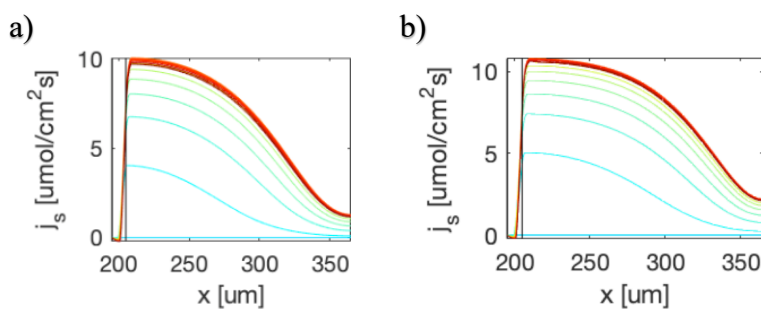


Fig. 4 - 38 Flujo del agua líquida a diferentes voltajes de celda para a) el 1.4 τ de la GDL y b) el caso base.

Para terminar, como indica su definición, la tortuosidad es una característica de flujo de los fluidos a través de la capa; y si nos fijamos en la gráfica del flujo de agua líquida (Fig 4-38) también se observa esa modificación, al igual que al flujo de los gases. Vemos que al disminuir la porosidad disminuye progresivamente el flujo de agua líquida.

XII. Permeabilidad

La permeabilidad se puede definir como “la medida de la capacidad del material para transmitir un solo fluido en ciertas condiciones” [1], es decir, es una propiedad física que permite que el fluido, ya sea gas o líquido, fluya a través del material. Por tanto, este parámetro afectará en gran medida a los flujos, a unos más que otros; y como en la Fig. 1-10 no se muestra la más mínima variación, nos centraremos en ellos.

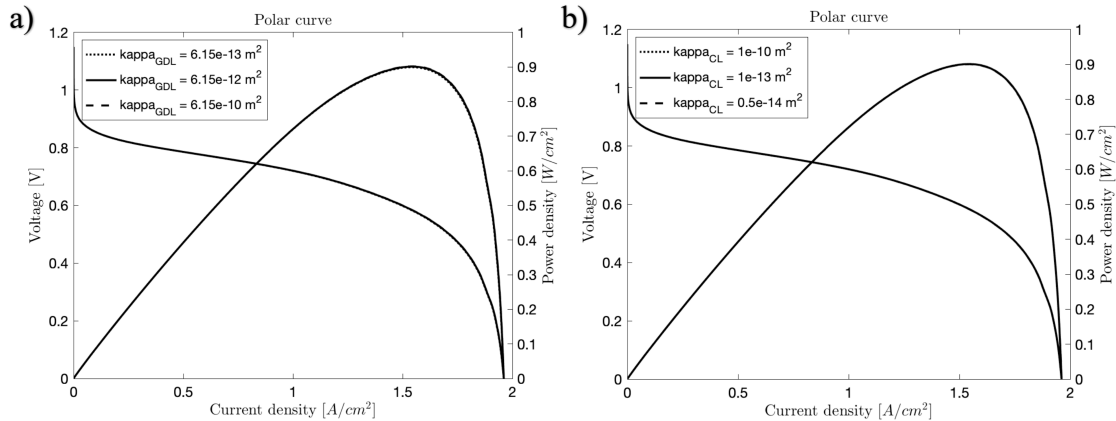


Fig. 4 - 39 Efecto de la permeabilidad de la a) GDL y b) CL, en la curva de polarización de una PEMFC.

Uno de los flujos que se ve más afectado, por la variación de la permeabilidad, es el del H₂O. Según un estudio que realizaron Kitahara et al., el diámetro de los poros tiene que ser lo suficientemente pequeño para impedir que transporte posterior de H₂O desde el sustrato al electrodo, pero no tan pequeño que disminuya la permeabilidad del gas, y con ello, el transporte de vapor de agua [18]. Además, esta propiedad no solo afectará al flujo de agua sino también a todo lo relacionado con ella.

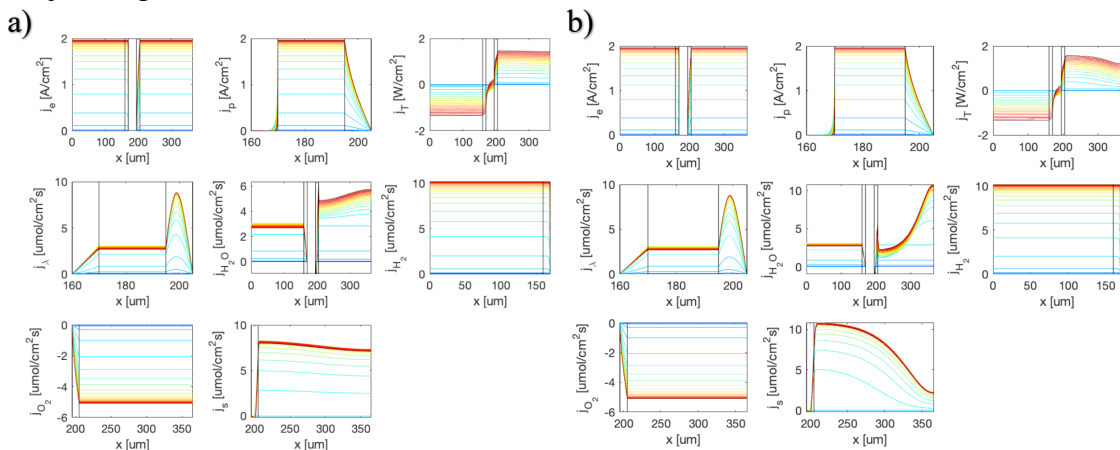


Fig. 4 - 40 Perfiles de flujos a través del plano a diferentes voltajes de celda para a) $6.15 \times 10^{-10} \text{ m}^2$ de κ en la GDL y b) el caso base.

Si nos fijamos en la Fig. 4-40 y 4-41, más concretamente en el flujo de H₂O y el agua líquida, la fracción molar de H₂O y la saturación de agua líquida, comprobaremos que al aumentar la permeabilidad las gráficas tienden a linealizarse. En todos ellos el máximo disminuye, pero solamente en la zona catódica, ya que, es la única zona donde se produce el transporte de agua líquida.

