



APLICACIÓN DE LA COMPUTACION

Análisis de los parámetros de funcionamiento de una celda de combustible de óxido sólido regenerativa

Operating parameters analysis of a solid oxide regenerative fuel cell using modeling techniques

Raciel – de la Torre Valdés
Lázaro R. – García Parra

Daniel - González Rodríguez
Carlos R. - García Hernández

Recibido: septiembre de 2015

Aprobado: marzo de 2016

Resumen / Abstract

En el presente trabajo se desarrolla un modelo computacional de una celda de combustible de óxido sólido regenerativa plana empleando el software de dinámica de fluidos computacional *Ansys FLUENT*. Se consideran condiciones de estado estacionario y un dominio geométrico tridimensional de la celda. Son analizados los parámetros termodinámicos temperatura y presión de los gases a la entrada de los canales. Además, la porosidad de los electrodos es estudiada por ser una propiedad determinante en el proceso de difusión de las especies y en las pérdidas óhmicas. Se obtuvo que al incrementar la temperatura de los gases a la entrada de los canales desde 963 K hasta 1023 K aumenta el rendimiento de la celda regenerativa. El mismo efecto se observa al aumentar la presión de los gases o el valor de la porosidad de los electrodos, aunque en estos casos la variación del rendimiento es mínima.

Palabras clave: dinámica de fluidos computacional, hidrógeno, electrolizador de alta temperatura, celda de combustible de óxido sólido, celda regenerativa

In the present work a computational model of a planar solid oxide regenerative fuel cell is developed using the CFD software Ansys FLUENT. Steady state conditions and three-dimensional geometry of the cell are considered. The thermodynamic parameters temperature and pressure of the reacting gases are analyzed. The electrodes porosity is also studied for being a determining property in the species diffusion process and in the ohmic losses. It was obtained that to increment temperature since 923 K to 1123 K, increases the regenerative cell performance. When increasing the gases pressure or the electrodes porosity the same effect is observed, although in these cases the performance variation is minimal.

Key Words: computational fluid dynamics, hydrogen, high temperature electrolyzer, solid oxide fuel cell, regenerative cell

INTRODUCCIÓN

Uno de los principales retos de la ciencia moderna es establecer un escenario energético sostenible basado en la utilización de fuentes de energía alternativas y del hidrógeno como vector energético en sustitución de los derivados del petróleo. En general, cualquier fuente de energía puede ser empleada para la producción de hidrógeno, pero son la energía nuclear y la energía solar las que mayores perspectivas tienen para su aplicación a gran escala. Para la utilización del hidrógeno pueden ser empleadas diferentes tecnologías como turbinas de gas y celdas de combustible, estas últimas ofreciendo ventajas en cuanto a la alta eficiencia alcanzada.

Los procesos de producción de hidrógeno que se emplean en la actualidad están caracterizados por la ineficiencia y los altos costos, por lo que la utilización de este vector energético está limitada a muy pocas aplicaciones. Las investigaciones en este tema están dedicadas a procesos que ofrecen ventajas considerables en términos de eficiencia. Entre los más estudiados se encuentran los procesos electroquímicos, específicamente el Iodo-Azufre y el Cloro-Cobre, y la electrólisis del agua a alta temperatura o electrólisis de vapor. Este proceso de separación directa de la molécula de agua tiene lugar en celdas electrolíticas de óxido sólido (SOEC, por sus siglas en inglés) que requieren temperaturas de operación superiores a 850 K y se distinguen por su alta eficiencia. La principal ventaja de la electrólisis de vapor con respecto a la electrólisis del agua es que a alta temperatura, aunque se consume energía en forma de calor, se requiere una menor cantidad de potencia eléctrica, logrando un incremento de la eficiencia.

Las celdas de combustible poseen el funcionamiento inverso a los electrolizadores. Existen celdas de temperatura baja, media y alta. Las que mayores ventajas ofrecen en cuanto a la eficiencia del proceso de generación de electricidad son las de baja temperatura, que se plantean principalmente para su utilización en el sector del transporte, y las de alta temperatura en aplicaciones estacionarias. Las celdas de combustible de óxido sólido (SOFC, por sus siglas en inglés) son las que operan a mayores valores de los parámetros termodinámicos y ofrecen ventajas con respecto a otros tipos de celdas por la posibilidad de emplear hidrocarburos ligeros como combustible y alcanzar eficiencias que pueden superar el 70% en sistemas híbridos con cogeneración de calor.

En algunas aplicaciones las celdas electrolíticas y las celdas de combustible de óxido sólido pueden integrarse en un único dispositivo con funcionamiento reversible. Este tipo de módulo híbrido se denomina celda de combustible de óxido sólido regenerativa (SORFC, por sus siglas en inglés). En modo electrolizador se suministra electricidad para obtener hidrógeno y oxígeno a partir de vapor, y en modo celda de combustible se suministran estos gases para producir electricidad y vapor como subproducto del proceso. Las SORFC pueden ser acopladas a sistemas para aplanar las fluctuaciones de la demanda en una central nuclear o las fluctuaciones de potencia en un sistema fotovoltaico con heliostatos. Las investigaciones actuales sobre estos dispositivos se han centrado en el desarrollo de los materiales de los componentes de la celda y analizar su rendimiento bajo diferentes condiciones de operación. Para el análisis del funcionamiento de estos dispositivos una de las herramientas más empleadas es la modelación basada en dinámica de fluidos computacional (CFD, por sus siglas en inglés), ofreciendo la posibilidad de investigar problemas complejos con una gran exactitud. El *Ansys FLUENT* es un software de CFD con una precisión demostrada en el estudio del comportamiento de sistemas en los que se presentan reacciones electroquímicas, transferencia de calor, difusión de especies y flujo de fluidos. Tal es el caso de las celdas electrolíticas y las celdas de combustible de óxido sólido.

