

MODELAMIENTO MATEMÁTICO DE UNA CELDA DE COMBUSTIBLE DE
ÓXIDO SÓLIDO (SOFC), USANDO COMO COMBUSTIBLE EL GAS DE
SÍNTESIS OBTENIDO DE LA BIOMASA.

MARÍA VICTORIA CASTILLO BERMÚDEZ

FUNDACIÓN UNIVERSIDAD DE AMÉRICA
FACULTAD DE INGENIERÍAS
PROGRAMA DE INGENIERÍA QUÍMICA
BOGOTÁ D.C
2018

MODELAMIENTO MATEMÁTICO DE UNA CELDA DE COMBUSTIBLE DE
ÓXIDO SÓLIDO (SOFC), USANDO COMO COMBUSTIBLE EL GAS DE
SÍNTESIS OBTENIDO DE LA BIOMASA.

MARÍA VICTORIA CASTILLO BERMÚDEZ

Trabajo de investigación para optar el título de
INGENIERO QUÍMICO

Director
ANDREA LACHE MUÑOZ
Ingeniero Químico

Codirector
LIBARDO MENDOZA
Ingeniero Mecánico

FUNDACIÓN UNIVERSIDAD DE AMÉRICA
FACULTAD DE INGENIERÍAS
PROGRAMA DE INGENIERÍA QUÍMICA
BOGOTÁ D.C
2018

Nota de aceptación:

Firma del presidente del jurado

Firma del jurado

Firma del jurado

Bogotá D.C

DIRECTIVAS DE LA UNIVERSIDAD

Presidente de la Universidad y Rector del claustro

Dr. JAIME POSADA DÍAZ

Vicerrector de Desarrollo y Recursos humanos

Dr. LUIS JAIME POSADA GARCÍA-PEÑA

Vicerrectora Académica y de Posgrados

Dra. ANA JOSEFA HERRERA VARGAS

Decano de la Facultad de Ingenierías

Ing. JULIO CESAR FUENTES ARISMENDI

Director General de Investigación y Proyección Social

Dr. MANUEL CANCELADO JIMÉNEZ

Director Programa Ingeniería Química

Ing. LEONARDO DE JESÚS HERRERA GUTIÉRREZ

Las directivas de la Universidad de América, los jurados calificadores y los docentes no son responsables por las ideas y conceptos emitidos en el presente documento. Estos corresponden únicamente al autor.

DEDICATORIA

El trabajo de investigación lo dedico a mi familia, a mi padres de manera especial quienes cada día se despiertan y hacen el esfuerzo necesario para que mis hermanos y yo estemos donde estamos, por ellos y para ellos a los que les agradezco profundamente por apoyarme en todo, en especial en las decisiones de mayor importancia en mi vida, a ellos quienes me han enseñado que los errores nos hacen los que somos, a ellos quienes me han enseñado a luchar siempre por lo que quiero hasta conseguirlo, a ellos quienes cada día de su vida la entregan profundamente al futuro de sus hijos. Se lo dedico a mi hermano y hermana quien es mi persona a seguir, y el ser humano al que más admiro en el mundo, a ella que siempre ha creído en mí.

AGRADECIMIENTOS

Agradezco a mi familia, a cada uno de mis docente durante el transcurso de mi carrera, a el docente Felipe Correa, la directora Andrea Lache y al codirector Libardo Mendoza por el apoyo y guía en desarrollo de este proyecto, , agradezco a mi compañeros de estudio y en especial a mi amigas (Dani, Gila, Laspri, Yuzu, Nigg,) quienes me apoyaron para llegar hasta acá, agradezco a Cristian quien dedico su tiempo en la revisión del desarrollo conceptual y bibliográfico de este documento y en especial a Dios por ponerme en el camino a cada una de las personas antes nombradas, quienes aportaron una parte de si para que esto se hiciera realidad.

CONTENIDO

	pág.
RESUMEN	21
INTRODUCCIÓN	22
OBJETIVOS	24
1. GENERALIDADES TEÓRICAS	25
1.1 BIOMASA	25
1.2 GASIFICACIÓN	26
1.3 GASIFICACIÓN DE LA BIOMASA	27
1.4 GAS DE SÍNTESIS	29
1.4.1 Motores de combustión interna.	30
1.4.2 Turbinas.	31
1.5 CELDAS DE COMBUSTIBLE	32
1.5.1 Tipos De Celdas Combustibles.	33
1.5.1.1 Celda combustible de óxido sólido (SOFC).	34
1.6 GEOMETRÍA DE UNA SOFC	38
1.7 LEY DE FARADAY	40
1.8 LEY DE OHM	41
1.9 CURVA DE POLARIZACIÓN	41
1.10 SOBREPOTENCIALES	43
1.10.1 Pérdida de Activación	43
1.10.2. Pérdida óhmica.	45
1.10.3. Pérdida de concentración.	45
1.11 REACCIONES	47
1.11.1 Reacción electrolítica.	48
1.11.2 Reformado de hidrocarburos.	49
1.11.3 Desplazamiento del agua (Water gas Shift reaction).	50
2. PARÁMETROS DE ESTUDIO	51
2.1 NUMERO DE GRADOS DE LIBERTAD	51
2.2 TEMPERATURA	52
2.3 PRESIÓN	53
2.4 FLUJO VOLUMETRICO	53
2.5 MATERIALES	53
2.5.1 Material del electrolito.	54
2.5.2 Material del Cátodo.	56
2.5.3 Material del Ánodo.	57
2.6 GEOMETRIA DE LA CELDA	57
2.7 DENSIDAD DE CORRIENTE	58
2.8 TABLA DE RESUMEN	61

3. MODELO MATEMÁTICO	62
3.1 MODELOS DE CELDAS Y CANALES	63
3.1.1 Modelos continuos.	63
3.1.1.1 Cuasi homogéneo.	63
3.1.1.2 Heterogénea.	63
3.2 FENÓMENOS	63
3.2.1 Fenómeno convectivo.	64
3.2.2 Fenómeno difusivo.	64
3.3 ECUACIÓN DE TRANSPORTE	64
3.4 COMPOSICIÓN	67
3.5 DEMOSTRACIÓN MATEMÁTICA	68
3.5.1 Difusividad en el ánodo.	69
3.5.1.1 Ley de Fick.	69
3.5.1.2 Perfil de Concentración Ley de Fick.	69
3.5.1.3 Condiciones de frontera (Ley de Fick).	70
3.5.1.4 Coeficientes de difusividad (Ley de Fick).	71
3.5.2 Difusividad en el cátodo.	71
3.6 TABLA DE RESUMEN DE ECUACIONES	74
4. IMPLEMENTACIÓN DEL MODELO MATEMÁTICO	75
4.1 PERFIL DE CONCENTRACIÓN	75
4.1.1 Perfil de concentración en el ánodo.	75
4.1.2 Perfil de concentraciones en el cátodo.	77
4.1.3 Perfil de concentración en la interfase.	77
4.2 CÁLCULO DE POTENCIAL ELECTROQUÍMICO	80
4.2.1 Ecuación de Nernst.	80
4.2.2 Cálculo de las pérdidas de activación.	81
4.2.3 Cálculo de las pérdidas Óhmicas.	83
4.2.4 Cálculo de las pérdidas por concentración.	84
4.3 CURVA DE POLARIZACIÓN	86
4.4 EFICIENCIA Y POTENCIAL DE LA CELDA DE COMBUSTIBLE DE ÓXIDO SÓLIDO	87
4.4.1 Potencia de la celda.	88
4.4.2 Análisis económico.	89
5. CONCLUSIONES	92
6. RECOMENDACIONES	93
BIBLIOGRAFIA	94
ANEXO	101

LISTA DE TABLAS

	pág.
Tabla 1. Técnicas de utilización de biomasa con sus respectivos rangos de temperaturas y composición del gas combustible producido.	26
Tabla 2. Composición del gas de síntesis a partir de diferentes opciones de biomasa	29
Tabla 3. Propiedades del motor y condiciones de operación.	30
Tabla 4. Parámetros de diseño de la turbina de gas m701f	31
Tabla 5. Clasificación de las diferentes pilas de combustión	33
Tabla 6. Reacciones químicas.	48
Tabla 7. Reacciones electrolíticas.	49
Tabla 8. Clasificación según su nivel de t (°c)	52
Tabla 9. Los valores de entrada que se reparan a lo largo del estudio	59
Tabla 10. datos a la entrada de la sofc	60
Tabla 11. Parámetros para la solución del modelo matemático	61
Tabla 12. Propiedades termodinámicas de los estados principales para el caso 1.	68
Tabla 13. Resumen de ecuaciones	74
Tabla 14. Composiciones en los canales del flujo del ánodo y cátodo.	79
Tabla 15. Valores potencial de nernst.	81
Tabla 16. Pérdidas por activación	82
Tabla 17. Pérdidas óhmicas	83
Tabla 18. Pérdidas por concentración	85
Tabla 19. Potencial electroquímico de la sofc	86
Tabla 20. Valor económico del motor del gasificador	90
Tabla 21. Valor económico de una pila de combustible	90

LISTA DE GRÁFICOS

	pág.
Gráfica 1. Composición nodal del hidrógeno	76
Gráfica 2. Composición nodal del oxígeno.	77
Gráfica 3. Perfil de concentración del hidrógeno en la interfase del ánodo	78
Gráfica 4. Perfil de concentración del oxígeno en la interfase del cátodo	78
Gráfica 5. Pérdidas por activación respecto con respecto a la densidad de corriente	82
Gráfica 6. Pérdidas óhmicas	84
Gráfica 7. Pérdidas por concentración con respecto a la densidad de corriente	85
Gráfica 8. Curva de polarización	87

LISTA DE FIGURAS

	pág.
Figura 1. Proceso de gasificación.	27
Figura 2. Clasificación de los equipos de gasificación.	28
Figura 3. Funcionamiento pila de combustión sofc.	35
Figura 4. Celda de combustible sofc con sus partes.	37
Figura 5. Celda sofc usando celdas en configuración planar.	39
Figura 6. Conformación de una celda sofc usando celdas en configuración tubular.	40
Figura 7. Conductividad iónica de materiales electrolíticos en función de la temperatura	54
Figura 8. Conductividades de ysz con diferentes tamaños de grano.	55
Figura 9. Modelos de microestructura de muestras cristalinas submicrométricas ysz.	56
Figura 10. configuración planar de la sofc	57
Figura 11. La variación de densidad de corriente a lo largo de la longitud axial de la sofc en $y = 0$ y $z = 0$ a una tensión de 0.73 v.	58
Figura 12. Sofc unitaria.	65
figura 13. Relación volumen de control del canal de flujo del gas de síntesis y ánodo.	65
Figura 14. Sección latera del canal de flujo del gas de síntesis y el ánodo.	66
Figura 15. Fenómeno difusivo y conductivo en el canal de flujo del gas de síntesis.	66
Figura 16. Balance de materia unitario del nodo.	67
Figura 17. Relación volumen de control del canal de flujo del aire y cátodo.	72
Figura 18. Sección latera del canal de flujo del aire y el cátodo.	72
Figura 19. Balance de materia para un nodo del canal de flujo del aire.	73
Figura 20. Eficiencia térmica respecto a las diferentes concentraciones del combustible.	91