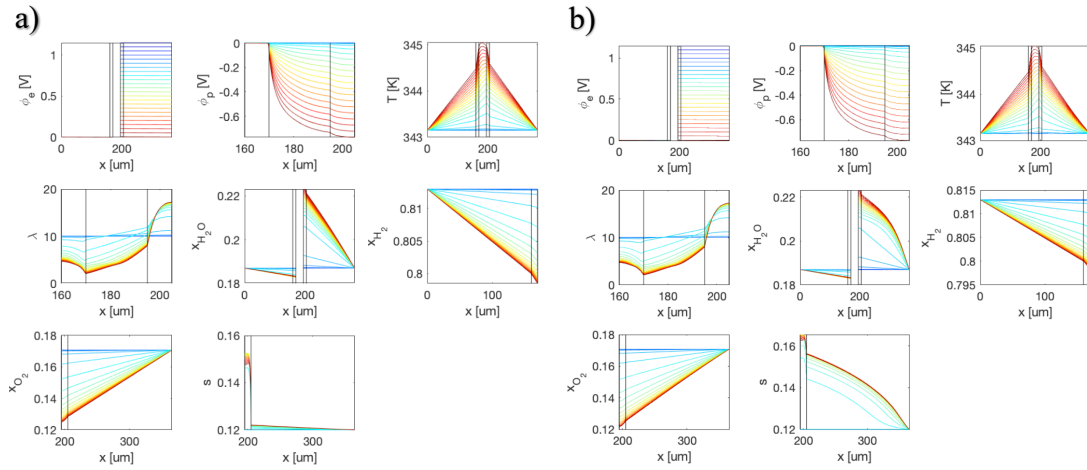


Fig. 4 - 41 Perfiles de potencia a través del plano a diferentes voltajes de celda para a) $6.15 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2$ de kappa en la GDL y b) el caso base.

De igual modo, el flujo de la temperatura en el cátodo se ve afectada por este aumento, provocando los mismos efectos que ocurre con el agua.

En este caso, al igual que la tortuosidad, se puede obtener de manera numérica, mediante ecuaciones, la permeabilidad, aunque en nuestro modelo se usen los valores teóricos. Para ello se encuentran 3 ecuaciones que se pueden usar: la ecuación de Hao y Cheng, la ecuación de Doormall y Pharoah, y el modelo de Tomadakis y Sotirchos. La primera depende de la porosidad solamente, la segunda depende de la porosidad y del radio de la fibra, y la última, depende de los otros dos parámetros, ya mencionados, y de la dirección del flujo [21]. Por consiguiente, el modelo de Tomadakis y Sotirchos al ser mucho más complejo que el resto, suele ser la más usada:

$$K = \frac{\varepsilon}{8(\ln \varepsilon)^2} \frac{(\varepsilon - \varepsilon_p)^{(\alpha+2)} r_f^2}{(1 - \varepsilon_p)^\alpha [(\alpha + 1)\varepsilon - \varepsilon_p]^2} \quad (\text{Ec. 51})$$

donde r_f es el radio de las fibras de carbono y K es la permeabilidad. No obstante, los resultados que proporciona son más pequeños que los teóricos. Asimismo, encontramos la permeabilidad en la Ley de Darcy, como una constante de proporcionalidad, afectando a la concentración y presión del aire reactivo y el agua del producto en la capa difusiva [1]:

$$Q = -KA \frac{\Delta H}{\Delta \ell} \quad (\text{Ec. 52})$$

Por otra parte, la permeabilidad suele ser comentada junto con la porosidad y la tortuosidad; la primera debido a sus parecidos resultados, y la segunda por tener efectos opuestos. Una característica muy comentada es la compresión de la capa difusiva, la cual al producirse disminuye tanto la permeabilidad como la porosidad, mientras que aumenta la tortuosidad.

Al igual que la porosidad, tiene relación con la resistencia de contacto, ya que, los dos son mayores en la capa difusiva que en otras capas, debido a que, al ser una capa porosa, se reduce el volumen de poros y con ello la permeabilidad; y que parte de la GDL bloquea los canales de flujo que están en la placa bipolar, creando de esta forma, menos permeabilidad a medida que aumenta la compresión.

Para terminar, el material escogido también es un buen aliciente para su modificación. Al usar papel de fibra de carbono con un reducido espesor, si disminuimos la permeabilidad mejora el rendimiento, pero, disminuye la conductividad eléctrica. No obstante, este material suele ser el más usado porque proporciona una alta permeabilidad, entre otras características.

Y en cuanto a la capa catalítica, no se ve ninguna variación ni en la curva de polarización ni en ninguna de las gráficas de los flujos y potencias. Esto se debe al hecho de que, es una capa donde es preferible que no tenga mucha agua, ya que tiende a inundarse y eso crea bastantes problemas en la PEMFC.

Capítulo 5. Calibración del modelo

En este apartado se visualizarán los resultados obtenidos, principalmente mediante gráficas; en las que, se comparan con un estudio realizado por M. Fournier et al. y con los resultados del caso base, basados también en una investigación, en este caso de R. Vetter et al. Esta última, emplea un modelo de Matlab con algunas limitaciones que hay que tener en cuenta. Entre todas ellas, la más destacada es la inanición del oxígeno. Esta condición es muy importante, ya que, uno de los principales objetivos de este trabajo, es mostrar y explicar el efecto que se crea sobre la curva de polarización la modificación de la concentración de oxígeno.

5.1 Resultados

Tanto la inanición del oxígeno como la del hidrógeno, es “una condición, en la que un suministro de reactivo en la entrada es capaz de soportar la corriente de carga, pero su concentración en algunas zonas está cerca de cero”. En otras palabras, el porcentaje de O₂ que se añade a la pila de combustible será suficiente para que esta funcione correctamente, pero, a medida que este disminuya, llegará un punto que faltará O₂ provocando una aceleración de la degradación de MEA y de la disolución de Pt en el cátodo. Según diversos estudios, cuanto menor sea la concentración de oxígeno antes empezará a faltar [30].

Es importante tener en cuenta los efectos que produce en el funcionamiento de la pila a la hora de entender su desempeño en la realidad. Sin embargo, en este modelo la concentración de oxígeno será lineal durante toda la actividad, es decir, el porcentaje que se elija en su entrada será siempre el mismo, sin pérdida alguna, hasta que súbitamente baje hasta cero, produciéndose una caída de tensión y de densidad de potencia abrupta.