Sin embargo, el diseño de las celdas de combustible de óxido sólido regenerativas no ha sido analizado con profundidad, teniendo en cuenta las diferentes condiciones de operación a las que pueden estar sometidas. Las investigaciones realizadas sobre estos dispositivos se han dedicado a las celdas en modo electrolizador o celda de combustible de forma independiente.

Por lo tanto, este trabajo fue realizado con el objetivo de analizar el funcionamiento de las celdas de combustible de óxido sólido regenerativa para diferentes valores de los parámetros termodinámicos temperatura y presión. Además, se analiza la influencia de la porosidad de los electrodos en el rendimiento de los dispositivos. Se realiza además una comparación entre las eficiencias del proceso reversible de producción y utilización del hidrógeno para las condiciones estudiadas.

MATERIALES Y MÉTODOS

La modelación computacional es uno de los métodos más empleados en la actualidad para el análisis y la optimización del funcionamiento hidrodinámico y electroquímico de las celdas electrolíticas y las celdas de combustible de óxido sólido. Las técnicas de CFD están basadas en el cumplimiento de los principios físicos de la mecánica de los fluidos, expresado mediante ecuaciones gobernantes.

En el caso de la modelación de celdas electrolíticas y celdas de combustible de óxido sólido, las ecuaciones gobernantes son ajustadas con la introducción de los términos fuentes correspondientes. En la ecuación de continuidad aplicada al electrolizador se tiene en cuenta el consumo de vapor y la producción de hidrógeno y oxígeno en la reacción electroquímica. La tasa de producción o consumo de especies en la interfaz

electrodo/electrolito debido a la reacción se define empleando la ley de Faraday como muestra la ecuación (1), [1]:

$$S = -\frac{\omega i}{nF} \quad (1)$$

Donde S es la fuente o sumidero de especies, ω es el coeficiente este quiométrico y n es el número de electrones transferidos por mol de combustible, i es la corriente de operación del dispositivo y F es la constante de Faraday. Los términos fuente en la ecuación de continuidad pueden ser obtenidos en el caso del electrolizador aplicando las ecuaciones (2), (3) y (4):

$$S_{H_2O} = -\frac{M_{H_2O}}{2F} J_{cat} < 0 \quad (2)$$

$$S_{H_2} = \frac{M_{H_2}}{2F} J_{an} > 0 \quad (3)$$

$$S_{O_2} = \frac{M_{O_2}}{4F} J_{cat} > 0 \quad (4)$$

Donde J es la transferencia volumétrica de corriente ($A \cdot m^{-3}$) y M es la masa molar ($kg \cdot kmol^{-1}$). Se puede verificar que el vapor se consume, o sea, es un término fuente negativo en la ecuación de conservación de la masa; mientras el hidrógeno y el oxígeno se producen y son fuentes positivas. La ecuación 3 permite calcular la cantidad de hidrógeno producido en el proceso de electrólisis. En el modelo de la SOFC las ecuaciones de los términos tienen signos opuestos. En este caso el hidrógeno y el oxígeno son consumidos siendo términos negativos, mientras el vapor se produce y es una fuente positiva.

En los modelos de celdas de óxido sólido también se presentan particularidades en la ecuación de la energía. El funcionamiento de estos dispositivos implica pérdida de energía en forma de calor debido al calentamiento óhmico de los componentes. En el caso del electrolizador este calor generado puede ser compensado por el consumo de energía en la reacción electroquímica endotérmica. Sin embargo, en las SOFC la reacción electroquímica es exotérmica generando un mayor calentamiento del dispositivo. Por lo tanto, en estos procesos el cálculo de la entalpía se realiza empleando la ecuación (5), [1]:

$$\Delta H = \pm \Delta H_R - J_{an} \eta_{an} - J_{cat} \eta_{cat} + i^2 R_{ohm} \quad (5)$$

Donde ΔH_R es la variación neta de entalpía debido a la reacción electroquímica, la cual es negativa para la reacción endotérmica que ocurre en una SOEC y positiva para la reacción exotérmica en una SOFC. Además, el producto de J y η representa la transferencia de energía eléctrica, mientras el calentamiento óhmico se considera en el término que vincula la corriente producida en la celda (i) y la resistencia óhmica media R_{ohm} .

Modelo electroquímico

La tensión ideal de la celda o voltaje de circuito abierto (V_{OC}) es calculada empleando la ecuación (6), conocida como ecuación de Nernst:

$$V_{OC} = E_o + \left(\frac{\mathcal{R}T}{2F}\right) \ln \left[\frac{P_{H_2}}{P_{H_2O}}\right] + \left(\frac{\mathcal{R}T}{nF}\right) \ln [P_{O_2}^{1/2}] \quad (6)$$

Donde E_o es el potencial en condiciones estándar, $\mathcal{R}$ es la constante ideal de los gases, T es la temperatura y P son las presiones parciales de cada uno de los gases. Considerando las pérdidas de potencial que ocurren en los electrolizadores y en las celdas de óxido sólido, la tensión de operación de las celdas puede ser calculada según las ecuaciones (7) y (8):

$$V_{SOEC} = V_{OC} + \eta_{act,an} + \eta_{act,cat} + iR_{ohm} \quad (7)$$

$$V_{SOFC} = V_{OC} - \eta_{act,an} - \eta_{act,cat} - iR_{ohm} \quad (8)$$

Donde $\eta_{act,an}$ y $\eta_{act,cat}$ representan las pérdidas por activación de la reacción electroquímica del ánodo y el cátodo, respectivamente. Las pérdidas por concentración son consideradas en el cálculo de latensión ideal de la ecuación (6). La ecuación (7), permite calcular la tensión de la celda en modo electrolizador. Las pérdidas de potencial en este caso provocan que la tensión real que consume el dispositivo sea superior al valor teórico. En el caso de la ecuación 8 para el cálculo de la tensión correspondiente a la SOFC, este valor se obtiene restando las pérdidas existentes.