LISTA DE ECUACIONES

	pág.
Ecuación 1. Masa disuelta	40
Ecuación 2. Cantidad de electricidad	40
Ecuación 3. Masa disuelta	41
Ecuación 4. Peso equivalente	41
Ecuación 5. Masa disuelta en términos de densidad de corriente	41
Ecuación 6. Ley de ohm	41
Ecuación 7. Voltaje de la celda	42
Ecuación 8. Nernst	42
Ecuación 9. Butler-volmer	43
Ecuación 10. Densidad de corriente	43
Ecuación 11. Simplificación de la pérdida por activación	44
Ecuación 12. Simplificación de la pérdida por activación	44
Ecuación 13. Consideración pérdida por activación	44
Ecuación 14. Densidad de corriente de intercambio para el cátodo	44
Ecuación 15. Densidad de corriente de intercambio para el ánodo	44
Ecuación 16. Pérdida óhmica	45
Ecuación 17. Dependencia de las temperaturas	45
Ecuación 18. Pérdida por concentración	46
Ecuación 19. Pérdida por concentración en el cátodo	47
Ecuación 20. Pérdida por concentración en el ánodo	47
Ecuación 21. Numero de grados de libertad	51
Ecuación 22. Balance fundamental	64
Ecuación 23. Balance de materia	64
Ecuación 24. Balance de energía	64
Ecuación 25. Gradiente de flux en una dimensión.	69
Ecuación 26. Ley de fick	69
Ecuación 27. Perfil de concentración (fick)	69
Ecuación 28. Condición límite de neumann	70
Ecuación 29. Perfil de difusividad en el ánodo (reacción electrolítica)	70
Ecuación 30. Velocidad de reacción (reacción reformado de metano)	70
Ecuación 31. Velocidad de reacción (wáter gas shift)	70
Ecuación 32. Difusividad en el ánodo.	71
Ecuación 32. Difusividad efectiva.	71
Ecuación 33. Gradiente de flux del oxígeno	73
Ecuación 35. Flux de oxígeno en términos de la ley de faraday	73
Ecuación 36. Perfil de difusividad en el cátodo	74
Ecuación 37. Potencial electroquímico	80
Ecuación 38. Potencial electroquímico en función de la densidad de corriente	80
Ecuación 39. Nernst en términos de la energía libre de gibbs	80
Ecuación 40. Pérdidas por activación	81

Ecuación 41. Pérdidas óhmicas	83
Ecuación 42. Pérdidas por concentración en el ánodo	84
Ecuación 43. Pérdidas por concentración en el cátodo	84
Ecuación 44. Eficiencia térmica de la celda en términos de la energía libre de gibbs.	88
Ecuación 45. Eficiencia térmica de la celda en términos de la entalpia.	88
Ecuación 46. Eficiencia térmica de una sofc	88
Ecuación 47. Determinación de la eficiencia térmica de una sofc	88
Ecuación 48. Potencia de la celda	88
Ecuación 49. Determinación de la potencia de la celda	89

LISTA DE ANEXOS

	pág.
Anexo A. Cálculo de propiedades termodinámicas	102
Anexo B. Cálculo del potencial reversible de la celda.	108

LISTA DE SÍMBOLOS

A	Área disponible (m^2)
A_v	Área superficial electroquímica por unidad de volumen (m^2/m^3)
a_i	Actividad química de i
C	Concentración total (mol i/mol de Gas de Síntesis)
C_p	Capacidad calorífica (J/mol K)
D^{eff}	Difusividad efectiva
D_{ij}	Coeficiente difusivo binario de la especie i (m^2/s)
$D_{i,k}$	Coeficiente difusivo de Knudsen de la especie i (m^2/s)
E	Potencial de Nernst (V)
E_{a_a}	Energía de Activación en el ánodo (J/mol)
E_{a_c}	Energía de Activación en el cátodo (J/mol)
E_{eq}	Potencial de Equilibrio.(V)
e_{ab}	Energía de interacción molecular (ergios)
F	Constante de Faraday (C/mol)
G^{reff}	Energía libre de Gibbs a la temperatura de referencia (J/mol)
G	Energía libre de Gibbs (J/mol)
H	Entalpía (J/mol)
H^0	Entalpía de referencia (J/mol)
H	Entalpía específica (J/mol)
I	Intensidad (Amperios)
J_0	Densidad de corriente de intercambio (A/m^2)
J_0	Densidad de corriente de intercambio (A/m^2)
J	Densidad de corriente (A/m^2)
K	Constante de Boltzman (Ergios/K)
L_a	Espesor del ánodo (m)
L_c	Espesor del cátodo (m)
L_e	Espesor del electrolito (m)
L'	Longitud al interior del poro (m)
LSM	Manganita de lantano con trazas de estroncio
M	Flujo másico (Kg/s)
M	Peso molecular (g/mol)
N	Flujo molar (mol/m^2s)
Na	Numero de Avogadro
Ni	Flux (mol de i/m^3 s)
n_{el}	Numero de electrones transferidos
P	Presión (atm)
P_i	Presión parcial de la especie i (atm)
P_o	Presión estándar
P_{celda}	Potencia de la celda (W)
P_{el}	Probabilidad de una partícula conductora de atraer un electrón.
P_{io}	Probabilidad de una partícula conductora de atraer un ion.
Q	Carga total (e^-) (Coulombs)

Q	Carga instantánea (Coulombs)
R	Constante de los gases ideales (J/mol K)
R_i	Velocidad de reacción de la especie i (mol/m ³ s)
R_{total}	Resistencia total (Ohmios)
R_e	Resistividad óhmica total
\bar{r}	Promedio de los radios de los poros (m)
T	Temperatura (K)
T	Tiempo (s)
TPB	Límite de frontera Ánodo-Electrolito (lugar de la reacción electroquímica).
V	Voltaje (Voltios)
V_r	Velocidad de reacción (mol i/tiempo)
W_{ele}	Trabajo eléctrico
WGS	Reacción de desplazamiento de agua (Water Gas Shift)
X_K	Composición de las especies en la interfase
y_i	Composición de cada especie (mol de i/mol de gas de síntesis)
YSZ	Óxido de zirconio estabilizado con itrio
z	Espesor (m)
Z	Número de coordinación de las partículas en el electrodo
Z_e	Número de coordinación de partículas conductoras de electrones
ΔV_{act}	Pérdida de activación.
ΔV_{con}	Pérdida de concentración
$\Delta V_{\acute{o}hm}$	Pérdida Óhmica

Griegos

ϕ	Potencial instantáneo (Voltios)
ϕ_a	Potencial instantáneo en el ánodo (Voltios)
ϕ_c	Potencial instantáneo en el cátodo (Voltios)
$\Delta\phi_a^\infty$	Variación del potencial instantáneo en el ánodo al infinito (Voltios)
$\Delta\phi_c^\infty$	Variación del potencial instantáneo en el cátodo al infinito (Voltios)
ϵ	Porosidad
σ	Conductividad (s/m)
γ_i	Coefficiente de actividad de la especie i (mol de i/mol de compuesto)
γ_R	Orden de la reacción
η	Pérdidas de potencial (V)
τ	Tortuosidad
α	Coefficiente de transferencia aparente de carga
α_a	Coefficiente de transferencia de carga en el ánodo
α_c	Coefficiente de transferencia de carga en el cátodo
φ	Fracción volumétrica de partículas conductoras de electrones
η_s	Sobrepotencial
Θ	Angulo de contacto entre la partícula y el ion o electrón

	transferido
Ω_{ij}	Parámetro de colisión integral.
σ_{ij}	Diámetro de colisión

Subíndices

a	ánodo
c	cátodo
el	electrones
i	Especie
ele	eléctrico

Superíndice

eff	Efectiva
reff	Estado de referencia
0	Estado de equilibrio

GLOSARIO

ÁNODO: el ánodo es el electrodo en donde se da una reacción de oxidación, la cual ocurre en una celda electrolítica en donde este pierde electrones y aumenta su oxidación.

BIOMASA: el peso seco de la materia viva en un área determinada expresada en términos de masa o peso por unidad de volumen o área

CANAL DE FLUJO: parte de la celda de combustible por donde se alimenta y transita el flujo de fluido.

CÁTODO: el cátodo es el electrodo en donde se da una reacción de reducción, la cual ocurre en una celda electrolítica en donde este gana electrones y así hace que se produzca una reducción.

CELDA DE COMBUSTIBLE: generadores de energía directos.

CELDA DE COMBUSTIBLE DE ÓXIDO SÓLIDO: son dispositivos que generan electricidad por una reacción química y un intercambio de electrones. La celda cuenta con dos electrodos (cátodo y ánodo) y un electrolito que los separa. La celda de combustible de óxido sólido genera energía eléctrica y agua, debido a que se alimenta con hidrógeno y oxígeno (aire). La temperatura de funcionamiento es aproximadamente 1000 ° C (1800 ° F).

ELECTROLITO: es una sustancia que contiene aniones y cationes, lo cual la convierte en conductora de corriente eléctrica, usualmente son líquidos con iones en solución, pero también se encuentran electrolitos en fase sólida.

GAS DE SÍNTESIS: es un combustible en estado gaseoso obtenido por procesos químicos a alta temperatura a los que se someten compuestos con una elevada proporción de carbón.

GASIFICACIÓN: proceso termoquímico en el cual una sustancia inorgánica u orgánica se transforma por medio de reacciones químicas a elevadas temperaturas y con un agente gasificante en combustible gaseoso.

MODELO MATEMÁTICO: sistema donde todos los comportamientos se simulan usando ecuaciones matemáticas, estableciendo variables según mi objetivo a estudiar.

OXIDACIÓN: es un proceso en el cual ocurre un aumento en el número de oxidación de un átomo, debido a que este pierde un electrón, es decir, la forma positiva de la especie aumenta

REDUCCIÓN: es un proceso en el cual ocurre una disminución en el número de oxidación de un átomo, debido a que este gana un electrón, es decir, la forma positiva de la especie se ve reducida.

RESUMEN

Se analizó mediante una modelación matemática la generación de energía eléctrica en una celda combustible, alimentada con gas de síntesis proveniente del proceso de gasificación de biomasa residual. La transformación de biomasa es de interés debido a su capacidad de producir combustibles sólidos, líquidos o gaseosos (gas de síntesis) mediante distintos procesos.

Una de las aplicaciones de mayor interés del gas de síntesis es la generación de energía eléctrica, en un motor de combustión interna, sin embargo, dadas las condiciones de operación de un motor y el contenido de contaminantes (alquitranes) en el gas de síntesis, se requieren procesos de enfriamiento del gas y separación de dichos contaminantes, que incrementan los costos de operación y disminuyen la eficiencia global de conversión de biomasa en energía eléctrica. Debido a lo anterior dispositivos como las SOFC, han sido estudiados puesto que pueden operar a la temperatura que tiene el gas a la salida del gasificador.