En la Tabla 5-1 se encuentran los valores finales con los que se han obtenido todos los resultados. Al compararla con la Tabla 4-1 se pueden observar aquellos parámetros que tienen un valor distinto al original.

Condiciones	Valor	Unidades
Constantes		
Masa molar del agua	18 e-3	$\frac{Kg}{mol}$
Zero grados Celsius	273.15	K
Constante universal del gas	8.31446	$\frac{J * mol}{K}$
Constante de Faraday	96485.333	$\frac{C}{mol}$
Presión de referencia	101325	Pa
Temperatura de referencia	72	°C
Condiciones de funcionamiento		

Presión total en el canal de gas del ánodo/cátodo	343000	Pa
Humedad relativa en el canal de gas del ánodo	0.95	-
Humedad relativa en el canal de gas del cátodo	0.90	-
Saturación del agua líquida en la interfaz de la GDL/GC	0.12	-
Temperatura de la placa bipolar ánodo y canal de gas	72	°C
Temperatura de la placa bipolar cátodo y canal de gas	72	°C
Fracción molar del hidrógeno en el gas de combustible seco	1	-
Fracción molar del oxígeno en el gas de oxidante seco	0.21/ 0.40/ 0.60/ 0.80/ 1	-
Parámetros electroquímicos		
Factor de simetría HOR	0.5	-
Factor de simetría	0.5	-
Parámetros del material		
Espesor de la AGDL	160e-6	m
Espesor de la CGDL	160e-6	m
Espesor de la ACL	4e-6	m
Espesor de la CCL	8e-6	m
Espesor de la capa PEM	10e-6	m
Conductividad térmica de la GDL	1.6	$\frac{W}{m * K}$
Conductividad térmica de la CL	0.27	$\frac{W}{m * K}$
Conductividad térmica de la PEM	0.3	$\frac{W}{m * K}$
Conductividad eléctrica de la GDL	1250	S/m
Conductividad eléctrica de la CL	350	S/m
Porosidad de la GDL	0.76	-
Porosidad de la CL	0.4	-
Permeabilidad absoluta de la GDL	6.15e-12	m ²
Permeabilidad absoluta de la CL	1e-13	m ²
Tortuosidad del poro en la GDL	1.6	-

Tortuosidad del poro en la CL	1.6	-
-------------------------------	-----	---

Tabla 5 - 1 Condiciones finales en el MATLAB.

Asimismo, se observa que los valores modificados no son tantos como cabría esperar, pero provocan un gran impacto en la curva de polarización, sobre todo los espesores de las capas. Estos cambios se aprecian en la Fig. 5-1, donde en varias ocasiones se obtienen los mismos resultados que en el estudio de M. Fournier, es decir, las dos curvas llegan a cruzarse y ser la misma. Del mismo modo, estas similitudes se encuentran en la zona de media intensidad, que es la de máximo funcionamiento de la pila y por tanto de las más importantes. No obstante, a medida que disminuye la densidad de corriente, nuestros resultados sufren esa caída de tensión y de densidad de potencia, mencionada anteriormente. En el estudio de M. Fournier, esta caída no la tienen en cuenta, por eso no se puede visualizar en la gráfica. Por otra parte, aunque en la curva de polarización de la densidad de potencia sí que coinciden los valores en la zona de baja intensidad, en la curva del voltaje se aprecia una gran diferencia, pese a que, se ha conseguido mejorar su voltaje, aumentándolo. Otra mejora que se percibe es un aumento bastante considerable de la densidad de corriente, doblando su valor, el cual provoca, una caída menos abrupta. Estos cambios se aprecian en gran medida al compararlos con el caso base.

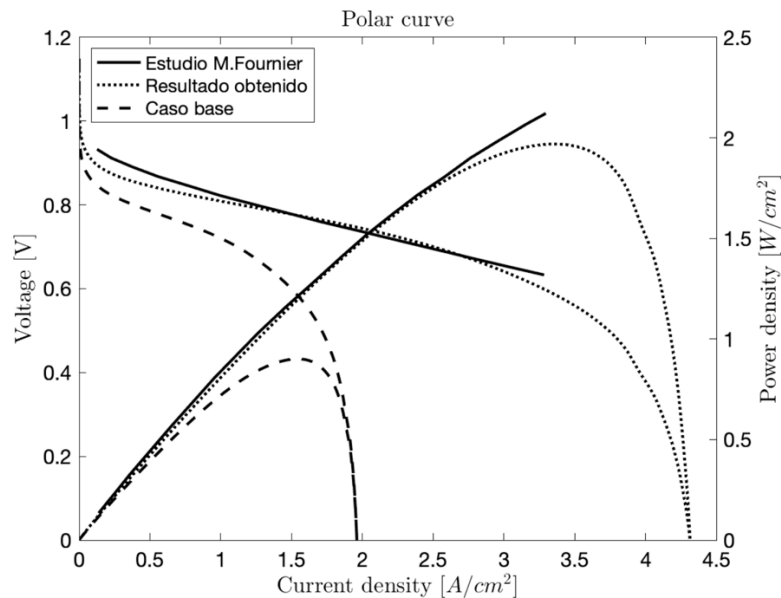


Fig. 5 - 1 Comparación de los diferentes casos al 21% de O₂ en la curva de polarización de una PEMFC.

En el caso de la fracción molar de O₂ es necesario comparar la Fig. 5-1 con el resto de las gráficas a continuación, para entender el efecto que produce en la curva de polarización.

5.3 Efecto de la concentración de oxígeno

Como se comentó anteriormente en el estudio paramétrico a medida que se aumenta la fracción molar del O_2 aumenta la densidad de potencia y el voltaje en la región de densidad de corriente intermedia. Estas modificaciones, en la curva de polarización, se observan en las Fig. 5-2 produciendo una diferencia cada vez más notable con el estudio de M. Fournier. Sin embargo, si nos fijamos en la zona de baja intensidad, a medida que aumentamos la concentración de O_2 aumenta el voltaje y, por tanto, al alcanzar el 100% nuestros resultados serán idénticos a los de M. Fournier.

