

Modelización y gestión térmica de una pila de combustible SOFC

Eloi Delgado Ferrer, Maria Serra, Attila Husar

Institut de Robòtica i Informàtica Industrial (CSIC-UPC). C/Llorens i Artigas 4-6. 08028 Barcelona, Spain

RESUMEN: En el presente trabajo se elabora un modelo dinámico con parámetros concentrados capaz de reproducir el comportamiento electroquímico y térmico de una pila de combustible de óxido sólido (Solid Oxide Fuel Cell, SOFC). El modelo se implementa en el software de programación visual MATLAB-Simulink. Gracias a datos experimentales disponibles, se ajustan algunos de sus parámetros. Posteriormente a la elaboración del modelo, se propone una estrategia para la gestión térmica de la pila y se acaba diseñando un controlador que permite mantener constante la temperatura de operación del sistema. Esta estrategia y control implementados son evaluados mediante simulación.

ABSTRACT: In the present work, a dynamic lumped parameter model of the electrochemical and thermal behavior of a Solid Oxide Fuel Cell (SOFC) has been developed. The model is implemented in the MATLAB-Simulink visual programming software. The model was calibrated using experimental data. A strategy is proposed for the thermal management of the stack and a controller is designed to keep the operating temperature of the system constant. This implemented strategy and controller is evaluated through simulation.

Palabras clave: SOFC, Modelo, Simulink, Control.

Keywords: SOFC, Model, Simulink, Control.

1. INTRODUCCIÓN

Los recursos energéticos fósiles del mundo en el que vivimos se están agotando, hipotecando, debido a su uso, el futuro climático de las generaciones presentes y futuras. La búsqueda y desarrollo de fuentes de aprovechamiento de energía respetuosas con el medio ambiente resulta clave para paliar los efectos de este consumismo fósil. La tecnología de las pilas de combustible se presenta como un método eficiente y potencialmente respetuoso de obtención de energía eléctrica y calorífica. La elaboración de modelos dinámicos mediante software, capaces de reproducir su comportamiento, resulta vital para el diseño y dimensionado de los sistemas que empleen esta tecnología y el de sus controladores.

2. DESCRIPCIÓN DEL MODELO

2.1. Modelo electroquímico y fluidodinámico

El voltaje útil que la pila SOFC es capaz de proporcionar (V_{pc}), puede definirse mediante la Ecuación (1), donde V_{Nernst} es el voltaje reversible de Nernst, η_{act} las pérdidas por activación y η_{ohm} las pérdidas óhmicas.

Se han despreciado las pérdidas por concentración, pues no se desea trabajar a densidades de corriente elevadas, en las cuales pueda llegar a notarse el efecto de esta irreversibilidad.

$$V_{pc} = V_{Nernst} - \eta_{act} - \eta_{ohm} \quad (1)$$

El V_{Nernst} de una pila SOFC puede definirse, mediante la Ecuación (2), como el voltaje reversible que una celda es capaz de proporcionar a unas condiciones de presiones parciales (P) y temperatura (T) determinadas [1], siendo R la constante de los gases ideales y F la constante de Faraday.

$$V_{Nernst} = E^0 + \frac{R \cdot T}{2F} \cdot \ln \left(\frac{P_{H_2} \cdot \sqrt{P_{O_2}}}{P_{H_2O}} \right) \quad (2)$$

El término E^0 de la Ecuación (2) puede definirse, mediante la Ecuación (3), como el voltaje reversible capaz de ofrecer por la pila a presión estándar [1], y es directamente proporcional al cambio en la energía libre de Gibbs de formación (Δg^0_f) experimentado en la reacción de formación del agua.

$$E^0 = - \frac{\Delta g^0_f}{2F} \quad (3)$$

Las pérdidas por activación (η_{act}) son debidas a la lentitud con la que tienen lugar las reacciones químicas en el interior de la pila, por lo que una pequeña cantidad de la energía proporcionada por la pila debe emplearse para vencer esta resistencia [2]. Esta irreversibilidad se ha definido en el modelo mediante la Ecuación (4), obtenida de [3].