Con el desarrollo del modelo matemático se buscó tener conocimiento sobre la eficiencia y resultados teóricos de la SOFC, estableciendo parámetros y condiciones de operación, para saber si es viable en un futuro realizar el desarrollo y las pruebas experimentales de la celda a nivel laboratorio. El presente proyecto tiene como antecedente un trabajo de grado realizado en el grupo de investigación de energías alternativas, en el cual el modelo matemático se realizó sin tener en cuenta las reacciones de reformado de metano y desplazamiento del agua (wáter gas shift) que se dan en el canal de flujo del ánodo al usar como combustible el gas de síntesis. Se analizaron los parámetros de presión, temperatura, materiales que la componen y la densidad de la corriente de la celda. Debido a que la celda opera de forma isotérmica y con una velocidad constante el balance de energía y momentum no se tienen en cuenta. El balance de materia se consideran y las propiedades de la celda no tendrán mayores cambios a través del tiempo puesto que el sistema es estacionario.

Los resultados obtenidos por el modelo matemático desarrollado demuestran que la eficiencia de la celda es mayor en comparación a la de otras tecnologías expuestas en la literatura, sin embargo, es necesario que la celda sea modelada considerando otros parámetros que se acerquen más a la realidad del comportamiento de la celda para obtener mejores resultados y sea viable desarrollar pruebas experimentales.

PALABRAS CLAVE: Ánodo, cátodo, electrolito, Biomasa, gas de síntesis, celda combustible de óxido sólido, modelo matemático, estado estacionario.

INTRODUCCIÓN

El crecimiento de la población mundial trae consigo un consumo mayor de los recursos disponibles en la tierra, por esto la energía eléctrica ha presentado un aumento en su demanda.¹ La necesidad de suplir dicha demanda ha llevado a buscar formas y fuentes de obtención de energía alternas a las convencionales (recurso fósil).² Los recursos fósiles no están presentes equitativamente en la tierra y su explotación generan afectaciones tales como la lluvia ácida, el smoking fotoquímico y el calentamiento global producto de la liberación de gases.³

Las nuevas alternativas de producción de energía deben representar una menor afectación en el medio ambiente⁴. El desarrollo investigativo y científico ha permitido abordar nuevas tecnologías que permitan la producción de energía tales como las celdas combustibles de óxido sólido a partir de fuentes alternas a las convencionales.⁵ Las celdas de combustible de óxido sólido (en adelante SOFC, por sus siglas en inglés) son dispositivos usados para transformar fuentes de energía renovable como la biomasa en energía eléctrica.⁶

Las SOFC tienen una eficiencia teórica del 100% que favorecen su funcionamiento y aplicación⁷. Este dispositivo funciona comúnmente con hidrógeno como combustible⁸. Para este proyecto se empleó como combustible el gas de síntesis obtenido del proceso de gasificación de biomasa, el cual, no debe ser enfriado, ya que la celda permite el ingreso del combustible a una elevada temperatura, evitando así el aumento en costos de operación, a diferencia de los motores de combustión interna donde generalmente se emplea este combustible y debe ser sometido a procesos de enfriamiento.⁹

Este proyecto se enfocó en el análisis de un modelo matemático de la celda de combustible (SOFC), la cual usó como combustible el gas de síntesis. Se buscó estudiar si la producción de energía eléctrica es favorecida por la composición, la temperatura de operación y las reacciones que se dan al interior del canal de flujo del ánodo (reformado de metano y desplazamiento del agua (wáter gas shift)) las cuales producen más hidrógeno para así obtener los datos, resultado de la

¹ NACIONES UNIDAS, Población, disponible en línea: <http://www.un.org/es/sections/issues-depth/population/index.html>

² CARDONA ALZATE, Carlos Ariel; ORREGO ALZATE, Carlos Eduardo, avances investigativos en la producción de biocombustibles, las microalgas, fuente de aceite para la producción de biodiesel, primera edición, Manizales, Caldas, Colombia, Universidad Nacional de Colombia sede Manizales, Junio de 2009

³ *Ibíd.*, p.43

⁴ *Ibíd.*, p.43

⁵ ALVARADO FLORES, J. Estudio comparativo de las diferentes tecnologías de celdas de combustible. En: Boletín De La Sociedad Española De Cerámica Y Vidrio. no. 52, p. 105-117.

⁶ *Ibíd.*, p.106

⁷ *Ibíd.*, p.106

⁸ *Ibíd.*, p.106

⁹ *Ibíd.*, p.106

ecuación de Nernst para calcular el potencial de reducción de los electrodos, que sean comparables con lo reportado en la literatura para los dispositivos convencionales; además, se analizó la conveniencia en la implementación de dichas celdas como dispositivo final para la generación de energía eléctrica a partir de biomasa residual.

OBJETIVOS

OBJETIVO GENERAL

Desarrollar el modelo matemático de una celda de combustible de óxido sólido (SOFC) usando como combustible el gas de síntesis obtenido de la biomasa.

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Establecer los parámetros y condiciones de operación de la celda de combustible de óxido sólido, que serán implementadas en el modelo.
- Implementar y verificar el modelo matemático de una pila de combustible óxido sólido con gas de síntesis teniendo en cuenta las reacciones de óxido-reducción.
- Desarrollar un modelo matemático que incluya las reacciones de reformado de hidrocarburos y desplazamiento del agua (Water gas Shift reaction) que ocurren en la SOFC, usando como combustible el gas de síntesis
- Realizar un análisis comparativo de los resultados obtenidos por el modelo desarrollado de una celda de combustión SOFC usando gas de síntesis, con lo reportado en la literatura.

1. GENERALIDADES TEÓRICAS

En el presente capítulo, se describen los conceptos necesarios para el desarrollo del proyecto de investigación como las reacciones que se dan en la celda combustible de óxido sólido, las variables y parámetros establecidos para el funcionamiento de la misma.

1.1 BIOMASA

La biomasa es un recurso energético compuesto principalmente por celulosa, lignina y hemicelulosa¹⁰. Entre sus fuentes podemos encontrar “los recursos forestales, pecuarios, industriales, agrícolas, acuáticos y urbanos”¹¹. Usar la biomasa como recurso energético tiene aspectos favorables como: la transformación de esta en combustibles líquidos, sólidos o gaseosos; baja producción de emisiones contaminantes y aprovechamiento de desechos. La biomasa tiene procesos de conversión bioquímicos, fisicoquímicos y termoquímicos¹². Cada uno de estos procesos tiene diferentes métodos para transformar la biomasa y obtener el producto necesario, como se muestra en la tabla 1.

¹⁰GARCÍA FERNÁNDEZ, Luis Eduardo .Obtención de gas combustible a partir de la gasificación de biomasa en un reactor de lecho fijo. Universidad Nacional de Colombia, Facultad de Ingeniería Bogotá, D.C., Colombia, 2011. Pág. 18.

¹¹ Ibíd., p.18

¹² Ibíd., p.18

Tabla 1. Técnicas de utilización de biomasa con sus respectivos rangos de temperaturas y composición del gas combustible producido.

Técnica de conversión	de Rango de temperatura (°C)	de Presión	Productos principales
Combustión	800-1200	atm-alta	Calor, CO ₂ , H ₂ O
Pirolisis	400-800	atm-alta	Carbonizado, alquitranes, gas
Gasificación	650-1100	atm-alta	CO, H ₂ , CH ₄ , CO ₂
fermentación aerobia	<100	Atm	Etanol, CO ₂
fermentación anaeróbica	<100	Atm	CH ₄ , H ₂ O

FUENTE: Gasificación de biomasa para producción de combustibles de bajo poder calorífico y su utilización en generación de potencia y calor. Scientia et Technica Año X, No 25, Agosto 2004. UTP¹³. Adaptado por el autor.

1.2 GASIFICACIÓN

La gasificación es un proceso térmico, en el cual, se producen combustibles a partir de fuentes como carbón, coque y biomasa, donde se obtiene un gas de síntesis (figura 1)¹⁴. El proceso de gasificación es considerado flexible, pues se puede producir combustibles en estado gaseoso, líquido o sólido¹⁵. Para lograr dicho proceso se requiere: calor, vapor y oxígeno, pues el material carbonoso tiene que pasar por un proceso de combustión donde se convierte en moléculas más pequeñas, que se combinarán más adelante para formar el producto principal (combustible)¹⁶.

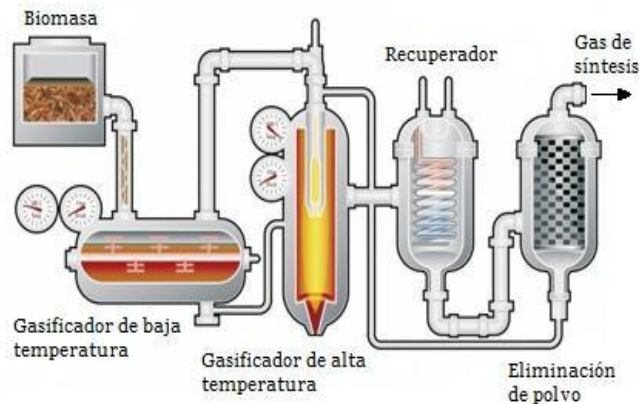
¹³ ESTRADA, Carlos Augusto; ZAPATA MENESES, Alberto. Gasificación de biomasa para producción de combustibles de bajo poder calorífico y su utilización en generación de potencia y calor. Scientia et Technica Año X, No 25, Agosto 2004. UTP, p. 156

¹⁴ FONSECA GONZÁLEZ, Natalia Elizabeth. Estado del arte del uso de gasificación termoquímica de biomasa en motores de combustión interna alternativos. Centro de investigaciones energéticas, medioambientales y tecnológicas- CIEMAT. En línea <http://oa.upm.es/10905/2/NATALIA_ELIZABETH_FONSECA_GONZALEZ._xpdf.pdf>. Julio, 2003.

¹⁵ FONSECA GONZÁLEZ, Natalia Elizabeth. Estado del arte del uso de gasificación termoquímica de biomasa en motores de combustión interna alternativos. Centro de investigaciones energéticas, medioambientales y tecnológicas- CIEMAT. En línea <http://oa.upm.es/10905/2/NATALIA_ELIZABETH_FONSECA_GONZALEZ._xpdf.pdf>. Julio, 2003.

¹⁶ ESTRADA, op. cit, p.156- 157

Figura 1. Proceso de gasificación.



FUENTE: Gas de síntesis. Disponible en: http://combustibles-alternativos.weebly.com/uploads/1/3/0/5/13050311/4734424_orig.jpg.