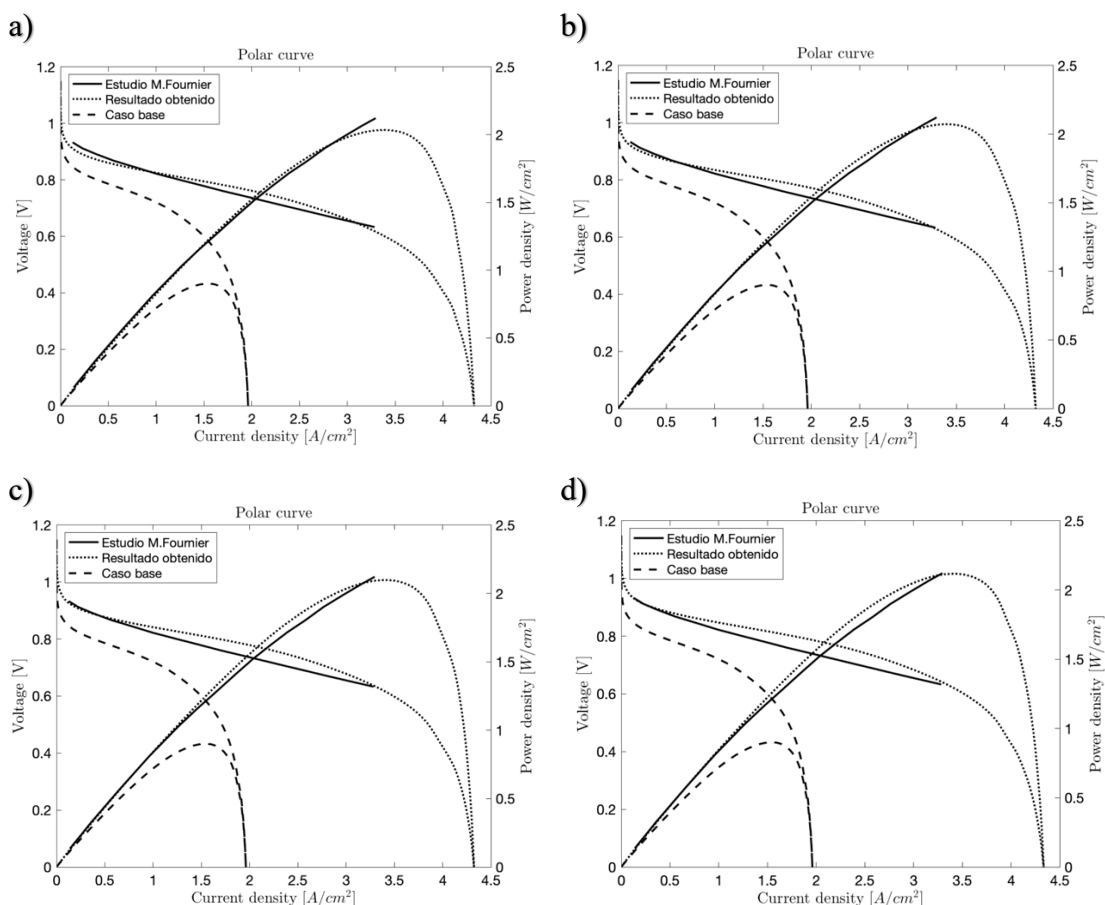


Fig. 5 – 2 Comparación del resultado al a) 40%, b) 60%, c) 80% y d) 100% de O_2 con el resto de casos, de una PEMFC.

Cabe señalar que, en la curva de polarización, la densidad de potencia obtenida siempre coincide con el estudio de M. Fournier en la zona de baja intensidad. No obstante, al igual que con la curva del voltaje, a medida que aumenta la concentración se distancian cada vez más una curva de la otra, hasta que en las zonas de alta y media densidad de corriente dejan de tener los mismos resultados.

Además, como se mencionó en el estudio paramétrico, a medida que aumentamos la concentración de O_2 la caída de tensión es cada vez mayor, sobre todo en densidades de corriente altas, lo cual hace que su rendimiento a altas corrientes no sea el más adecuado. Mientras que, si tomamos un valor de corriente fijo, al aumentar la concentración aumentará el voltaje y por tanto mejorará la eficiencia de la pila.

Capítulo 6. Conclusiones

Previo al análisis de los resultados, es conveniente especificar las características específicas de la pila de combustible implementada en el modelo de MATLAB. Es una pila de combustible polimérica que emplea el Nafion NR-211 para la membrana y el papel de carbón Toray TGP-H-60 para las capas difusivas, como los materiales para su fabricación. El modelo de MATLAB es bifásico macro homogéneo y, excepto las condiciones modificadas en el estudio, se emplean las condiciones típicas de funcionamiento. También es importante tener en cuenta las limitaciones del modelo, comentadas anteriormente.

A partir de los datos disponibles en otros artículos se ha elaborado una lista de todas las condiciones más relevantes, aumentando y disminuyendo sus valores iniciales. Los resultados obtenidos son de gran ayuda para la obtención de las gráficas finales, además ayuda a comprender mejor sus efectos en la curva de polarización. Entre los que más destacan se encuentran el espesor, las temperaturas, las presiones, la conductividad térmica de la GDL y el factor de simetría ORR. Los espesores como la temperatura de referencia disminuyen el voltaje, la densidad de potencia y la intensidad, al aumentar sus valores. Mientras que la temperatura total produce el efecto contrario. Estos tres parámetros producen cambios en prácticamente todos los flujos. Asimismo, el aumento de la temperatura total disminuye las concentraciones de H_2 y O_2 , y el aumento de la concentración de H_2O , la cual crea graves problemas en la pila de combustible si está llegando a inundarse. Por el contrario, las dos presiones disminuyen la concentración del agua, al mismo tiempo que la presión parcial aumenta la concentración de O_2 , lo que nos indica que si se aumenta la presión y la temperatura totales al mismo tiempo mejoraría el rendimiento de la pila. Por otra parte, los espesores han sido los encargados de modificar la curva de polarización a nuestro gusto, ya que son los que mayor efecto tienen sobre ella. En cuanto al factor de simetría ORR, produce un enorme aumento en los tres parámetros de la curva de polarización al ser aumentado. Sin embargo, al producir un cambio tan grande no se ha empleado en las gráficas finales.