$$\eta_{act} = \frac{R \cdot T}{\alpha \cdot n \cdot F} \cdot \ln \left(\frac{i}{2 \cdot i_o} + \sqrt{1 + \left(\frac{i}{2 \cdot i_o} \right)^2} \right) \quad (4)$$

Siendo α el coeficiente de transferencia de electrones de los electrodos, n el número de electrones intercambiados durante la reacción, i la densidad de corriente y i_o la densidad de corriente de intercambio de electrones. Esta densidad de corriente i_o puede definirse para el cátodo ($i_{o,c}$) y para el ánodo ($i_{o,a}$) de la pila, mediante la Ecuación (5) y la Ecuación (6) [4], y depende de las presiones parciales de los reactivos presentes en cada uno de los electrodos, su energía de activación asociada (E_{act}) y un coeficiente fenomenológico (γ), que puede ser hallado experimentalmente.

$$i_{o,c} = \gamma_c \cdot \left(\frac{P_{O_2}}{P_{ref}} \right)^{0,25} \cdot e^{-\left(\frac{E_{act,c}}{RT} \right)} \quad (5)$$

$$i_{o,a} = \gamma_a \cdot \left(\frac{P_{H_2}}{P_{ref}} \right) \cdot \left(\frac{P_{H_2O}}{P_{ref}} \right) \cdot e^{-\left(\frac{E_{act,a}}{RT} \right)} \quad (6)$$

Con el fin de simplificar el modelo, se decide despreciar las pérdidas por activación en el ánodo de la pila, ya que éstas normalmente presentan un valor muy inferior a las obtenidas en el cátodo [1].

Las pérdidas óhmicas son debidas a la resistencia al flujo de iones y electrones a través de las celdas de la pila de combustible. Esta irreversibilidad depende de las resistividades de los elementos que componen la pila (electrodos, electrolito, placas bipolares...). Conociendo el valor de la resistencia específica de la pila, (*Area Specific Resistance*, *ASR*), es posible obtener las pérdidas óhmicas mediante la Ecuación (7), a partir de la Ley de Ohm.

$$\eta_{ohm} = ASR \cdot i \quad (7)$$

2.2. Modelo térmico

Se han considerado cuatro agentes participantes en el comportamiento térmico de la pila SOFC.

En primer lugar, es necesaria una fuente de calor inicial (\dot{Q}_i) que permita a la pila alcanzar su temperatura de operación (1023K). Esta aportación de calor puede realizarse mediante la quema de algún combustible o el uso de resistencias eléctricas. Con tal de reproducir la aportación de calor inicial hacia la pila SOFC, se implementa en *Simulink* un controlador proporcional con saturación, que imita el comportamiento de un horno.

El recipiente que contiene la pila (en este caso un horno) no es adiabático, por lo que debe considerarse una transmisión de calor desde su interior hacia el ambiente (\dot{Q}_h). Esta transmisión puede definirse con la Ecuación (8), mediante el uso

de un coeficiente de transferencia de calor (k_h), la superficie de contacto de las paredes de horno con el exterior (S_h) y la diferencia de temperatura entre el interior del horno y el exterior (ΔT).

$$\dot{Q}_h = k_h \cdot S_h \cdot \Delta T \quad (8)$$

La propia pila de combustible, al entrar en funcionamiento, genera por si misma calor (además de electricidad), debido a las irreversibilidades. Tomando la cantidad máxima de energía que la pila SOFC sería capaz de producir como el cambio en la entalpía de formación del agua ($\Delta h_{f, H_2O}$), el calor generado será la parte de la energía total que no es convertida en electricidad, es decir, esta energía total multiplicada por uno menos su rendimiento eléctrico (η_{pc}).