1.3 GASIFICACIÓN DE LA BIOMASA

La gasificación de la biomasa es un proceso de conversión termoquímica que permite que se dé la transformación de energía química presente en la biomasa en una mezcla de gases y generar energía eléctrica y térmica¹⁷. Es una técnica de conversión termoquímica donde las reacciones químicas se dan gracias a la presencia de calor y agentes reaccionantes¹⁸. El proceso de gasificación de la biomasa pasa de un sólido a un gas en una temperatura de alrededor de 800 a 1000 °C, donde este tiene la oportunidad de ser usado como combustible o materia prima en la fabricación de otros compuestos químicos¹⁹.

La gasificación es un proceso que se da en dos etapas de forma continua o separada; estas etapas son: la degradación de la biomasa, que se logra con una técnica llamada pirólisis, donde se obtiene principalmente carbonizado, alquitranes y gas; la segunda etapa es la conversión termoquímica del carbonizado obtenido en la pirólisis^{20 21}.

El uso final del gas obtenido en la gasificación depende del agente reaccionante empleado durante el proceso.²² Con aire, como agente reaccionante, se tiene un

¹⁷ PÉREZ, Juan; BORGE, David; AGUDELO, John. Proceso de gasificación de biomasa: una revisión de estudios teórico- experimentales. En: Revista Facultad de Ingeniería Universidad de Antioquia, Universidad de Antioquia Medellín, Colombia. núm. 52 (marzo, 2010); pp. 95-107

¹⁸ *Ibíd.*, p.95-107

¹⁹ MCKENDRY, P.: Energy production from biomass (part 2): conversion technologies. En: Bioresource technology 83 (2002), p. 47-54

²⁰ *Ibíd.*, p.156

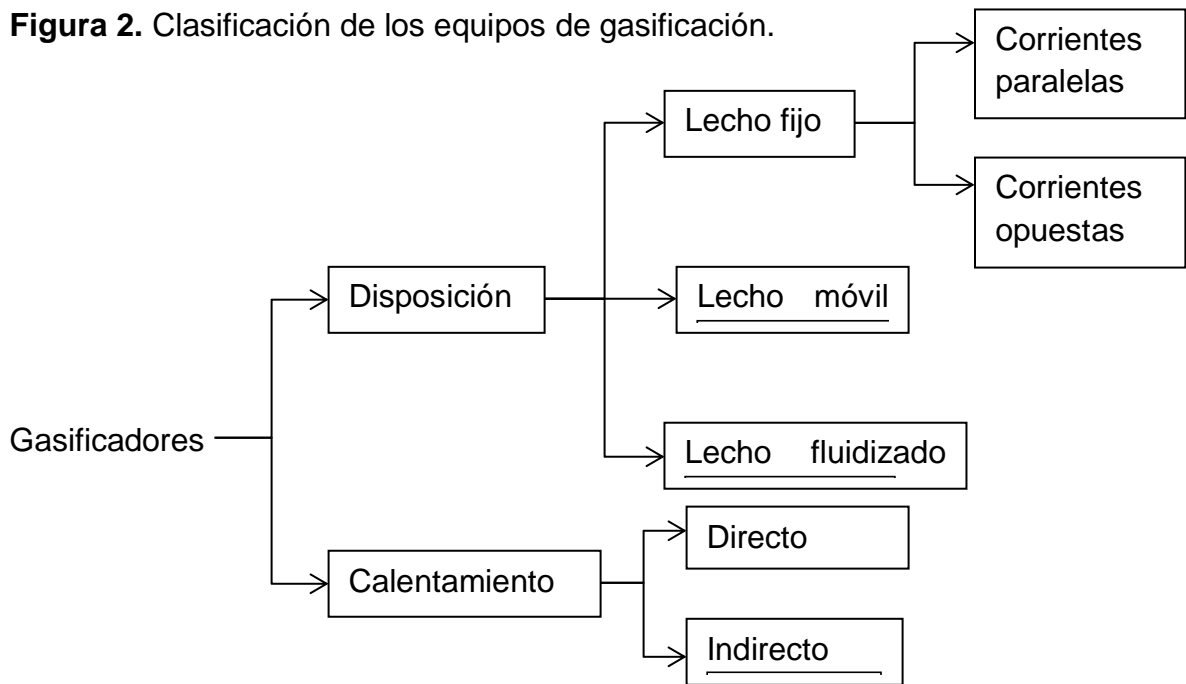
²¹ *Ibíd.*, p.31-32

²² *Ibíd.*, p.31-32

gas con poder calorífico bajo, el cual puede ser útil en aplicaciones energéticas y en la producción de metanol; así mismo, con oxígeno se produce un gas con poder calorífico medio con utilidad en aplicación energética y producción de metanol²³. Empleando vapor de agua, como agente reaccionante, el gas producido tiene en mayor proporción H_2 y CO , este gas tiene usos en la producción de compuestos como: amoníaco, metanol y gasolina²⁴. Finalmente si se utiliza hidrógeno el gas obtenido es de alto poder energético y contenido de metano, convirtiéndose en una alternativa del gas natural²⁵.

Se conocen diferentes configuraciones de reactores, con distintas formas de contacto de la biomasa con el agente reaccionante²⁶. Los gasificadores pueden ser de lecho fijo, fluidizado y móvil; ser directo e indirecto según el tipo de calentamiento (figura 2.)²⁷.

Figura 2. Clasificación de los equipos de gasificación.



Fuente: Obtención de gas combustible a partir de la gasificación de biomasa en un reactor de lecho fijo. 2011

²³ *Ibíd.*, p.32

²⁴ *Ibíd.*, p.32

²⁵ *Ibíd.*, p.32

²⁶ CHOPRA, S.; JAIR, A.: A Review of Fixed Bed Gasification Systems for Biomass. En: Agricultural Engineering International: the CIGR Ejournal 9 (2007), p. 23

²⁷ *Ibíd.*, p.23

1.4 GAS DE SÍNTESIS

Es un combustible en estado gaseoso compuesto por hidrógeno, carbono, metano, agua y otros gases²⁸. Este gas se puede obtener de compuestos con una elevada proporción de carbón, como: carbón, coque, biomasa (madera, residuos urbanos, desechos provenientes de procesos biológicos, entre otros)²⁹. Estos compuestos pasan por procesos químicos a temperatura elevada y los métodos usados para la obtención del *gas de síntesis* son “la gasificación del carbón, el reformado con vapor del gas natural o pirólisis y gasificación de biomasa”³⁰. El gas de síntesis se usa en industrias de biorefinería y químicas como producto intermedio de la producción de alcoholes, alcanos y olefinas, combustible directamente o mezclado, para producir vapor y energía eléctrica³¹. En la tabla 2, se evidencian distintas composiciones de gas de síntesis a partir de biomasa.

Tabla 2. Composición del gas de síntesis a partir de diferentes opciones de Biomasa

% molar	Biomasa 1	Biomasa 2	Biomasa 3
H ₂	34,2	33,37	34,2
CO	32,2	30,83	32,2
CO ₂	20,4	21,3	10,4
CH ₄	13,0	14,5	23,0
N ₂	0,2	0,0	0,2

FUENTE: NAVARRO CINTAS, Esther Análisis del proceso de síntesis de gas natural de sustitución (SNG) a partir de biomasa. Trabajo de grado Ingeniería Química, Dpto. de Ingeniería Química y Ambiental, Escuela Técnica Superior de Ingeniería Universidad de Sevilla. Sevilla, Septiembre 2014, p.13

El gas de síntesis obtenido de la gasificación de la biomasa “contiene compuestos perjudiciales e indeseados para el proceso como son los alquitranes, las cenizas, el polvo y compuestos de cloro y/o azufre”³². Estos compuestos deben ser eliminados del gas de síntesis mediante una etapa de limpieza, donde las cenizas

²⁸ SÁNCHEZ BASTARDO, Nuria. Obtención de gas de síntesis a partir de biomasa utilizando catalizadores de níquel, universidad de Valladolid, escuela de ingenierías industriales, grado en ingeniería química. Valladolid, Julio 2014. Pág. 13.

²⁹Ibíd., p.13

³⁰ Ibíd., p. 13

³¹ AHI, Atte, et al. Chemical Energy Storage. Walter de Gruyter, 2013.

³² NAVARRO CINTAS, Esther Análisis del proceso de síntesis de gas natural de sustitución (SNG) a partir de biomasa. Trabajo de grado Ingeniería Química, Dpto. de Ingeniería Química y Ambiental, Escuela Técnica Superior de Ingeniería Universidad de Sevilla. Sevilla, Septiembre 2014, p.11

se retiran del gas por medio de un ciclón; los alquitranes y el polvo se retiran con ayuda de un scrubber (sistema de depuración para control de contaminantes)³³. El gas de síntesis generalmente es empleado en motores de combustión interna y turbinas, pero para este estudio se usa en una SOFC.

1.4.1 Motores de combustión interna. Los motores de combustión interna son dispositivos que convierten la energía química de un combustible en energía mecánica. Esta conversión se da gracias a la reacción de combustión que ocurre al interior del motor³⁴. Los motores de combustión interna tienen condiciones de operación (tabla 3) y eficiencia exergética del 45%, lo que convierte a este tipo de dispositivos en una alternativa poco favorable para el uso del gas de síntesis como combustible, puesto que la temperatura de entrada del motor de combustión interna es de 50°C y el gas de síntesis sale del proceso de gasificación a una elevada temperatura³⁵. El gas de síntesis se somete a un proceso de enfriamiento, en donde aumenta la presencia de alquitranes y demás compuestos indeseados afectando el funcionamiento del motor de combustión interna³⁶.

Tabla 3. Propiedades del motor y condiciones de operación.

Tipo de motor	4 cilindros monocilíndricos de 2 válvulas
Combustible, SI	CH ₄
Desplazamiento	332 cm ³
Diámetro interior carrera	65/100 mm
La velocidad del motor	600 min ⁻¹
Temperatura de entrada	50 ° C
Presión de admisión	1 bar

FUENTE: WIEMANN, S.; HEGNER, R.; ATAKAN, B.; SCHULZ, C.; KAISER, S. A. Combined production of power and syngas in an internal combustion engine–

³³ Ibid., p.11

³⁴ CLETO ORTIZ, Jorge Arnaldo; GÓMEZ OREA, Leonardo. Simulación y análisis de la dinámica de un motor de combustión interna de cinco cilindros manufacturado por Volkswagen, mediante el software Virtual Lab, Tesis profesional, Departamento de Ingeniería Industrial y Mecánica. Escuela de Ingeniería y Ciencias, Universidad de las Américas Puebla. Cholula, Puebla, México a 11 de enero de 2008.

³⁵ WIEMANN, S.; HEGNER, R.; ATAKAN, B.; SCHULZ, C.; KAISER, S. A. Combined production of power and syngas in an internal combustion engine–Experiments and simulations in SI and HCCI mode. En: Fuel, 2018, vol. 215, p. 40-45.2018

³⁶ Ibid., p.40-45

Experiments and simulations in SI and HCCI mode. En: Fuel, 2018, vol. 215, p. 40-45.2018. Modificado por el autor.