Las pérdidas por activación son calculadas empleando la formulación de Butler-Volver, como muestran las ecuaciones (9) y (10), [2-3]:

$$J_{an} = (\xi_{an} J_{an}^{ref}) \left(\frac{X_{an}}{X_{an,ref}} \right)^{\gamma_{an}} \left(e^{\alpha_{an} F \frac{\eta_{act,an}}{RT}} - e^{-\alpha_{cat} F \frac{\eta_{act,an}}{RT}} \right) \quad (9)$$

$$J_{cat} = (\xi_{cat} J_{cat}^{ref}) \left(\frac{X_{cat}}{X_{cat,ref}} \right)^{\gamma_{cat}} \left(-e^{\alpha_{an} F \frac{\eta_{act,cat}}{RT}} + e^{-\alpha_{cat} F \frac{\eta_{act,cat}}{RT}} \right) \quad (10)$$

La conductividad iónica ($\sigma_{iónica}$) del electrolito es un parámetro que define la tasa de ocurrencia de la reacción electroquímica. Su valor depende la temperatura de operación de la celda y puede ser calculado empleando la ecuación (11) [4]:

$$\sigma_{iónica} = \frac{100}{0.3685 + 0.002838e^{(10300/T)}} \quad (11)$$

Otro parámetro que determina el funcionamiento del dispositivo es la difusión de gases. El coeficiente de difusión para las reacciones que ocurren en las celdas de óxido sólido es determinado utilizando la ecuación (12),[1]

$$D_i = D_i^0 \left(\frac{P_0}{P} \right) \left(\frac{T}{T_0} \right)^{1.5} \quad (12)$$

Donde D_i es el coeficiente de difusión de la especie i , D_i^0 , P_0 y T_0 son el coeficiente de difusión de la especie i , la presión y la temperatura de los gases en condiciones estándar, respectivamente. El coeficiente de difusión efectivo ($D_{i,ef}$) considerando la porosidad (ε) y la tortuosidad (τ) de los electrodos puede ser obtenido según la ecuación (13):

$$D_{i,ef} = \frac{\varepsilon}{\tau} D_i \quad (13)$$

Diseño de la SOEC y la SOFC modeladas

Considerando las dimensiones geométricas y las propiedades de los materiales, los diseños de la SOEC y la SOFC modeladas son iguales. El diseño escogido en ambos casos corresponde a una celda plana con estructura de los electrodos y el electrolito sostenida en el electrodo del ánodo. Esta configuración permite obtener una mayor densidad de potencia en modo celda de combustible y un mayor rendimiento del electrolizador. En la figura 1, se muestran las vistas frontal e isométrica de los dispositivos modelados empleando Ansys 15.0.

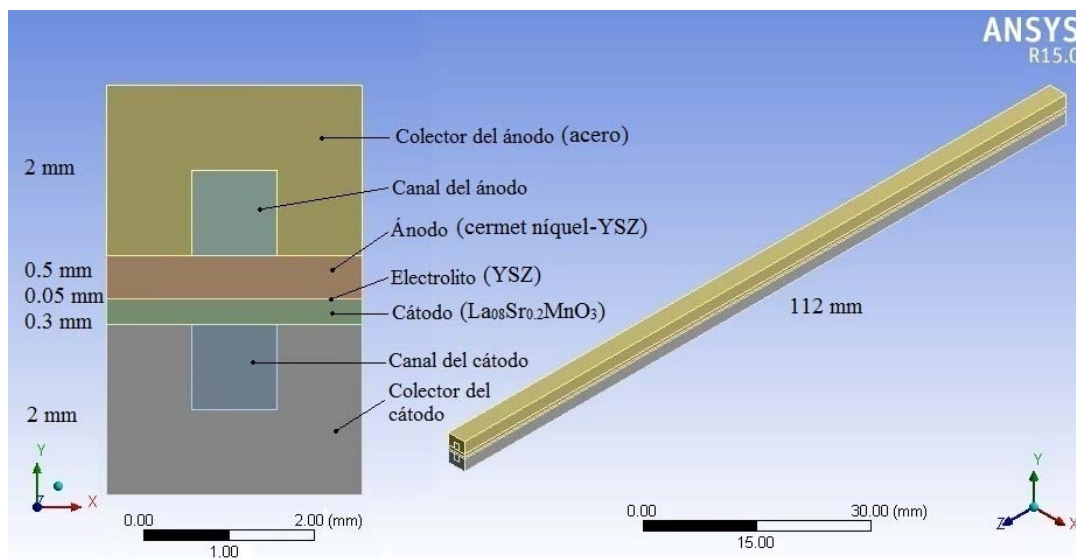


Fig. 1. Dimensiones de la SOEC y la SOFC modeladas en Ansys 15.0. Vista frontal e isométrica.