Una vez realizado el estudio paramétrico, se modifican aquellas condiciones que mejor conviene para los resultados que se requieren en el estudio. Como se observa en la Fig. 5-1, los resultados obtenidos son muy parecidos al estudio de M. Fournier, y para ello se ha aumentado la humedad relativa del ánodo en un 5% y la presión total en un 128%; y se ha disminuido los espesores de las capas catalíticas y la membrana, y las dos temperaturas hasta $8^\circ C$. El espesor de la membrana juega un papel muy importante a la hora de rebajar el voltaje y la densidad de potencia en la región de media intensidad, reproduciendo, de esta manera, una curva más similar a la de M. Fournier. Por último, en cuanto a las concentraciones de O_2 , al aumentarla, aumenta el voltaje y la densidad de potencia, produciendo una mayor caída de tensión y de potencia, lo cual disminuye su rendimiento. Por tanto, visualizando las Fig. 5-2 el mejor aumento de eficiencia se

encuentra entre el 21% y el 40%; además, esto lo hace más asequible a la hora de alimentar la pila con estas concentraciones.

Por último, cabe mencionar que es necesario seguir investigando sobre este tema y, encontrar soluciones más baratas y con mejor eficiencia para que en un futuro puedan ser empleadas para cualquier tipo de automóviles.

Bibliografía

1. Collen Spiegel. PEM Fuel Cell Modeling and Simulation Using MATLAB; 2008.
2. Frano Barbir. PEM Fuel Cells THEORY AND PRACTICE; 2013.
3. Sukkee Um, C.-Y. Wang and K. S. Chenb. Computational Fluid Dynamics Modeling of Proton Exchange Membrane Fuel Cells; 2000.
4. Maria Laura Sarmiento Carnevali. Modelling and control of PEM fuel cells. Tesis doctoral. Barcelona: Universidad politécnica de Catalunya, Departament de automàtica, robòtica i visió; 2017 Junio.
5. M. Fournier, J. Hamelin, K. Agbossou, and T. K. Bose. Fuel Cell Operation with Oxygen Enrichement. Universidad de Quebec en Trois Rivières, Instituto de Búsqueda sobre el Hidrógeno; 2002.
6. Roman Vetter and Jürgen O. Schumacher. Free open reference implementation of a two-phase PEM fuel cell model. Institute of Computational Physics (IPC), Zurich University of Applied Sciences (ZHAW); 2018 Agosto.
7. Dawn M. Bernardi and Mark W. Verbrugge. A Mathematical Model of the Solid-Polymer-Electrolyte Fuel Cell. Journal of The Electrochemical Society; 1992 Septiembre. Volume 139, Issue 9, p. 2477-2491.
8. Dung Van Dao, Ganpurev Adilbish, Thanh Duc Le, In-Hwan Lee and Yeon-Tae Yu. Triple phase boundary and power density enhancement in PEMFCs of a Pt/C electrode with double catalyst layers. Royal Society of Chemistry; 2019 Mayo.
9. Zhifeng Zheng, Fan Yang, Chen Lin, Fengjuan Zhu, Shuiyun Shen, Guanghua Wei, Junliang Zhang. Design of gradient cathode catalyst layer (CCL) structure for mitigating Pt degradation in proton exchange membrane fuel cells (PEMFCs) using mathematical method. Journal of Power sources; 2019 Enero. Volume 451, 227729.
10. Jun HUANG, Zhe LI, Jianbo ZHANG. Review of characterization and modeling of polymer electrolyte fuel cell catalyst layer: The blessing and curse of ionomer. Beijing: Tsinghua University, Department of Automotive Engineering, State Key Laboratory of Automotive Safety and Energy; 2017 Junio.
11. Van Men Truong, Chih-Liang Wang, Mingkun Yang, Hsiharn Yang. Effect of tunable hydrophobic level in the gas diffusion substrate and microporous on anion exchange membrane fuel cells. Journal of Power Sources; 2018 Septiembre.
12. Ayşenur Öztürk, Ayşe Bayrakçeken Yurtcan. Investigation of Synergetic Effect of PDMS Polymer Hydrophobicity and Polystyrene-Silica Roughness in the Content of Microporous Layer on Water Management in PEM Fuel Cell. Journal Pre-proofs; 2020 Enero.

13. Ming Chen, Chen Zhao, Fengman Sun, Jiantao Fan, Hui Li, Haijiang Wang. Research progress of catalyst layer and interlayer interface structures in membrane electrode assembly (MEA) for proton exchange membrane fuel cell (PEMFC) system. *Journal Pre-proof*; 2020 Julio.
14. J. Lee, H. Liu, M.G. George, R. Banerjee, N. Ge, S. Chevalier, T. Kotaka, Y. Tabuchi, A. Bazylak. Microporous layer to carbon fibre substrate interface impact on polymer electrolyte membrane fuel cell performance. *Journal of Power Sources*; 2019 Febrero. Volume 422, p.113-121.
15. F.E. Hizir, S.O. Ural, E.C. Kumbur, M.M. Mench. Characterization of interfacial morphology in polymer electrolyte fuel cells: Micro-porous layer and catalyst layersurfaces. *Journal of Power Sources*; 2009 Noviembre. Volume 195; p. 3463-3471.
16. Tao Chen, Shihua Liu, Jiwei Zhang, Mengnan Tang. Study on the characteristics of GDL with different PTFE content and its effect on the performance of PEMFC. *International Journal of Heat and Mass Transfer*; 2018 Septiembre. Volume 128, p.1168-1174.
17. N. Alhazmi, D.B. Ingham, M.S. Ismail, K.J. Hughes, L. Ma, M. Pourkashanian. Effect of the anisotropic thermal conductivity of GDL on the performance of PEM fuel cells. *International Journal of Hydrogen Energy*; 2012 Julio. Volume 38, p. 603-611.
18. R. Bock, A. D. Shum, X. Xiao, H. Karoliussen, F. Seland, I. V. Zenyuk, and O. S. Burheim. Thermal Conductivity and Compaction of GDL-MPI Interfacial Composite Material. *Journal of The Electrochemical Society*; 2018 Mayo.
19. T. E. Springer, T. A. Zawodzinski, and S. Gottesfeld. Polymer Electrolyte fuel cell model. *Journal of The Electrochemical Society*; 1991 Agosto. Volume 138, No.8, p. 2334-2341.
20. Z. Fishman and A. Bazylak. Heterogeneous through-plane distributions of tortuosity, effective diffusivity, and permeability for PEMFC GDLs. Toronto: University of Toronto, Department of Mechanical and Industrial Engineering. *Journal of The Electrochemical Society*; 2010 Diciembre.
21. Mayken Espinoza, Martin Andersson, Jinliang Yuan and Bengt Sundén. Compress effects on porosity, gas-phase tortuosity, and gas permeability in a simulated PEM gas diffusion layer. Suiza: Lund University, Department of Energy Sciences. *International Journal of Energy Research*; 2015 Abril.
22. Z. Yu, R. N. Carter and J.Zhang. Measurements of pore size distribution, porosity, effective oxygen diffusivity and tortuosity of PEM fuel cell electrodes. China: Shanghai Jiao Tong University; USA: Electrochemical Energy Research Laboratory; 2012 Mayo.
23. Odne S. Burheim, Jon G. Pharoah, Hannah Lampert, Preben J. S. Vie and Signe Kjelstrup. *Journal of Fuel Cell Science and Technology*; 2011 Abril. Volume 8.