$$\dot{Q}_{pc} = \Delta h_{f, H_2O} \cdot (1 - \eta_{pc}) \quad (9)$$

El rendimiento eléctrico de una pila de combustible puede definirse mediante la Ecuación (10), que se obtiene como el resultado de evaluar la relación entre la energía útil obtenible de la pila y la energía máxima disponible [5].

$$\eta_{pc} = 0,675 \cdot V_{pc} \quad (10)$$

Directamente relacionado con la puesta en marcha de la pila, existe la circulación de los gases reactantes y productos por su interior (oxígeno, nitrógeno, hidrógeno y agua), que entran al sistema a una temperatura inferior a la de operación. Esta diferencia de temperaturas provoca una transmisión de calor por convección (\dot{Q}_c) por parte del cuerpo de la pila hacia estos gases (x). Esta transferencia por convección puede definirse, mediante la Ecuación (11), como la diferencia entre la energía que llevan los fluidos entre la entrada (*in*) y la salida (*out*) del sistema. Esta energía dependerá de su caudal másico (\dot{m}), su calor específico (c_p) y su temperatura (T).

$$\dot{Q}_{c,x} = \dot{Q}_{c,x,out} - \dot{Q}_{c,x,in} \quad (11)$$

$$\dot{Q}_{c,x} = \dot{m}_x^{out} \cdot C_{p,x}^{out} \cdot T_x^{out} - \dot{m}_x^{in} \cdot C_{p,x}^{in} \cdot T_x^{in} \quad (12)$$

Los valores de caudal másico de los reactivos considerados podrán obtenerse mediante balance másico. La temperatura de entrada de los gases será siempre la misma (623K) y se considerará que, durante el recorrido por el interior de la pila, estos son capaces de igualar su temperatura a la de la pila. Los calores específicos de cada uno de los reactivos considerados son directamente proporcionales a la temperatura, y se han obtenido mediante las ecuaciones propuestas en [1].

Los cuatro calores descritos no actúan siempre al mismo tiempo. En el comportamiento térmico de la pila SOFC se ha distinguido entre un modo de

calentamiento y un modo de operación. Durante su calentamiento, la pila permanece apagada (sin corriente ni circulación de fluidos por su interior), por lo que solamente actúan el calor aportado por la fuente externa y las pérdidas térmicas por comportamiento no adiabático del horno. En el momento en el que se enciende la pila (modo de operación), empiezan a circular fluidos a través suyo, por lo que a la vez que la reacción exotérmica genera calor, existe también el componente de pérdidas térmicas asociado a la convección de dichos fluidos. El balance térmico ($\Delta\dot{Q}$) de la pila SOFC puede definirse mediante la Ecuación (13).

$$\Delta\dot{Q} = \dot{Q}_i + \dot{Q}_{pc} - \dot{Q}_h - \dot{Q}_c \quad (13)$$

2.3. Ajuste de parámetros

Por gentileza del IREC (*Institut de Recerca en Energia de Catalunya*), se dispone de datos experimentales de una monocelda con características físicas y de operación determinadas en la Tabla 1.

Estos datos permiten determinar la resistencia específica de la pila (*ASR*) y ajustar el coeficiente fenomenológico de las pérdidas por activación del cátodo, γ_c . La *ASR* puede obtenerse a partir de una espectroscopia de la impedancia, considerando que se corresponde con la impedancia de alta frecuencia.

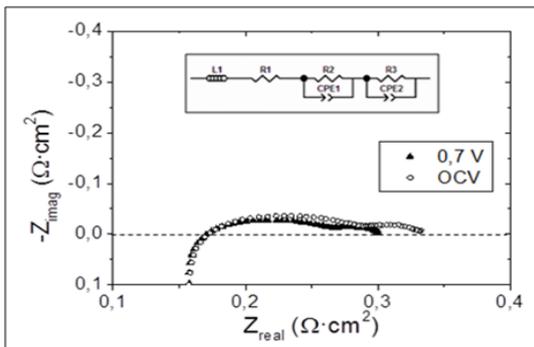


Fig. 1. Espectroscopia de la impedancia de la pila monocelda del IREC, que permite obtener su resistencia. Fuente: IREC.