Las dimensiones consideradas para cada uno de los componentes de la celda se muestran en la tabla 1.

Tabla 1. Dimensiones de la SOFC analizada.		
Dimensión	Valor	Referencia
Espesor del electrolito (mm)	0.05	[4-5]
Espesor del ánodo (mm)	0.5	[4-5-6-7]
Espesor del cátodo (mm)	0.3	[4-5]
Altura de los canales (mm)	1	[5-7]
Ancho de los canales (mm)	1	[5-7]
Longitud de los canales (mm)	112	[8-9]
Espesor del colector de corriente (mm)	1	[5-10-11-12-13]

Condiciones de contorno

Las condiciones de contorno constituyen la representación de las condiciones físicas de interacción de las fronteras del dominio geométrico estudiado con el espacio exterior a este dominio. En el caso de las celdas de óxido sólido existen flujos de gases que entran y salen del sistema y un potencial eléctrico que permite el flujo de electrones. Las condiciones de contorno definidas en *Ansys FLUENT* para la SOEC y la SOFC reúnen las siguientes particularidades:

- Características de los flujos a la entrada de los canales de gases: flujo másico, temperatura y composición de los gases.
- Características de los flujos a la salida de los canales de gases: presión relativa de los gases.
- Potencial eléctrico de la celda: potencial eléctrico o corriente.

Si se define el potencial eléctrico de la celda, la corriente es uno de los parámetros calculados por el software. Si se establece el valor de la corriente, la tensión es calculada. La temperatura de entrada de los gases en ambos modos de operación es de 1023 K. En la tabla 2 se muestran los valores de los flujos másicos y las composiciones de los gases para la SOEC y para la SOFC.

Tabla 2. Características de los flujos de gases a la entrada de la celda electrolítica y de la celda de combustible de óxido sólido.		
Modo de operación	Flujo de gases a la entrada del canal del combustible (kg s^{-1})	Composición de los gases
SOEC	2.24e-5	0.90 H_2O y 0.10 H_2
SOFC	2.24e-7 [14]	0.95 H_2 y 0.05 H_2O [14]

El valor del flujo másico a la entrada del canal del combustible es superior en modo electrolizador que en modo celda de combustible para lograr similares velocidades de los gases, teniendo en cuenta que la densidad del vapor es mayor que la densidad del hidrógeno. Se debe destacar que en modo electrolizador es necesaria la presencia de una pequeña cantidad de hidrógeno a la entrada del canal para mantener condiciones reductoras en el electrodo del vapor[15].

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

La modelación computacional de la SOEC y la SOFC se realizó utilizando el software *Ansys FLUENT 15.0*. Para analizar los resultados obtenidos son construidas las curvas que relacionan la variación de la tensión con respecto a la corriente del dispositivo analizado, denominadas curvas de activación.

ANÁLISIS DE LOS PARÁMETROS TERMODINÁMICOS

Las ecuaciones (6), (7) y (8), evidencian la influencia de los parámetros termodinámicos presión y temperatura en el funcionamiento teórico de las SOEC y las SOFC. Teniendo en cuenta estas ecuaciones, al aumentar la temperatura o la presión de los gases, la tensión teórica de las celdas disminuye. Sin embargo, el comportamiento real de estos dispositivos también depende de las pérdidas de potencial durante su funcionamiento.

El manejo térmico de las celdas se realiza modificando la temperatura de los gases a la entrada de los canales y variando la composición y los valores de los flujos de gases. En este trabajo se analizó el efecto de la variación de la temperatura de los flujos a la entrada de los canales entre 923 K y 1123 K, en el rendimiento de la celda regenerativa, obteniendo las curvas de activación correspondientes, como muestra la figura 2. La temperatura en el modelo inicial es 1023 K y la curva de activación correspondiente está representada en color azul; en todos los análisis realizados este color indica el funcionamiento de la celda inicial.

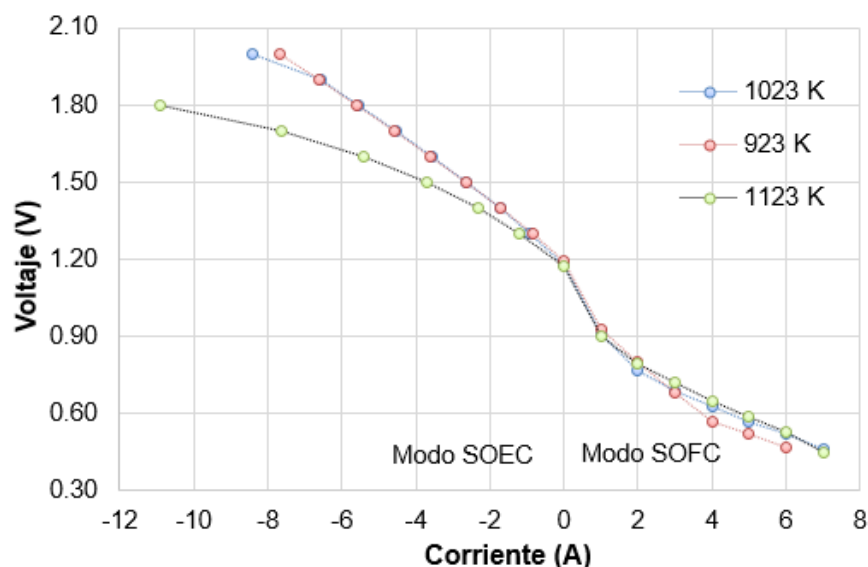


Fig. 2. Curvas de activación de la celda reversible con diferentes temperaturas de los gases reaccionantes.