24. Odne S. Burheim, Huaneng Su, Hans Henrik Hauge, Sivakumar Pasupathi and Brunoo G. Pollet. Study of thermal conductivity of PEM fuel cell catalyst layers. *International Journal of Hydrogen Energy*; 2014 Mayo. Volume 39, p. 9397-9408.
25. Han-Kyu Lee, Jong-Ho Park, Do-Young Kim and Tae-Hee Lee. A study on the characteristics of the diffusion layer thickness and porosity of the PEMFC. Korea del Sur: Yonsei University, Department of Chemical Engineering. *Journal of Power Sources*; 2003 Diciembre. Volume 131, p. 200-206.
26. Mathias Gerard, Jean-Philippe Poirot-Crouvezier, Daniel Hissel, Marie-Cécile Pera. Francia, *International Journal of Hydrogen Energy*; 2010 Agosto. Volume 35, p.12295-12307.
27. Yu Kakizawa, Christopher L. Schreiber, Shogo Takamuku, PhD, Makoto Uchida, PhD, Akihiro Iiyama, PhD and Junji Inukai, PhD. Japón, *Journal of Power Sources*. 2020 Noviembre. Volume 483, 229193.
28. Sehkyu Park, Jong-Won Lee and Branko N. Popov. A review of gas diffusion layer in PEM fuel cells: Materials and designs. USA, *International Journal of Hydrogen Energy*; 2011 Diciembre. Volume 37, p.5850-5865.
29. Meilong Deng, Qinwei Zhang, Yakun Huang and Xiaosong Zhang. Integration and optimization for a PEMFC and PSA oxygen production combined system. China: Hainan University. *Energy Conversion and Management*; 2021 Marzo. Volume 236, 114062.
30. S. Shimpalee, U. Beuscher and J. W. Van Zee. Analysis of GDL flooding effects on PEMFC performance. USA, *ScienceDirect*; 2007 Abril. Volume 52, p. 6748-6754.
31. Xianguo Li, Imran Sabir. Review of bipolar plates in PEM fuel cells: Flow-field designs. Canadá: University of Waterloo. *International Journal of Hydrogen Energy*; 2004 Septiembre. Volume 30, p.359-371.
32. Fatma Gül Boyaci San and Gözde Tekin. A review of thermoplastic composites for bipolar plate applications. Turquía, *International Journal of Energy Research*; 2012 Noviembre. Volume 37, p.283-309.
33. Merlin Sebastian Triebs, George Tsatsaronis. From heat demand to heat supply: How to obtain more accurate feed-in time series for district heating systems. Alemania, *Applied Energy*; 2022 Enero. Volume 311, 118571.
34. B.O.E. – Num. 64. Ordenanza General de Seguridad e Higiene en el Trabajo.; 16 de Marzo de 1971.
35. B.O.E. – Num. 97. Real Decreto 488/1997 sobre disposiciones mínimas de seguridad y salud relativas al trabajo con equipos que incluyen pantallas de visualización.; 14 de Abril de 1997.

APÉNDICE A. Pliego de condiciones

A.1 Introducción

En este apartado se presenta el reglamento que se debe cumplir en los centros de trabajo para conseguir la seguridad de los trabajadores, recogido en la Ordenanza general de Seguridad e Higiene en el Trabajo.

Además, se muestran los mínimos requerimientos que se deben llevar a cabo en los puestos de trabajo de cada uno de los trabajadores para proporcionar su comodidad, seguridad y salud. Todos estos requisitos hacen referencia al equipo, como puede ser la pantalla o el teclado, al entorno, refiriéndose a la temperatura o el espacio, y a la mesa de trabajo; establecidos por el Real Decreto 488/1997 del 14 de abril.

A.2 Ordenanza general de Seguridad e Higiene en el Trabajo [34]

Artículo 13. Seguridad estructural

Primeramente, todos los edificios, permanentes o provisionales, serán de construcción segura y firme para evitar riesgos de desplome y los derivados de los agentes atmosféricos. Para ello, los cimientos, pisos y demás elementos de los edificios ofrecerán resistencia suficiente para sostener y suspender con seguridad las cargas para los que han sido calculados.

Asimismo, se indicará por medio de rótulos o inscripciones las cargas que los locales puedan soportar o suspender, quedando prohibido sobrecargar los pisos y plantas de los edificios.

Artículo 14. Superficie y ubicación

Todos los lugares de trabajo deberán tener 3 metros de altura desde el piso hasta el techo, 2m² de superficie y 10 m³ por cada trabajador. Sin embargo, al tratarse de una oficina la altura puede reducirse hasta 2,5 m, siempre y cuando se renueve el aire suficientemente.

Además, es importante destacar que en el cálculo de la superficie y el volumen no se tendrán en cuenta los espacios ocupados por máquinas, aparatos, instalaciones y materiales.

Artículo 15. Suelos, techos y paredes

Primero, el suelo será un conjunto homogéneo, liso y llano, de un material consistente, no resbaladizo o susceptible de serlo con el uso y de fácil limpieza.

Concerniente al techo, deberá ser capaz de resguardar a los trabajadores de las inclemencias del tiempo y, si tienen que soportar cargas deberá cumplir el artículo 13, mencionado anteriormente.

Para terminar la pared serán lisas, guarnecidas o pintadas con colores claros y capaces de ser lavadas o blanqueadas.

Artículo 24. Puertas y salidas

Los accesos, tanto de fuera como de dentro de los locales de trabajo estarán a obligados a cumplir las siguientes condiciones:

- No se permiten obstáculos que interfieran en la salida normal de los trabajadores.
- Ninguna puerta permanecerá cerrada durante el horario de trabajo.
- Las puertas en el interior de los centros reunirán las mismas condiciones
- Las puertas de acceso a las escaleras no se abrirán directamente sobre los escalones.
- Si hay riesgo de incendios, explosiones u otra situación que exija una evacuación rápida serán obligatorias, al menos, dos puertas al exterior, a cada lado del edificio.
- Las puertas que no sean de vaivén solo se abrirán hacia el exterior.