El valor de γ_c se ha fijado minimizando el error entre la curva de polarización experimental, mostrada en la Figura 2, y la curva que da el modelo. El resto de parámetros empleados para la simulación del modelo se han obtenido de [4].

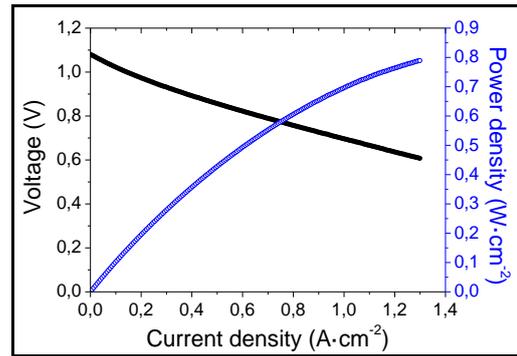


Fig. 2. Curva de polarización de la pila monocelda del IREC, que permite aislar las pérdidas por activación. Fuente: IREC.

Tabla 1. Parámetros en simulación del modelo de la pila SOFC.

nº	Parámetro	Valor	Unidades
1	Area Celda	50	cm ²
2	Nº Celdas	30	celdas
3	T. Operación	1023	K
4	T _{in} fluidos	623	K
5	O ₂ en aire	21	%
6	N ₂ en aire	79	%
7	H ₂ en fuel	97	%
8	H ₂ O en fuel	3	%
9	E _{act,c}	120	kJ/mol
10	γ_c	415,5	kA/cm ²
11	α_c	0,3	-
12	ASR	0,165	$\Omega \cdot \text{cm}^2$
13	S _h	0,296	m ²
14	K _h	0,5	W/(m ² ·K)
15	Potencia horno	2,75	kW

3. GESTIÓN TÉRMICA DE LA PILA SOFC

El principal objetivo de la gestión térmica de la pila SOFC es el de poder apagar el horno una vez se ha alcanzado la temperatura de operación, y que ésta se mantenga estable gracias a la aportación de calor de la propia pila. Asimismo, también deberá mantenerse estable ante repentinos cambios en la intensidad demandada. Se decide ajustar el caudal de aire que entra en el cátodo, con el fin de que el resultado del balance térmico sea cero, y así mantener la temperatura constante al valor deseado. Para ello, se diseña en *Simulink* un controlador PI, donde la variable manipulada es el caudal de aire y la variable controlada la temperatura de la pila (ver Figura 3).

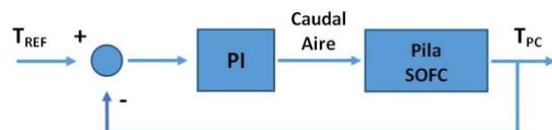


Fig. 3. Esquema del controlador de aire implementado.

4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Con el fin de comprobar el funcionamiento del controlador, se proporciona al modelo un seguido de escalones de corriente, que van desde los 20A hasta los 60A, de diez en diez, con un cambio cada 1500 segundos. Al pedir a la pila de combustible que trabaje a intensidades cada vez más altas, sus pérdidas de eficiencia eléctrica incrementan, reduciendo el voltaje útil que esta es capaz de ofrecer y por lo tanto disminuyendo su rendimiento (ver Figura 4).

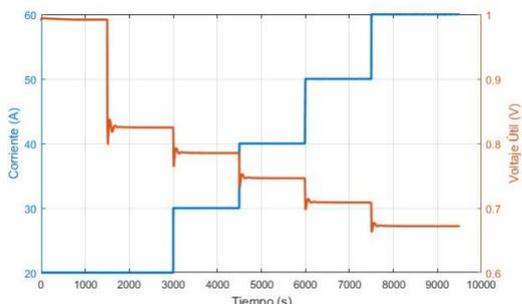


Fig. 4. Corriente demandada a la pila y voltaje útil ofrecido por la misma en función del tiempo.