La celda de combustible de óxido sólido regenerativa genera electricidad en modo SOFC para los valores positivos de corriente y consume potencia eléctrica en modo SOEC para los valores negativos. Analizar el funcionamiento para todos los valores de corriente permite comparar el rendimiento energético de la celda regenerativa para los diferentes valores de temperatura.

Como se puede apreciar en la figura 2, al aumentar la temperatura de los gases, el electrolizador consume una menor tensión para un valor de corriente constante. Esto significa que para una determinada producción de hidrógeno a mayor temperatura se consume menor potencia eléctrica en el proceso. La diferencia entre los resultados obtenidos para diferentes temperaturas es más notoria al aumentar la

corriente porque decrecen las pérdidas óhmicas y las pérdidas por activación y aumenta la conductividad del electrolito.

Si se comparan los resultados obtenidos en este trabajo con los de otros autores como Iora [7], Shi [16] y Gaudillere [17], se puede verificar la consistencia del modelo propuesto, que tiene la particularidad de simular el funcionamiento de una celda de combustible de óxido sólido regenerativa en ambos sentidos, considerando los procesos electroquímicos, térmicos e hidrodinámicos detallados en las tres dimensiones espaciales.

La presencia de la tensión termo-neutral en modo SOEC puede ser verificada analizando los contornos de temperatura para diferentes valores de tensiones de la celda en una superficie ubicada en el plano YZ (figura 1) dividiendo simétricamente la celda, como se muestra en la figura 3.

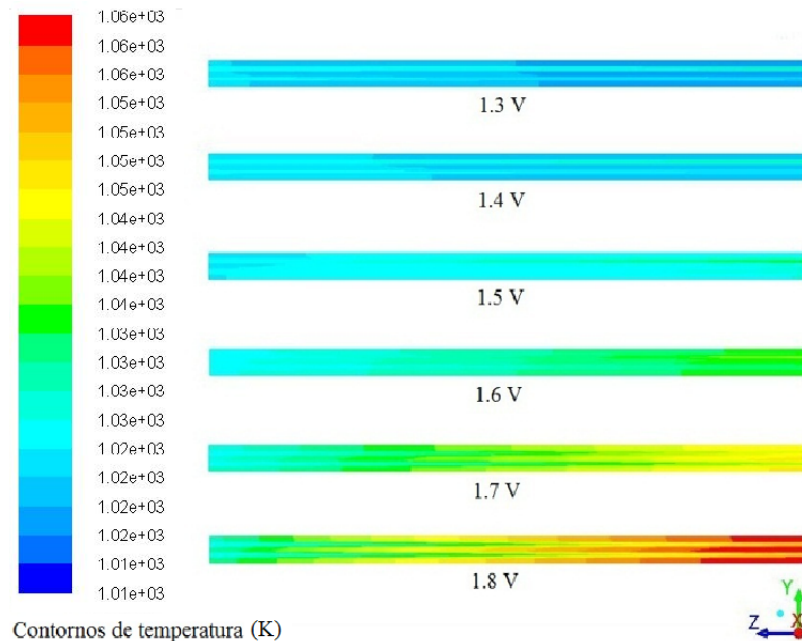


Fig. 3. Contornos de temperatura de la SOEC para diferentes valores de tensión de la celda con los gases a la entrada a 1023 K.

Para tensiones con valores inferiores a 1.40 V la celda se enfría debido a que el calor consumido por la reacción endotérmica es superior al calor generado por el calentamiento óhmico de los componentes; por encima de 1.50 V el flujo de electrones aumenta y el calentamiento comienza a ser determinante. Por lo tanto, la tensión termo-neutral se ubica entre 1.40 V y 1.50 V, y para lograr un funcionamiento isotérmico de la celda se debe operar el dispositivo en este intervalo de tensiones, lo cual permite reducir el estrés térmico al que son sometidos sus componentes.

Si se analiza la suma de los valores de tensiones obtenidas para las corrientes positivas en la figura 2, se puede verificar que la celda regenerativa en modo SOFC produce una mayor potencia funcionando con los gases a temperatura máxima. Sin embargo, para valores de corriente inferiores a 2 A las menores temperaturas permiten mayores rendimientos. Este resultado evidencia la existencia de efectos opuestos al variar la temperatura en modo celda de combustible. Teniendo en cuenta la ecuación (6), la tensión teórica producida decrece con el incremento de la temperatura, mientras las pérdidas de tensión por activación aumentan con el incremento de este parámetro, como se muestra en la figura 4.

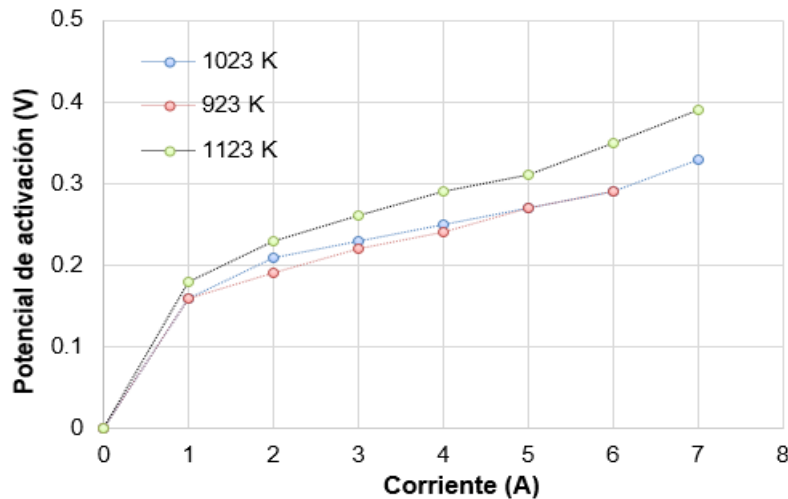


Fig. 4. Pérdidas de potencial de activación en la SOFC para los valores de temperatura analizados.