Por otro lado, sólo las puertas exteriores tendrán que cumplir tener 1,20 m de ancho cuando haya 50 trabajadores, y sumarle 0,50 m por cada 50 trabajadores más que haya. Además, la distancia entre ellas no superará los 45 m.

Artículo 25. Iluminación – Disposición general

Todos los lugares de trabajo tendrán iluminación natural, artificial o mixta, pero siempre que sea posible se empleará la iluminación natural. Si se emplearán dos intensidades de luz distintas sería necesario graduarlas.

Asimismo, se intensificará la iluminación de máquinas peligrosas, en lugares de tránsito con riesgo a caídas, escaleras y salidas de emergencia.

Artículo 30. Ventilación, temperatura y humedad

En primer lugar, la ventilación en los lugares de trabajo, ya sea por medios naturales o artificiales, tendrá que mantener unas condiciones atmosféricas adecuadas,

evitando el aire viciado, exceso de calor y frío, humedad o sequía y los olores desagradables. Además, también tendrá que mantener el suministro de aire fresco y limpio por hora y trabajador, al menos, de 30 a 50 m³, a excepción que se efectúe una renovación total del aire varias veces por hora, entre 6 y 10 veces dependiendo del tipo de trabajo realizado. En este caso al tratarse de una oficina con 6 veces sería suficiente.

Esta circulación de aire, si se tratará de locales cerrados se tendría que acondicionar para que los trabajadores no estuvieran expuestos a corrientes molestas y que, esta velocidad, no exceda de los 15 m/min a temperatura normal, ni 45 m/min en ambientes muy calurosos.

Por otra parte, las emanaciones de polvo, gases ..., desprendidos en los locales de trabajo, serán extraídos, si es posible, en su lugar de origen, evitando su difusión por la atmósfera. Lo mismo ocurre con el anhídrido carbónico o ambiental, el cual no podrá sobrepasar la proporción de 50/10000, y el monóxido de carbono la de 1/10000. Además, se prohíbe el uso de cualquier sistema de calor por fuego libre en el interior del edificio.

En cuanto a la temperatura, al igual que en el artículo 25 con la iluminación, si se tienen dos temperaturas distintas en las zonas de trabajo se deberán graduar, evitando variaciones bruscas. Para ello, se instalarán locales de paso que las gradúen. Aunque, normalmente se fijan unas temperaturas límites normales, para que esto no pase:

- Trabajos sedentarios: 17 – 22 °C
- Trabajos ordinarios: 15 – 18 °C
- Trabajos que exigen acusado esfuerzo muscular: 12 – 15 °C

Al igual que en la temperatura, en la humedad también se fijan unos límites, que oscilarán entre los 40 – 60 por 100, excepto en instalaciones peligrosas a generarse electricidad estática, en tal caso deberá estar por encima del 50 por 100.

Las instalaciones generadoras de calor o frío se situarán con la debida separación para evitar accidentes.

Los trabajadores deberán estar protegidos contras las irradiaciones directas y excesivas de calor, al igual que en los trabajos que se realicen con extremadamente frío o calor, donde se limitará su permanencia, estableciendo turnos.

Artículo 31. Ruidos, vibraciones y trepidaciones

Los ruidos y vibraciones se evitarán o reducirán en lo posible su foco de origen, tratando de disminuir su propagación en los locales de trabajo. Si estos ruidos fueran agresivos se deberían también adoptar las prevenciones técnicas necesarias para evitar que los fenómenos de reflexión y resonancia alcancen niveles peligrosos.

A partir de los 80 decibelios, y siempre que no se logre la disminución de nivel sonoro por otros procedimientos, se emplearán obligatoriamente dispositivos de protección personal tales como tapones, cascos, etc., y a partir de los 110 decibelios se extremará tal protección para evitar totalmente las sensaciones dolorosas o graves.

Ocurrirá lo mismo con las máquinas que produzcan ruidos o vibraciones molestas, para ello se aislarán adecuadamente en un recinto donde solo trabajará el personal necesario para su mantenimiento, el cual se extremará con cuidado, muy especialmente los órganos móviles y los dispositivos de transmisión de movimiento. Además, no se permitirá colocarlas adosadas a paredes o columnas, sino que se deberá distanciar como mínimo 0,70 m de los tabiques medianeros y 1 m de las paredes exteriores o columnas. En cuanto a su anclaje, se realizará con las técnicas más eficientes para conseguir su óptimo equilibrio estático y dinámico.

Los conductos con circulación forzada de líquidos o gases, especialmente cuando estén conectados directamente con máquinas que tengan órganos en movimiento, estarán provistos de dispositivos que impidan la transmisión de las vibraciones que generan aquéllas. Estos conductos se aislarán con materiales absorbentes en sus anclajes y en las partes de su recorrido que atraviesen muros o tabiques.

Por último, los trabajadores serán provisto de protección personal siempre que la máquina así lo requiera por razones de seguridad.

Artículo 32. Limpieza de locales

Los locales de trabajo y dependencias anejas deberán mantenerse siempre en buen estado de aseo, para lo que se realizarán las limpiezas necesarias. Estas limpiezas se harán con la frecuencia necesaria y siempre que sea posible fuera de las horas de trabajo, y si los locales son susceptibles de producir polvo está limpieza se efectuará por medios húmedos cuando no sea peligrosa, o mediante aspiración en seco.

Los operarios encargados de la limpieza irán provistos de equipo protector adecuado, siempre y cuando se requiera; y emplearán, preferentemente, detergentes.

Los residuos de primeras materias o de fabricación se evacuarán o se eliminarán por tuberías o en recipientes, al igual que las aguas residuales.

Prohibido fumar cuando se esté limpiando o desengrasando gasolina o derivados del petróleo.

A.3 Real Decreto 488/1997 del 14 de abril [35]

Anexo del Artículo 5. Equipo

La pantalla del ordenador tiene que cumplir una serie de condiciones, entre las que se encuentran:

- Los caracteres deben estar bien definidos, configurados de forma clara y tener una dimensión suficiente.
- La imagen debe ser estable.
- Los usuarios tienen que ser capaces a ajustar fácilmente la luminosidad y el contraste entre los caracteres y la pantalla.
- La pantalla debe ser orientable e inclinable a voluntad, además no debe tener reflejos ni reverberaciones.
- Podrá emplearse un pedestal independiente o una mesa regulable para la pantalla.