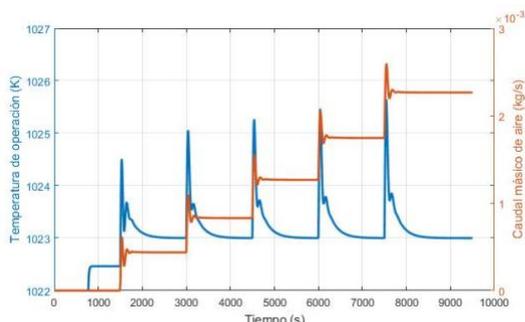


Fig. 5. Temperatura de operación pila y caudal másico necesario para compensar el balance térmico en función del tiempo.

Al empeorar el rendimiento de la pila, esta emite más calor, aumentando la temperatura del sistema, por lo que es necesario ajustar el caudal de aire entrante en el cátodo para que las pérdidas por convección generadas por este fluido sean mayores, aspecto que compensará el balance térmico del sistema, permitiendo mantener constante la temperatura de operación a 1023K. En la Figura 5 puede verse como el control de temperatura se consigue en unos 500 segundos, y los picos no sobrepasan los 3°C.

Es interesante estudiar el rango de operación en que el caudal de aire puede conseguir balance térmico. En este sentido, el límite inferior de intensidad, fijado en 20 A, garantiza que en ningún momento la relación entre el oxígeno suministrado al sistema y el que reacciona sea inferior a 2. Por su

parte, la estequiometría del hidrógeno se fija en 2 para cualquier valor de intensidad demandada.

5. CONCLUSIONES

Se ha obtenido un modelo de parámetros concentrados, basado en leyes físicas y con parámetros ajustados experimentalmente, lo cual lo convierten en un modelo flexible, adaptable a distintas condiciones y diseños.

Además, se ha propuesto una estrategia de balance térmico de la pila, basada en la modificación del caudal de aire entrante en el cátodo, que ha permitido determinar el rango de operación al que puede operar la pila sin necesidad de aporte de energía exterior.

Finalmente, se ha diseñado un controlador proporcional-integral de la temperatura de la pila mediante la regulación del aire que entra al cátodo.

Agradecimientos

Este trabajo ha estado parcialmente financiado por el proyecto de la Generalitat de Catalunya REFER (COMRDI15-1-0036-11). Los autores agradecen al Instituto de Recerca en Energía de Catalunya (IREC) y Francisco Alberto S.A.U. (FAE) por los datos experimentales de este trabajo.

Bibliografía

- [1] J. Larminie, A. Dicks, en *Fuel Cell Systems Explained*, segunda edición, John Wiley and sons (Editor), West Sussex (Inglaterra), 2003, 36-34-72-392.
- [2] S. Singhal, K. Kendall, en *High Temperature Solid Oxide Fuel Cells: Fundamentals, Design and Applications*, Elsevier (Editor), Oxford (Inglaterra), 2003, 319.
- [3] A. Gebregergis, P. Pillay, D. Bhattacharyya, R. Rengasweny, en *Solid Oxide Fuel Cell Modeling*, IEEE Transactions on industrial electronics, vol. 56, nº 1, Enero de 2009.
- [4] S. Grosso, L. Repetto, P. Costamagna, en *Modelling Solid Oxide Fuel Cells: Methods, Procedures and Techniques*, Capítulo 6: IP SOFC model, R. Bove, S. Ubertini (Editores), Universidad de Génova (Italia), 2008, 190.
- [5] EG&G Technical Services, Inc. en *Fuel Cell Handbook*, séptima edición, Departamento de Energía de los EEUU, Oficina de Energía Fósil, Laboratorio Nacional de Tecnología Energética, Morgantown, West Virginia, EEUU, 2004, 62.