Sin embargo, al elevar la temperatura de los gases reaccionantes se obtiene una reducción de las pérdidas óhmicas y aumenta la conductividad iónica del electrolito según la ecuación (11). Por estas razones, en el intervalo de corriente estudiado, la celda regenerativa en modo SOFC genera mayor potencia para el mayor valor de temperatura, aunque la influencia de este parámetro es función del valor de la corriente.

La tensión teórica de las celdas también depende de la presión de los gases. Este parámetro se analizó en el rango de valores entre 101325 Pa (1 atmósfera) y 1215900 Pa. En la figura 5, se muestran las curvas de activación de la celda regenerativa para los valores de presión estudiados.

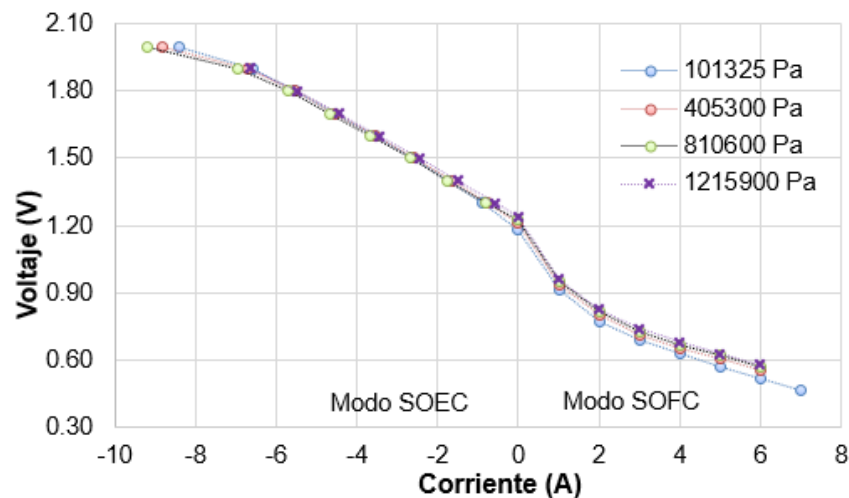


Fig. 5. Curvas de activación de la celda de combustible de óxido sólido regenerativa operando a 101325 Pa, 405300 Pa, 810600 Pa y 1215900 Pa.

En modo celda de combustible la SOFC genera una mayor potencia al aumentar la presión. Un aumento de 101325 Pa hasta 1215900 Pa provoca que la potencia en modo SOFC se incremente en un 8 %, siendo más notable este incremento cuando la presión se eleva solo hasta 405300 Pa. La ecuación de Nernst (ecuación 1.16) describe un comportamiento ideal similar al variar el valor de este parámetro; además, los procesos de difusión de especies ocurren más fácilmente en la medida que se incrementa la presión. Sin embargo, como se puede apreciar en la figura 5, la influencia de este parámetro en el funcionamiento de la celda es baja. En modo SOFC se genera una mayor potencia operando con una presión de los gases de 1215900 Pa.

Cuando el dispositivo funciona para la producción de hidrógeno, se puede verificar que el efecto de la variación de la presión es aún menos significativo que cuando la celda genera electricidad. En este caso, al aumentar el valor de la presión desde 101325 Pa hasta 810600 Pa se reduce la potencia consumida para la

producción del combustible, por lo que existe un aumento del rendimiento. Sin embargo, al incrementar este parámetro termodinámico hasta 1215900 Pa ocurre un ligero crecimiento de la potencia consumida para el rango de valores de corriente estudiados. Este efecto puede estar provocado por la aparición de pequeñas gotas de agua en estado líquido, lo cual obstruye la difusión de gases. En aplicaciones prácticas incrementar la presión de los gases no es factible debido al costo de la presurización de los gases; este análisis es válido solo cuando se instalan las celdas en sistemas híbridos con turbinas.

ANÁLISIS DE LA POROSIDAD DE LOS ELECTRODOS

Entre las propiedades de los materiales empleados en el diseño de las celdas de óxido sólido, la porosidad de los electrodos es una de las que tiene influencia en un mayor número de procesos. Esta propiedad es determinante para la difusión de gases a través de los electrodos y en el valor de la resistencia eléctrica por contacto entre las superficies de los electrodos y los colectores de corriente. En la figura 6, se muestran las curvas de activación correspondientes al funcionamiento de la celda regenerativa para valores de porosidad entre 0.2 y 0.6.