1.4.2 Turbinas. Las turbinas pueden ser impulsadas por gas de síntesis haciendo que la producción de energía se dé con un potencial de contaminación bajo³⁷. A pesar de esto, las turbinas presentan algunas dificultades en su funcionamiento cuando es alimentada con gas de síntesis, debido a que la composición del gas depende de las concentraciones que se usan de materia prima para generarla³⁸. Por otra parte, es necesario someter a la turbina a altas temperaturas y aumentar el flujo volumétrico, pues estas condiciones generan más óxidos nitrosos, los cuales, son necesarios para que el funcionamiento y trabajo de la turbina sea adecuado³⁹. La tabla 3 representa los parámetros de diseño para una turbina de gas.

Tabla 4. Parámetros de diseño de la turbina de gas M701F

Parámetros	Valor de diseño
Relación de presión del compresor	17
Relación de presión de la turbina	17
Potencia neta (MW)	270
Temperatura de entrada de la turbina de gas (° C)	1400
Temperatura de salida de la turbina de gas (° C)	586
Caudal de aire (kg / s)	651
Eficiencia neta (%)	38.2
Eficiencia isentrópica de la turbina de gas	0.900
Temperatura de cálculo del balance térmico (° C)	1245

FUENTE: Lan, W.; Chen, G.; Zhu, X.; Wang, X.; Liu, C.; Xu, B. Biomass gasification-gas turbine combustion for power generation system model based on ASPEN PLUS. En: *Science of The Total Environment*, 628, 1278-1286, 2018.

Como se dijo anteriormente el gas es empleado en una SOFC para esto se hablará de las celdas de combustible y posteriormente de las SOFC específicamente.

³⁷ PADTURE, Nitin P.; GELL, Maurice y JORDAN, Eric H. Thermal barrier coatings for gas-turbine engine applications. En: Science. vol. 296, no. 5566, p. 280-284.

³⁸ *Ibid.*, p.33

³⁹ *Ibid.*, p.33

1.5 CELDAS DE COMBUSTIBLE

Una celda de combustible es un sistema de flujo estable, el cual genera electricidad y calor a través de una reacción de electrolisis invertida también llamada reacción electroquímica, en el que el oxidante y el combustible, se suministran desde una fuente externa que proporciona un medio que transforma energía química en energía eléctrica⁴⁰. Este es un proceso continuo y directo que se rige de reacciones de reducción y oxidación con la presencia de un catalizador⁴¹.

Las celdas de combustible son dispositivos electroquímicos semejantes a las baterías convencionales, pues ambas funcionan con electrodos (positivos y negativos) y con un electrolito⁴². Estas celdas tienen una ventaja frente a las baterías convencionales debido a que produce electricidad mientras está siendo alimentada con combustible y oxidante⁴³.

El funcionamiento de la celda de combustible comienza cuando el oxígeno (O₂) proveniente del aire pasa sobre un electrodo y el hidrógeno (H₂) gas pasa sobre el otro electrodo⁴⁴. Cuando el hidrógeno (H₂) es ionizado, se oxida en el ánodo y pierde un electrón; el hidrógeno oxidado (ahora en forma de protón) y, el electrón, se dirigen hacia el segundo electrodo (cátodo)⁴⁵. El hidrógeno lo hará a través del electrolito, mientras que el electrón lo hace por medio de un material conductor externo⁴⁶. Finalmente, se reúnen en el cátodo donde ocurre la reacción de reducción para formar agua (H₂O) junto con el hidrógeno oxidado. De esta forma, este proceso produce 100% agua pura, corriente eléctrica y calor útil⁴⁷.

Una vez la celda de combustible inicia su operación; la corrosión, la degradación de materiales y los componentes que la conforman pueden limitar su vida útil⁴⁸.

⁴⁰ *Ibíd.*, p.106

⁴¹ *Ibíd.*, p.106

⁴² ALVARADO FLORES, J. Estudio comparativo de las diferentes tecnologías de celdas de combustible. En: Boletín De La Sociedad Española De Cerámica Y Vidrio. no. 52, p. 105-117.

⁴³ *Ibíd.*, p. 105-107

⁴⁴ *Ibíd.*, p.105-117

⁴⁵ *Ibíd.*, p.105-117

⁴⁶ *Ibíd.*, p.105-107

⁴⁷ *Ibíd.*, p.106-107

⁴⁸ ALVARADO FLORES, J. Estudio comparativo de las diferentes tecnologías de celdas de combustible. En: Boletín De La Sociedad Española De Cerámica Y Vidrio. no. 52, p. 105-117.

1.5.1 Tipos De Celdas Combustibles. Las celdas combustibles se clasifican según las características químicas del electrolito utilizado como conductor iónico⁴⁹. Esta característica permite clasificarlas según su temperatura de operación y eficiencia para generar energía eléctrica⁵⁰. La generación de energía se da gracias a los diferentes combustibles implementados para su funcionamiento; por ejemplo, las celdas de combustión que permiten la utilización de hidrocarburos presentan mayores eficiencias⁵¹.

La tabla 5 muestra los diferentes tipos de celdas de combustión, temperatura de operación, eficiencia, electrolitos utilizados y los diferentes combustibles que estas utilizan.

Tabla 5. Clasificación de las diferentes pilas de combustión

Tipos de celdas combustibles	Electrolito	Temperatura de operación	Combustible	Eficiencia
Alcalina (AFC)	Hidróxido de potasio (KOH)	50-200°C	Hidrógeno puro	50-55%
Metanol directo (DMFC)	Polímero	60-200°C	Metanol líquido	40-55%
Ácido fosfórico (PAFC)	Ácido fosfórico	160-210°C	Hidrógeno de hidrocarburos y alcohol	40-50%
Membrana de intercambio de protones (PEMFC)	Polímero, membrana de intercambio de protones	50-80°C	Hidrógeno puro de hidrocarburos o metanol	40-50%
Carbonato fundido (MCFC)	Sal fundida como nitrato, sulfato y carbonatos	630-650°C	Hidrógeno, monóxido de carbono, gas natural, propano, diesel marino	50-60%
Óxido sólido (SOFC)	Cerámica como Zirconia estabilizada	600-1000°C	Gas natural o propano	45-60%

⁴⁹ *Ibíd.*, p.106-107

⁵⁰ *Ibíd.*, p.106-107

⁵¹ *Ibíd.*, p.106-107

Tabla 5 (Continuación)

Tipos de celdas combustibles	Electrolito	Temperatura de operación	Combustible	Eficiencia
Cerámica protónica (PCFC)	Fina membrana de óxido de cerio bario	600-700°C	Hidrocarburos	45-60%

FUENTE: ACUÑA GARRIDO, Francisco; MUÑOZ YI, Ventura. Celdas de combustible. Una alternativa amigable con el medio ambiente para la generación de potencia y su impacto en el desarrollo sostenible de Colombia en el siglo xxi. En: Revista ingeniería y desarrollo. Vol. 10 (2001); p. 94-102.

1.5.1.1 Celda combustible de óxido sólido (SOFC). Las celdas de combustible de óxido sólido (SOFC) basan su principio de funcionamiento en la generación de energía eléctrica gracias a una reacción química y un intercambio de electrones. Dicha reacción química es conocida como óxido reducción, pues uno de los reactivos se oxida (cede electrones) y el otro se reduce (gana electrones)⁵².

Las reacciones de óxido reducción producen energía eléctrica si son manipuladas. Por esta razón las celdas de combustible cuentan con dos compartimientos (ánodo y cátodo) donde se almacenan los reactivos de manera independiente y se encuentran separados por un conductor eléctrico, de tal forma que los electrones cedidos (oxidados) fluyen por medio del conductor eléctrico para tener contacto con el reactivo reducido (gana electrones), dando como resultado una energía eléctrica.⁵³ El conductor eléctrico o membrana de intercambio iónico da únicamente paso a los compuestos cargados, es decir oxidados o reducidos, los reactivos que no han reaccionado no pueden pasar por esta membrana iónica⁵⁴. De esta manera las cargas son neutralizadas y la reacción puede continuar⁵⁵. En la figura 3 se muestra el principio de funcionamiento básico de una SOFC.

Las pilas de combustible presentan ventaja frente a las baterías debido a que para suministrar potencia lo hacen absorbiendo suministros de combustible de manera constante, permitiendo que el dispositivo opere de forma continua, es decir, la celda tiene la capacidad de producir electricidad mientras está siendo alimentada con combustible y oxidante⁵⁶. En el caso de las baterías estas solo pueden

⁵² MAYÉN, Rodrigo. Celdas de Combustible de Óxido Sólido..... ¿Una de las Soluciones al Problema Energético?, Disponible en revista *Ide@s CONCYTEG*, 6. Junio 2011, p. 647-661

⁵³ *Ibíd.*, p.649

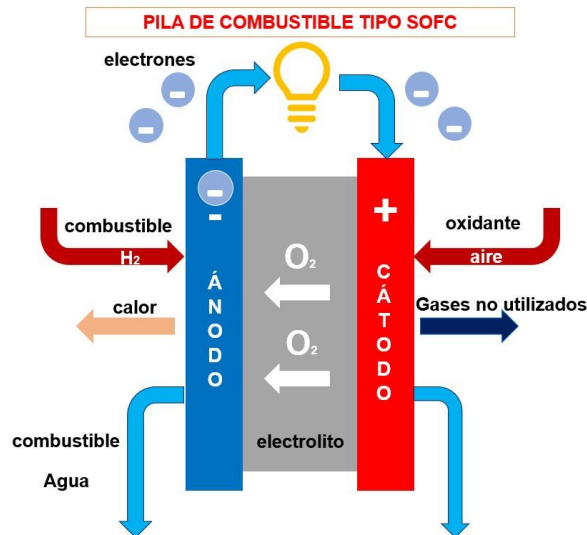
⁵⁴ *Ibíd.*, p.649

⁵⁵ *Ibíd.*, p.649

⁵⁶ *Ibíd.*, p.108-109

suministrar potencia por un tiempo definido, luego se tendrá que recargar o reemplazar⁵⁷.

Figura 3. Funcionamiento pila de combustión SOFC.



Fuente: Energías Renovables. Pilas de combustibles: tipos. En línea <<http://www.energiasrenovablesinfo.com/hidrogeno/pilas-combustibles-tipos/>>. 29 de diciembre, 2014. Mejorada por el autor

La celda de combustible de óxido sólido puede ser operada con $H_{2(g)}$ u otros combustibles como el gas de síntesis⁵⁸. El uso del gas de síntesis resulta conveniente, pues, este combustible sale del proceso de gasificación de la biomasa a una temperatura de $800^{\circ}C$ y la misma temperatura a la cual opera la celda de combustible⁵⁹. Emplear gas de síntesis en la SOFC genera al interior de ella otras reacciones aparte de la reacción electrolytica que es altamente exotérmica, como la reacción wáter gas shift y la de reformado de metano⁶⁰. Estas reacciones se mantienen en la SOFC gracias a la temperatura de operación de la misma y de esta manera producir hidrógeno adicional en la celda⁶¹. La alta temperatura a la que funciona la celda puede afectar la vida útil de los materiales que la componen gracias a los mecanismos de degradación y difusión⁶².