El teclado deberá ser inclinable e independiente de la pantalla y, tendrá que haber espacio suficiente delante de este, para permitir que el trabajador adopte una postura cómoda. Además, de ser mate para evitar los reflejos.

La mesa o la superficie del trabajo deberán ser poco reflectantes, tener dimensiones suficientes y permitir la colocación flexible de los componentes que estén encima. El soporte de los documentos deberá ser estable y regulado y estará colocado para que se reduzcan los movimientos de la cabeza y los ojos. También deberá tener suficiente espacio para que los trabajadores adopten una posición cómoda.

El asiento de trabajo será estable, proporcionando libertad de movimiento y proporcionando una postura cómoda. La altura será regulable y ajustable, el respaldo inclinable y se pondrá un reposapiés para quienes lo deseen.

Anexo del Artículo 5. Entorno

El espacio deberá ser suficiente y estar acondicionado para permitir estar cómodos a los trabajadores. La iluminación deberá ajustarse a las necesidades del trabajador y a su entorno.

Por otro lado, deberá tenerse en cuenta el ruido y el calor de los equipos al diseñar el puesto de trabajo. Por último, tanto la humedad como las emisiones deben controlarse por la seguridad del personal.

Anexo del Artículo 5. Interconexión ordenador/persona

El programa habrá de estar adaptado a la tarea a realizarse y de ser fácil de usar, adaptándose al nivel de conocimiento y experiencia del usuario. No se permitirán dispositivos de control sin que los trabajadores hayan sido informados.

Los sistemas deberán proporcionar indicadores sobre su desarrollo y mostrar la información en un formato y a un ritmo adaptados.

APÉNDICE B. Presupuesto

B.1 Introducción

En este apartado se va a describir el presupuesto al estudio de la influencia del diseño de una MEA y de las condiciones de operación sobre su curva de polarización. En concreto se comentará el presupuesto de la mano obra, los equipos informáticos utilizados y los programas informáticos, durante su realización en 12 meses. Para finalizar, se le añadirá al presupuesto de cada uno de los apartados mencionados el 21% de IVA (Impuesto sobre el Valor Añadido), y obtendremos el precio total del estudio.

B.2 Mano de obra

Las personas encargadas de llevar a cabo este proyecto han sido tres: un profesor ayudante doctor, un estudiante de doctorado que previamente obtuvo un grado y máster en ingeniería, y una ingeniera técnica. A la hora de llevar a cabo los cálculos del presupuesto, se han contabilizado las horas trabajadas por cada uno de los empleados, las reuniones realizadas, la redacción del proyecto y su corrección. Para cada uno de los trabajadores se han tenido en cuenta diferentes propiedades, entre las que se encuentran el cargo que ocupa cada uno y las tareas realizadas. En el caso del profesor ayudante doctor, cobrará menos que un titular o un catedrático y su sueldo, al igual que el estudiante de doctorado, estará basado en la Ley 31/2022, de 23 de diciembre, de presupuesto generales del estado para el año 2023, y la propia universidad a la que pertenezcan. Para ello nos hemos basado en los datos proporcionados por la página web de la Universidad Politécnica de Valencia. En cuanto a la ingeniera técnica, para contabilizar sus horas se han obtenido de las horas equivalentes a los 12 ECTS del trabajo de fin de grado, que son 300 horas; y se asume que su sueldo será el homólogo al sueldo de becario en el departamento de motores térmicos. Todo lo descrito se muestra en la Tabla B-1.

	Horas (h)	Sueldo (€/anual)	Sueldo (€/h)	Subtotal (€)
Profesor ayudante doctor	25	28.157,10	11,98	299,5
Estudiante doctorado	100	20.802,06	7,87	787,17
Ingeniera técnica	300	6000	3,83	1149,43
Total				2236,10

Tabla B- 1. Coste del personal que ha participado en el proyecto.

B.3 Hardware

Por otra parte, al tratarse de una investigación experimental-teórica solo se ha necesitado de un ordenador, en concreto de un MacBook Pro de 15 pulgadas con un procesador Intel Core i7 de 6 núcleos y 2,2 GHz, con una memoria integrada de 16 GB. Al no ser el único equipo informático empleado en el proyecto se procede a servirse de

la amortización del ordenador durante el periodo empleado para finalizar el proyecto, 12 meses. Como se muestra en la Tabla B-2, se ha aplicado el coste de una amortización lineal empleando el coeficiente de amortización de equipos electrónicos, según el artículo 12.1.a. de la Ley de Impuesto de Sociedades, la cual fue aprobada por el Real Decreto Legislativo 1/2010, de 2 de julio. El ordenador se pagó en un total de 25 plazos, de los cuales solamente 12 se han empleado para la realización de este trabajo.

	Adquisición (€)	Coef. Amortización (-)	Tiempo de uso (meses)	Subtotal (€)
Ordenador Portátil	2.799	0,20	12	425,45
Total				425,45

Tabla B- 2. Coste del equipo informático empleado para este proyecto.

B.4 Software

Por último, se ha empleado el programa MATLAB R2021b y el Microsoft Office como programas informáticos. Todos los resultados del presupuesto final del software se encuentran en la Tabla B-4, mientras que en la Tabla B-3 se ha especificado el coste de las licencias de los dos programas. En este caso, las licencias fueron pagadas en un total de 15 cuotas.

	Subtotal (€)
MATLAB	69
Microsoft Office	99
Total	168

Tabla B- 3. Coste de las licencias de los programas informáticos.

	Coste total (€)	Coef. Amortización (-)	Tiempo de uso (meses)	Subtotal (€)
Licencias	168	0,33	12	25,98
Total				25,98

Tabla B- 4. Coste de amortización del software.

B.5 Presupuesto total

Finalmente se han sumado los costes de los apartados anteriores aplicando el IVA. El coste total es de tres mil doscientos cincuenta y un mil euros con noventa y un céntimos, como se observa en la Tabla B-5.

	Coste (€)
Mano de obra	2236,10
Hardware	425,45
Software	25,98
Subtotal (€)	2687,53

IVA 21% (€)	564,38
Total	3251,91

Tabla B- 5. Presupuesto total del proyecto.