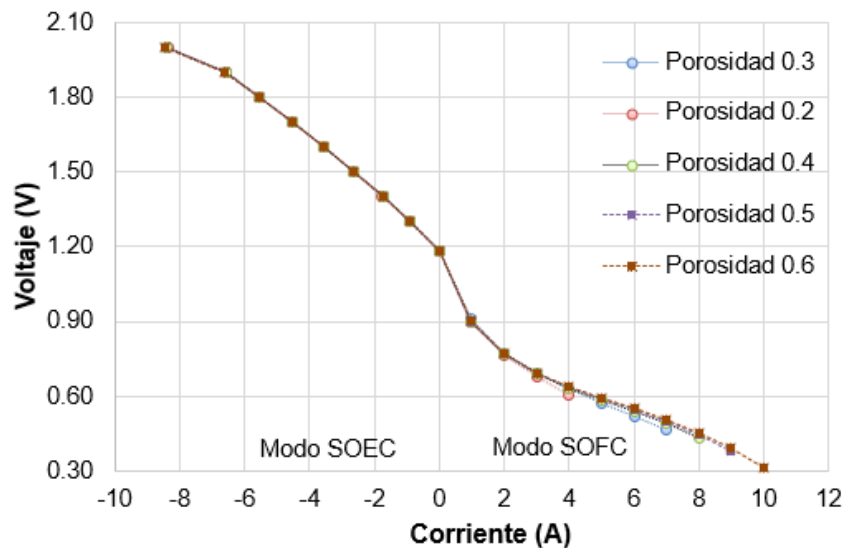


Fig. 6. Curvas de activación de la celda de combustible de óxido sólido regenerativa con valores de porosidad de los electrodos porosos entre 0.2 y 0.6.

Como se puede apreciar en la figura 6, el efecto de la porosidad en el funcionamiento de la celda de combustible de óxido sólido regenerativa no es significativo. En modo electrolizador el dispositivo mantiene prácticamente invariable la potencia consumida para los valores de porosidad estudiados. El máximo incremento del rendimiento funcionando como electrolizador es del 1% operando con una tensión de 2.00 V, y se alcanza elevando la porosidad de 0.2 a 0.6. Cuando el dispositivo funciona como celda de combustible el efecto de esta propiedad es más notable que cuando opera como electrolizador, aunque tampoco se alcanza una variación considerable del rendimiento.

La poca influencia de la porosidad en el funcionamiento reversible de la SORFC se debe a que al incrementar su valor, se reducen las pérdidas de potencial por concentración en los electrodos debido a una mejor difusión de los gases. Sin embargo, el aumento de la porosidad también provoca una menor utilización del combustible debido al incremento de la producción de vapor, que a su vez puede inhibir la difusión de reaccionantes; por lo tanto, existen efectos complementarios al variar esta propiedad de los electrodos. La variación del rendimiento del dispositivo es mayor en ambos modos de operación para altas densidades de corriente, donde las pérdidas por concentración son las más determinantes.

Un efecto de la variación de la porosidad que no se considera en este trabajo es su influencia en las propiedades mecánicas de los electrodos, especialmente de los electrodos basados en níquel. Chiang [13] obtuvo resultados que muestran que al aumentar la porosidad aumenta el estrés principal al que se somete la estructura del ánodo, electrolito y cátodo de la celda.

CONCLUSIONES

Se desarrollaron dos modelos tridimensionales en CFD de una SOEC y de una SOFC que permiten estudiar el funcionamiento de una celda de combustible de óxido sólido regenerativa. Se analizó el rendimiento del dispositivo y se obtuvieron las siguientes conclusiones:

- Los modelos computacionales desarrollados permiten estudiar el funcionamiento de cualquier celda de combustible de óxido sólido regenerativa. Los resultados y conclusiones obtenidas en este trabajo son válidas para evaluar el rendimiento de estos dispositivos.
- Se encontró que al aumentar la temperatura desde 923 K hasta 1123 K se incrementa el rendimiento de la celda regenerativa. Igual resultado se obtuvo al elevar la presión de los gases reaccionantes desde 101325 Pa hasta 1215900 Pa, aunque en este caso la influencia de la variación de este parámetro en el funcionamiento de la celda fue muy baja.
- La porosidad de los electrodos fue estudiada entre los valores de 0.2 y 0.6. Se obtuvo que al aumentar el valor de esta propiedad se incrementa el rendimiento del dispositivo, aunque sin alcanzar diferencias significativas entre los diseños con diferente porosidad.

AGRADECIMIENTOS

Los autores desean agradecer a las entidades que han hecho posible la realización de este artículo, en el marco del proyecto de cooperación CAPES-MES, entre el Ministerio de Educación de Brasil y el Ministerio de Educación Superior de Cuba. CAPES es una agencia gubernamental brasileña que se dedica al desarrollo de capital humano.