⁵⁷ Ibid., p.108-109

⁵⁸ JUNXI, Jia; ABULITI, Abudula; LIMING, Wei; BAOZHI, Sun; YUE, Shi. Thermodynamic modeling of an integrated biomass gasification and solid oxide fuel cell system, Revista: ScienceDirect, Volumen 81. Septiembre 2015, p. 400-410

⁵⁹ Ibid., p.403

⁶⁰ Ibid., p.403

⁶¹ Ibid., p.403

⁶² MOGNI, L; ESQUIVEL, M; BAQUE, L; MONTENEGRO, A; SERQUIS, A; ARCE, M; CHANQUIA, C; TROIANI, H; NAPOLITANO, F; BASBUS, J; CANEIRO, A. Integración De La Tecnología De Celdas De Óxido Sólido Reversibles A Una Planta Nuclear Para La Producción De Combustible Y

La SOFC tiene una eficiencia eléctrica a 800°C entre 70-80% y si se considera solo el 70-80% de combustible se consume y no se asumen pérdidas del sistema, la eficiencia global de la SOFC está entre 40-50%⁶³.

➤ **Partes de la celda de combustible SOFC.**

✓ **Ánodo.** El ánodo es el electrodo de combustible donde se da la reacción de oxidación, es decir, pierde electrones y aumenta su oxidación.⁶⁴ Es el terminal positivo en contacto con el electrolito⁶⁵.

El ánodo es un electrodo con estructura porosa entre 20-40%, con el fin de favorecer la difusión gaseosa mientras se aumenta la superficie electroactiva⁶⁶. El material más usado para el ánodo está basado en un metal/cerámico llamado Ni-YSZ, donde el Ni es el metal agregado como óxido (NiO) y tiene como función facilitar la conductividad eléctrica⁶⁷. El YSZ es el cerámico zirconia estabilizada con itria y facilita la conductividad iónica⁶⁸.

✓ **Cátodo.** El cátodo es el electrodo en donde se da la reacción de reducción, es decir, gana electrones y de esta forma se da la reducción.⁶⁹

El material más común para el cátodo es el LSM para aumentar la conductividad electrónica. El LSM ($La_{0,65}Sr_{0,30}MnO_3$) la manganita de lantano dopado con estroncio es conocido por ser un material de cátodo clásico para SOFC basados con material de electrolito zirconia (YSZ) debido a su alta conductividad eléctrica, excelente, estabilidad química térmica y compatibilidad con el electrolito a base de óxido de circonio a las temperaturas de trabajo.⁷⁰ Al igual que el electrodo anterior (ánodo) la estructura porosa en el cátodo es de importancia para asegurar una elevada velocidad de transporte de masa de las especies que reaccionan y aumentar la cantidad de sitios activos⁷¹. La mayoría de pérdidas eficiencia por sobrepotenciales en la celda se dan en este electrodo⁷².

Generación Eléctrica. Departamento De Caracterización De Materiales- Centro Atómico Bariloche. Comisión Nacional De Energía Atómica, p. 1-43

⁶³ *Ibíd.*, p.16

⁶⁴ R. WINSTON REVIE; HERBERT H. UHLIG. Corrosion and corrosion control, An Introduction to Corrosion Science and Engineering, cuarta edición. John Wiley & Sons, 2008. Pag. 12

⁶⁵ MORENO VILLANUEVA, José Antonio. La nueva nomenclatura electroquímica y su recepción en español, Revista de Investigación Lingüística, 2017.

⁶⁶ MOGNI, op. Cit, p.10

⁶⁷ *Ibíd.*, p.10

⁶⁸ *Ibíd.*, p.10

⁶⁹ *Ibíd.*, p.12-13

⁷⁰ APARICIO, Mario, JITIANU, Andrei y KLEIN, Lisa C, Sol-gel processing for conventional and alternative energy. Springer Science & Business Media, 2012. 1461419573, p. 16

⁷¹ MOGNI, op. cit, p.10

⁷² *Ibíd.*, p.10

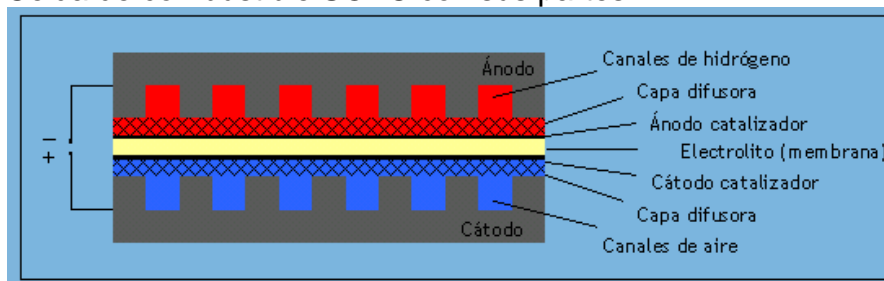
✓ **Electrolito.** El electrolito es un conductor iónico, donde los iones de oxígeno se reducen en el cátodo pasando posteriormente por el electrolito donde se da la reacción electroquímica, hasta el ánodo para combinarse con moléculas de hidrógeno formando agua y otros gases.⁷³

El electrolito separa al cátodo de ánodo, en necesario que esté presente una buena conductividad iónica y conductividad electrónica nula para disminuir las pérdidas de corriente, debe ser denso para que no se mezclen los gases. El material de electrolito más usado es la zirconia estabilizada con itria (YSZ)⁷⁴. El YSZ aumenta la concentración de vacancias de oxígeno, incrementando al tiempo la conductividad iónica⁷⁵.

✓ **Canal de flujo.** En el canal de flujo se distribuye el hidrógeno que entra a la celda mediante en ánodo; y se transporta a hasta el electrolito donde ocurrirá la reacción. Limita con el cátodo o ánodo para el agente oxidante o reductor respectivamente⁷⁶.

Un canal de combustible directamente orientado hacia el ánodo, un conjunto de canales oxidantes directamente enfrentados a él cátodo, y una interconexión que conecta el cátodo de la celda con el ánodo de la siguiente celda en series eléctricas, para aumentar la tensión⁷⁷. En la figura 4 se describen las partes de una SOFC.

Figura 4. Celda de combustible SOFC con sus partes.



FUENTE: (ANS), FUEL CELL NORWAY. Componentes. 2006.

❖ **Canal de flujo del gas de síntesis.** En el canal de flujo del combustible se transporta el hidrógeno o el gas de síntesis, este canal está directamente enfrentado a él ánodo⁷⁸. Este canal hace posible la interacción entre el fluido y el

⁷³ APARICIO, MARIO, JITIANU, ANDREI y KLEIN, LISA C. Sol-gel processing for conventional and alternative energy. Springer Science & Business Media, 2012. 1461419573

⁷⁴ MOGNI, op. cit, p. 9

⁷⁵ *Ibíd.*, p. 9

⁷⁶ GONZÁLEZ HUERTA, R. G., LÓPEZ CHÁVEZ, E. y VELÁZQUEZ MORALES, B. Hidrógeno: Introducción a la energía limpia. En: Universidad Autónoma de la Ciudad de México, México. 2009. P. 108

⁷⁷ *Ibíd.* p. 108

⁷⁸ PETRUZZI, L., COCCHI, S. y FINESCHI, F. A global thermo-electrochemical model for SOFC systems design and engineering. En: Journal of Power Sources. 2003. vol. 118, no. 1-2, p. 96-107

electrolito donde se da la reacción electroquímica⁷⁹. En el canal de flujo se presentan las reacciones de desplazamiento de agua y reformado de hidrocarburos debido a las altas temperaturas⁸⁰.

❖ **Canal de flujo del agente oxidante.** El canal de flujo del agente oxidante es donde fluye el fluido que aportará al sistema el oxígeno, dicho canal está entre el electrolito y el cátodo donde el oxígeno inicia la disociación⁸¹.

1.6 GEOMETRÍA DE UNA SOFC

Las Celdas de Óxido Sólido tienen diferentes geometrías para su fabricación, esto se da gracias a la ausencia de componentes líquidos en el dispositivo, las diferentes geometrías mejoran el comportamiento y compactación de la SOFC⁸².

Las dos configuraciones geométricas de las Celdas de Óxido Sólido (SOFC) más utilizadas son la planar y la tubular⁸³. “La configuración planar consiste en un apilamiento de monoceldas de geometría plana en una estructura de separadores e interconectores”⁸⁴ haciendo factible la circulación de gases y las conexiones eléctricas de los terminales de cada una de las unidades con las demás series⁸⁵.

Este tipo de configuración tiene la ventaja de que la conexión en serie entre las celdas se da al interior previniendo así pérdidas de carga y presenta problemas con el sellado de gas entre las láminas por las que está compuesta la celda⁸⁶. La figura 5 ilustra una celda con este tipo de configuración.

⁷⁹ Ibid. p. 98.

⁸⁰ Ibid., p. 98.

⁸¹ VYAS, GAYATRI, ELHAMID, MAHMOUD ABD y TRABOLD, THOMAS. Stable conductive and hydrophilic fuel cell contact element. Google Patents 2007.

⁸² GRAÑA MAGARIÑOS, JUAN JOSÉ. Pilas de Combustible de Óxidos Sólidos para Generación Distribuida de Electricidad. Publicado en revista: PublicacionesDidacticas, Mayo 2015. Pág. 47

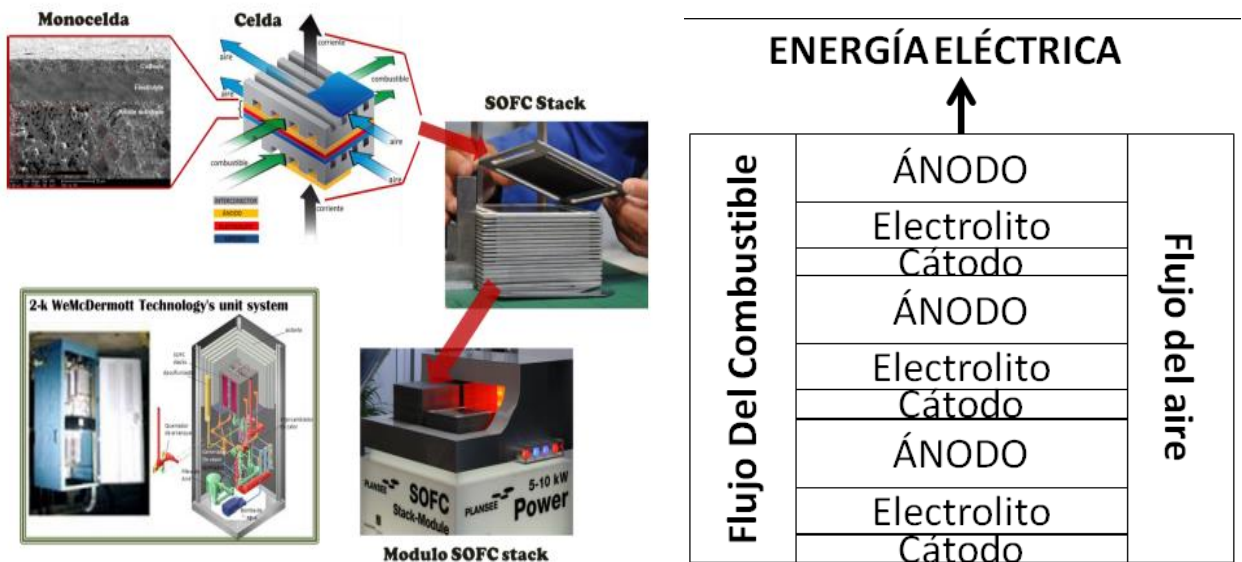
⁸³ Ibid., p. 47-48.