REFERENCIAS

- [1] ANSYS, INC., "ANSYS FLUENT Fuel Cell Modules Manual", ANSYS FLUENT Release 15.0, 2013. [Consultado: 1 de julio de 2015]. Disponible en: <http://148.204.81.206/Ansys/150/>
- [2] SLEITI, A. K., "Performance of tubular Solid Oxide Fuel Cell at reduced temperature and cathode porosity", *Journal of Power Sources*, 2010, vol. 195, pp. 5719-5725. ISSN: 0378-7753.
- [3] MEHRPOOYA, M.; AKBARPOUR, S.; VATANI, A.; ROSEN, M. A., "Modeling and optimum design of hybrid solid oxide fuel cell-gas turbine power plants", *International Journal of Hydrogen Energy*, 2014, vol. 39, pp. 21196-21214. ISSN: 0360-3199.
- [4] MOLLAYI, Y. B.; RAOUFI, A.; LARI, H., "Performance analysis of a SOFC button cell using a CFD model", *International Journal of Hydrogen Energy*, 2010, vol. 35, pp. 9468-9478. ISSN: 0360-3199.
- [5] XIA, W.; YANG, Y.; QIU, S. H., "Effects of operations and structural parameters on the one-cell stack performance of planar solid oxide fuel cell", *Journal of Power Sources*, 2009, vol. 194, pp. 886-898. ISSN: 0378-7753.
- [6] DI CARLO, A.; BOCCI, E.; NASO, V., "Process simulation of a SOFC and double bubbling fluidized bed gasifier power plant", *International Journal of Hydrogen Energy*, 2013, vol. 38, pp. 532-542. ISSN: 0360-3199.
- [7] IORA, P.; TAHER, M.; CHIESA, P.; BRANDON, N., "A one dimensional solid oxide electrolyzer-fuel cell stack model and its application to the analysis of a high efficiency system for oxygen production", *Chemical Engineering Science*, 2012, vol. 80, pp. 293-305. ISSN: 0009-2509.
- [8] FAN, L.; DIMITRIOU, E.; POURQUIE, M.; LIU, M.; VERKOOIJEN, A.; ARAVIND, P., "Prediction of the performance of a solid oxide fuel cell fuelled with biosyngas: Influence of different steam-reforming reaction kinetic parameters", *International Journal of Hydrogen Energy*, 2012, vol. 37, pp. 1-11. ISSN: 0360-3199.
- [9] QU, Z.; ARAVIND, P.; DEKKER, N.; JANSSEN, A.; WOUDESTRA, N.; VERKOOIJEN, A., "Three-dimensional thermo-fluid and electrochemical modeling of anode-supported planar solid oxide fuel cell", *Journal of Power Sources*, 2010, vol. 195, pp. 7787-7795. ISSN: 0378-7753.
- [10] CHEN, Q.; ZENG, M.; ZHANG, J.; WANG, Q., "Optimal design of bi-layer interconnector for SOFC based on CFD-Taguchi method", *International Journal of Hydrogen Energy*, 2010, vol. 35, pp. 4292-4300. ISSN: 0360-3199.

- [11] KAKAÇ, S.; PRAMUANJAROENKIJ, A.; ZHOU, X. Y., "A review of numerical modeling of solid oxide fuel cells", *International Journal of Hydrogen Energy*, 2007, vol.32, pp.761-786. ISSN: 0360-3199.
- [12] TSERONIS, K.; BONIS, I.; KOOKOS, I.; THEODOROPOULOS, C., "Parametric and transient analysis of non-isothermal, planar solid oxide fuel cells", *International Journal of Hydrogen Energy*, 2012, vol.37, pp.530-547. ISSN: 0360-3199.
- [13] CHIANG, L. K.; LIU, H. C.; SHIU, Y. H.; LEE, C. H.; LEE, R. Y., "Thermal stress and thermo-electrochemical analysis of a planar anode-supported solid oxide fuel cell: Effects of anode porosity", *Journal of Power Sources*, 2010, vol.195, pp.1895-1904. ISSN: 0378-7753.
- [14] SEMBLER, W. J.; KUMAR, S., "Modification of results from Computational-Fluid-Dynamics simulations of single-cell solid oxide fuel cells to estimate multicell stack performance", *Journal of Fuel Cell Science and Technology*, 2011, vol.8, n.2, p.021008. ISSN: 1550-624X, Doi:10.1115-1.4002617.
- [15] KAZEMPOOR, P.; BRAUN, R., "Model validation and performance analysis of regenerative solid oxide cells: Electrolytic operation", *International Journal of Hydrogen Energy*, 2014, vol.39, pp.2669-2684. ISSN: 0360-3199.
- [16] SHI, Y.; YU LUO, C. N.; QIAN, J.; WANG, S.; LI, W.; WANG, H., "Experimental characterization and modeling of the electrochemical reduction of CO₂ in solid oxide electrolysis cells", *Electrochimica Acta*, 2013, vol.88, pp.644-653. ISSN: 0013-4686.
- [17] GAUDILLERE, C.; NAVARRETE, L.; SERRA, J. M., "Syngas production at intermediate temperature through H₂O and CO₂ electrolysis with a Cu-based solid oxide electrolyzer cell", *International Journal of Hydrogen Energy*, vol.39, 2014, pp.3047-3054. ISSN: 0360-3199.

AUTORES

Raciel de la Torre Valdés

Ingeniero en Tecnologías Nucleares y Energéticas, Máster en Ciencias Técnicas, Profesor Instructor, Departamento de Ingeniería Nuclear, Facultad de Ciencias y Tecnologías Nucleares, Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas, InSTEC, La Habana, Cuba.

email: raciel@instec.cu; delatorrevaldes@gmail.com

Lázaro R. García Parra

Ingeniero Nuclear, Máster en Ciencias Técnicas, Profesor Auxiliar, Departamento de Ingeniería Nuclear, Facultad de Ciencias y Tecnologías Nucleares, Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas, InSTEC, La Habana, Cuba.

email: lgarcia@instec.cu

Carlos R. García Hernández

Ingeniero Nuclear, Doctor en Ciencias Técnicas, Profesor Titular, Departamento de Ingeniería Nuclear, Facultad de Ciencias y Tecnologías Nucleares, Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas, InSTEC, La Habana, Cuba.

email: cgh@instec.cu

Daniel González Rodríguez

Ingeniero en Tecnologías Nucleares y Energéticas, Máster en Ciencias Técnicas, Profesor Instructor, Departamento de Ingeniería Nuclear, Facultad de Ciencias y Tecnologías Nucleares, Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas, InSTEC, La Habana, Cuba.

email: dgr@instec.cu