⁸⁴ MOGNI, L.*, ESQUIVEL, M., BAQUE. Integración de la tecnología de celdas de óxido sólido reversibles a una planta nuclear para la producción de combustible y generación eléctrica, Departamento de Caracterización de Materiales- Centro Atómico Bariloche. Comisión Nacional de Energía Atómica. Pág. 13.

⁸⁵ Ibid., p. 13.

⁸⁶ Ibid., p. 13.

Figura 5. Celda SOFC usando celdas en configuración planar.



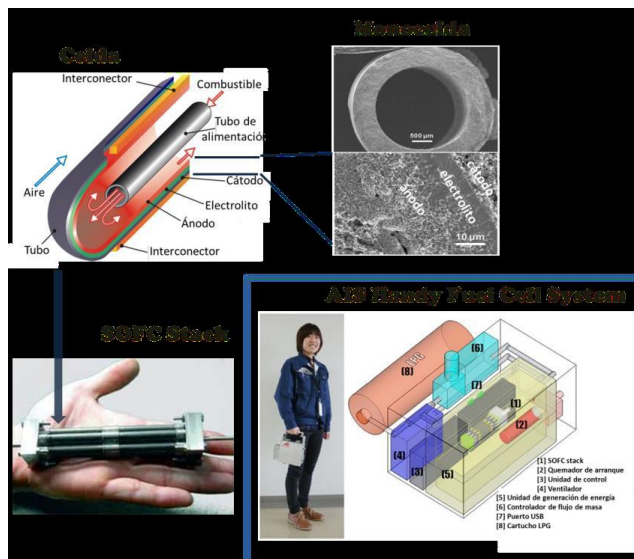
FUENTE: MOGNI, L.*, ESQUIVEL, M., BAQUE. Integración de la tecnología de celdas de óxido sólido reversibles a una planta nuclear para la producción de combustible y generación eléctrica, Departamento de Caracterización de Materiales- Centro Atómico Bariloche. Comisión Nacional de Energía Atómica. Pág. 14.

La configuración tubular tiene la forma de cilindros con huecos donde sus paredes están conformadas por los dos electrodos (cátodo y ánodo) y entre ellos se encuentra el electrolito, esto asegura que el gas se mantenga o no se escurra por los conductos en donde circula, los tubos se agrupan por medio de conexiones internas se ponen en placas metálicas las cuales actúan como colectores de la corriente generada por los tubos⁸⁷. La configuración tubular presenta pérdidas de carga mayores que la configuración planar, debido a que sus conexiones son externas⁸⁸. La figura 6 ilustra la configuración tubular de una SOFC.

⁸⁷ *Ibíd.*, p. 13.

⁸⁸ GRAÑA MAGARIÑOS, JUAN JOSÉ. Pilas de Combustible de Óxidos Sólidos para Generación Distribuida de Electricidad. Publicado en revista: PublicacionesDidacticas, Mayo 2015. Pág. 47.

Figura 6. Conformación de una celda SOFC usando celdas en configuración tubular.



FUENTE: MOGNI, L.*, ESQUIVEL, M., BAQUE. Integración de la tecnología de celdas de óxido sólido reversibles a una planta nuclear para la producción de combustible y generación eléctrica, Departamento de Caracterización de Materiales- Centro Atómico Bariloche. Comisión Nacional de Energía Atómica. Pág. 13

1.7 LEY DE FARADAY

La ley de Faraday establece que la masa de un compuesto que ingresa a una celda electroquímica, como la celda de combustible de Óxido Sólido es dependiente y directamente proporcional con la cantidad de carga eléctrica que transita por la celda producida por las reacciones de oxidación y reducción que se dan al interior de la misma⁸⁹.

Por otro lado la ley de Faraday afirma que la masa disuelta o depositada es proporcional al producto $I * t$, o sea a la cantidad de electricidad (Q).

$$m = k * Q \quad \text{Ecuación 1.}$$

Donde K es considerado una constante de proporcionalidad⁹⁰.

La cantidad de electricidad que se necesita para un equivalente de una sustancia se calcula de la siguiente manera

$$Eq = K * F \quad \text{Ecuación 2.}$$

⁸⁹ POSADA, Dionisio. Introducción a la electroquímica, Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA). La Plata, ARGENTINA. 1980, p. 25-28.

⁹⁰ *Ibíd.*, p. 26

Donde Eq es el peso equivalente de la sustancia⁹¹. Al reemplazar la ecuación 10 en la 9. Queda de la siguiente manera

$$m = \frac{Eq}{F} * Q \quad \text{Ecuación 3.}$$

Donde F es la constante universal de faraday.⁹² El equivalente electrónico de la sustancia se expresa a continuación

$$Eq = \frac{M}{n} \quad \text{Ecuación 4.}$$

Donde M es el peso molecular y n la valencia, Finalmente se reemplaza la ecuación 12 y Q en la ecuación 11⁹³.

$$m = \frac{J*t}{F} * \frac{M}{n} \quad \text{Ecuación 5.}$$

1.8 LEY DE OHM

En los circuitos se relacionan el voltaje, la corriente y la resistencia, a estas relaciones se les denomina ley de ohm, donde; el voltaje que se necesita para una intensidad de corriente en el circuito es equivalente a la corriente y resistencia del circuito producida⁹⁴. Como se ilustra a continuación

Ecuación 6. Ley de ohm

$$V = J * R$$

Donde, V es el voltaje, I es la intensidad la cual en la celda de combustible SOFC es denominada densidad de la corriente y por último R que es equivalente a la resistencia del circuito al interior de la celda⁹⁵.

1.9 CURVA DE POLARIZACIÓN

La curva de polarización es una representación gráfica de la relación entre corriente y potencial, este tipo de relación es de gran importancia puesto que permite constituir el mecanismo electroquímico del proceso en el electrodo que se está estudiando⁹⁶. Una curva de polarización es la media estándar de la eficiencia o desempeño de una celda de combustible de Óxido Sólido, donde se incluye la

⁹¹ *Ibíd.*, p. 26

⁹² *Ibíd.*, p. 26

⁹³ *Ibíd.*, p. 26

⁹⁴ BUBAN, Peter, AND MARSHALL L. SCHMITT. Electricidad y electrónica básicas: conceptos y aplicaciones, McGraw-Hill Interamericana, 1983. ProQuest Ebook Central.

⁹⁵ *Ibíd.*, p. 73.

⁹⁶ POSADA, Dionisio. Introducción a la electroquímica, Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA). La Plata, ARGENTINA. 1980, p. 29-30.

información de las transferencias de resistencias óhmica, concentración y cinética, este coeficiente de transferencia se obtiene de la pendiente de Tafel de las curvas de polarización y es de gran importancia para la reacción electroquímica, debido a que hace posible la valorar el mecanismo de reducción y oxidación de la reacción⁹⁷.

El voltaje de salida de la celda incluye los sobrepotenciales de activación, óhmicas y concentración, como se ilustra en la siguiente ecuación:

Ecuación 7. Voltaje de la celda

$$V_{cell} = V_{Nernst} - \Delta V_{act} - \Delta V_{conc} - \Delta V_{ohmic}$$

Se usa la ecuación de Nernst en la celda de combustible de Óxido Sólido ya que esta es considerada un circuito abierto⁹⁸.

Ecuación 8. Nernst

$$V_{Nernst} = \frac{\Delta G}{2F} + \frac{RT}{2F} \ln \left(\frac{y_{O_2}^{0.5} y_{H_2}}{y_{H_2O}} \right)$$

El sobrepotencial de activación se describe con la ecuación de Butler-Volmer y tiene relación con el electrodo lento, el sobrepotencial o pérdida óhmica se da gracias a la resistencia al flujo de iones por el electrolito y electrones conductores por toda la celda y la pérdida de concentración tiene presencia en el momento en el que los reactivos se consumen de forma acelerada en el electrodo debido a la reacción electroquímica, y así tienen lugar los gradientes de concentración⁹⁹. Todas la ecuaciones de encuentran expresadas posteriormente¹⁰⁰.

Sin embargo las pérdidas de concentración, óhmicas y de activación no son las únicas presentes al interior de la celda, también se encuentran las pérdidas de corriente causadas por la permeación de hidrógeno y cruce de electrones las cuales se desprecian si el valor de la densidad de la corriente externa es de cero¹⁰¹.

⁹⁷ VALERY A. DANILOV; MOSES O.TADE. A New Technique Of Estimating Anodic And Cathodic Charge Transfer Coefficients From SOFC Polarization Curves. Published By Elsevier Ltd. 2009

⁹⁸ *Ibíd.*, p. 7.

⁹⁹ *Ibíd.*, p.7

¹⁰⁰ DONG Hao; JIANPING Shen; YONGPING, Hou; YI, Zhou; HONG Wang. An Improved Empirical Fuel Cell Polarization Curve Model Based on Review Analysis, International Journal of Chemical Engineering, Volume 2016 (2016), p. 10

¹⁰¹ *Ibíd.*, p.7

1.10 SOBREPOTENCIALES

Las sobrepotenciales o polarizaciones ocasionan pérdidas de voltaje de Nernst y representan un impacto poco favorable para la eficiencia de la celda de combustible de Óxido Sólido (SOFC)¹⁰². Se conocen tres polarizaciones las cuales son; pérdida de activación (ΔV_{act}), Pérdida óhmica (ΔV_{ohm}) y Pérdida de concentración (ΔV_{con})¹⁰³.

1.10.1 Pérdida de Activación

Este sobrepotencial se da en los electrodos y tiene relación con la caída de voltaje mínima para pasar la energía de activación de las reacciones que forman hidrógeno e iones de oxígeno, donde la pérdida de activación se determina por medio de la ecuación de Butler-Volmer para cada uno de los electrodos¹⁰⁴.

Ecuación 9. Butler-Volmer

$$J = J_0 \left\{ \exp \left(\alpha_a \frac{n_e F \Delta V_{act}}{RT} \right) - \exp \left(\alpha_c \frac{n_e F \Delta V_{act}}{RT} \right) \right\}$$

Dónde:

J : Densidad de corriente del electrodo, A / m²

J_0 : Densidad de corriente de intercambio, A / m²

α_a : Coeficientes de transferencia de carga anódica.

α_c : Coeficientes de transferencia de carga catódica.

n_e : Número de electrones.

F : Constante de Faraday.

ΔV_{act} : Pérdida de activación.

R : Constante de gas universal.

T : Temperatura absoluta, K.

Los α_a y α_c están “relacionados con la respuesta relativa de la densidad de la corriente en cada electrodo a un cambio en el potencial de activación”¹⁰⁵. Los coeficientes de transferencia de carga son considerados simétricos y con un valor igual a 0,5 para las reacciones de transferencia de carga de un único electrón¹⁰⁶. Por ende la ecuación 9 puede simplificarse de la siguiente manera:

Ecuación 10.

$$J = 2i_0 \sinh \left(\frac{n_e F \Delta V_{act}}{RT} \right)$$

¹⁰² D, SÁNCHEZ; R, CHACARTEGUI; A, MUÑOZ; T, SÁNCHEZ. Thermal and electrochemical model of internal reforming solid oxide fuel cells with tubular geometry, Disponible en ScienceDirect, ELSEVIER. Volume 160, Issue 2, 6 October 2006, Pages 1079.

¹⁰³ *Ibíd.*, p.1079

¹⁰⁴ *Ibíd.*, p.1080

¹⁰⁵ *Ibíd.*, p. 1080.

¹⁰⁶ *Ibíd.*, p. 1080.

La Ecuación 10. Se simplifica suponiendo que el ΔV_{act} es elevado, y se puede implementar la ecuación 11 Tafel, o la ecuación 12 Lineal baja. Las cuales se expresan a continuación¹⁰⁷.

$$\Delta V_{act} = a + b \ln(i) \quad \text{Ecuación 11.}$$

$$\Delta V_{act} = \frac{RT}{n_e F J_0} J \quad \text{Ecuación 12.}$$

El ΔV_{act} es considerado bajo si se cumple la siguiente condición:

$$\frac{F \Delta V_{act}}{n_e RT} < 1 \quad \text{Ecuación 13.}$$

A pesar de esto la simetría de los α_a y α_c no es precisa, la única forma de determinar a los coeficientes es realizando pruebas y aun no se tiene la certeza de que los coeficientes de transferencia son constantes en la celda de combustible de Óxido Sólido (SOFC)¹⁰⁸.

Por otra parte la densidad de la corriente de intercambio (i_0) tiene relación con la i_0 de ida y de vuelta cuando llega al equilibrio, aunque este valor no es fácil de encontrar, hay reacciones adecuadas para el cátodo (Eq. 14.) y el ánodo (Eq. 15.)¹⁰⁹.

Ecuación 14. Densidad de corriente de intercambio para el cátodo

$$J_{0,c} = \gamma_c \left(\frac{P_{O_2}}{P_{ref}} \right)^c \exp \left(- \frac{E_{act,c}}{RT} \right)$$

Ecuación 15. Densidad de corriente de intercambio para el ánodo

$$J_{0,a} = \gamma_a \left(\frac{P_{H_2}}{P_{ref}} \right)^a \left(\frac{P_{H_2}}{P_{ref}} \right)^b \exp \left(- \frac{E_{act,a}}{RT} \right)$$

La densidad de la corriente de intercambio tiene valores elevados en el momento en el que la velocidad de reacción del ánodo y del cátodo es rápida acercándose a una reacción reversible, dando como resultados valores de densidad de corriente

¹⁰⁷ Ibíd., p.1080

¹⁰⁸ Ibíd., p.1080

¹⁰⁹ Ibíd., p.1080

grandes con un bajo sobrepotencial¹¹⁰. Para llegar al valor del i_0 se debe tener en cuenta la composición de los reactivos y productos usados para las reacciones electroquímicas, factores como; presión, temperatura y tipo de materia del electrolito y los electrodos (cátodo y ánodo)¹¹¹.

1.10.2. Pérdida óhmica. La pérdida óhmica es el sobrepotencial ocasionado por el flujo de la carga eléctrica por medio de los electrodos y el electrolito¹¹². El cual está definido por:

Ecuación 16. Pérdida óhmica

$$\Delta V_{ohm} = JR_{total}$$

Donde R_{total} es una resistencia eléctrica efectiva parecida a la de la organización de la celda, es decir, la formada por el electrolito, electrodos y placas de interconexión¹¹³. Por la dificultad de evaluar la resistencia equivalente en el interior del canal de flujo de la celda es necesario tener en cuenta una dependencia de las temperaturas de las resistividades electrónicas / iónicas las cuales no se tuvieron en cuenta en la ecuación 13, donde la dependencia es tomada como referencia y se refleja en la ecuación 17:

$$\rho_i(T) = \frac{T}{A} \exp\left(\frac{B}{T}\right) \quad \text{Ecuación 17.}$$

Donde A y B dependen del tipo de material¹¹⁴.

1.10.3. Pérdida de concentración. Este sobrepotencial tiene relación con la velocidad a la que la especie al interior de los electrodos porosos llega a la difusión, es decir que el diseño de los electrodos tienen dos propósitos importantes; inicialmente los electrodos deben tener una capa delgada, donde las especies se difunden, así la reacción de oxidación de hidrógeno será más rápida y la densidad de la corriente de la célula será mayor¹¹⁵. Por otra parte el espesor del electrodo debe tener un límite inferior establecido por la disponibilidad de las técnicas de fabricación y la forma en la que se opera la celda interviene de manera notable en la pérdida de concentración¹¹⁶.

¹¹⁰ AMEDI, HAMID REZA; BAZOOYAR, BAHAMIN Y PISHVAIE, MAHMOUD REZA. Control of anode supported SOFCs (solid oxide fuel cells): Part I. mathematical modeling and state estimation within one cell. En: Energy. vol. 90, p. 605-621

¹¹¹ *Ibíd.*, p. 615

¹¹² D, SÁNCHEZ; R, CHACARTEGUI; A, MUÑOZ; T, SÁNCHEZ. *Óp. cit.*, 1080.

¹¹³ *Ibíd.*, p. 1080.

¹¹⁴ *Ibíd.*, p. 1080.

¹¹⁵ *Ibíd.*, p. 1080-1081

¹¹⁶ *Ibíd.*, p. 1081

Los gradientes de concentración entre los sitios activos y el flujo granel son los causantes de los flujos de especie de los electrodos, debido a esto, cuando algún reactivo se está agotando se controla el rendimiento de la célula mediante un proceso de difusión un poco más lento, llevando consigo un aumento en la caída de tensión¹¹⁷. El aumento en la caída de tensión antes nombrado también puede aparecer si uno de los reactivos está cerca de llegar al 100% en su conversión, por otra parte una elevada densidad de corriente también puede aumentar la caída de tensión¹¹⁸.

La pérdida de concentración puede ser evaluada de la siguiente manera:

Ecuación 18. Pérdida por concentración

$$\Delta V_{con} = \frac{RT}{n_e F} \ln \left(\frac{p_{H_2}^* p_{H_2O}^0}{p_{H_2}^0 p_{H_2O}^*} \right) + \frac{RT}{n_e F} \ln \left(\frac{p_{O_2}^*}{p_{O_2}^0} \right)$$

Donde “0” y “*” simbolizan las propiedades en el flujo masivo libre y los sitios activos, respectivamente, si el valor de las pérdidas de concentración es conocido se relaciona las propiedades de flujo libre con las de los sitios activos¹¹⁹. Las concentraciones en los sitios activos y flujo libre son evaluadas usando las leyes de Fick, donde es necesario desarrollar coeficientes adecuados de difusión¹²⁰. Calcular los coeficientes de difusión de los gases que se encuentran en el canal de flujo anódico o catódico es complicado, debido a que los datos experimentales expuestos en la literatura son escasos para temperaturas elevadas¹²¹.

Se conocen distintos métodos denominados semiempíricos para encontrar el valor de los coeficientes de difusión de los gases de manera adecuada como; El método de Lennard Jones para coeficiente binarios, el método de Todd y Young el cual presenta desviaciones en los resultados experimentales cuando se opera a elevadas temperaturas, a diferencia del método de Fuller et al el cual tiene mayor exactitud en condiciones de temperatura altas a la cual trabaja la celda SOFC¹²².

Las siguientes ecuaciones son el resultado de aplicar las leyes de Fick en las ecuaciones 14 y 15, las cuales simbolizan el sobrepotencial de concentración del cátodo y ánodo, respectivamente

¹¹⁷ *Ibíd.*, p. 1081

¹¹⁸ *Ibíd.*, p. 1081

¹¹⁹ *Ibíd.*, p. 1081

¹²⁰ *Ibíd.*, p. 1081

¹²¹ *Ibíd.*, p. 1081.

¹²² PETRUZZI, L.; COCCHI, S. y FINESCHI, F. A global thermo-electrochemical model for SOFC systems design and engineering. En: *Journal of Power Sources*. vol. 118, no. 1, p. 96-107

Ecuación 19. Pérdida por concentración en el cátodo

$$\Delta V_{con,c} = \frac{RT}{n_e F} \ln \left(\frac{1}{x_{O_2}^0} - \left(\frac{1}{x_{O_2}^0} - 1 \right) \exp \left(\frac{JRTc}{2n_e F D_{eff,c} p} \right) \right)$$

Ecuación 20. Pérdida por concentración en el ánodo

$$\Delta V_{con,a} = \frac{RT}{n_e F} \ln \left(\frac{1 - \frac{JRTa}{2n_e F D_{eff} P_{H_2}^{Canal}}}{1 + \frac{JRTa}{2n_e F D_{eff} P_{H_2O}^{Canal}}} \right)$$

Dónde:

D_{eff} : coeficiente efectivo de difusión ($m^2 s^{-1}$)

J : Densidad de la corriente

P : Presión parcial del componente x

F : constante de Faraday (C/mol).

Debido a que el aporte del cátodo en las pérdidas de concentración es mínimo, se puede despreciar ya que su espesor es de 50 μm aprox. y es considerado pequeño en comparación con el ánodo¹²³.

1.11 REACCIONES

Las reacciones químicas con mayor importancia que se producen al interior de la celda son las reacciones de conversión, descomposición, desplazamiento y disociación; las reacciones se dan según el tipo de combustible utilizado en el dispositivo, como se mencionó anteriormente en este estudio el combustible utilizado es el gas de síntesis obtenido en la gasificación de la biomasa, este tipo de dispositivos tiene una selectividad por el hidrógeno como combustible debido a su reactividad, la cual facilita la conversión de energía^{124 125}. Las reacciones de reformado de hidrocarburos y desplazamiento del agua se dan en el canal de flujo de la celda combustible SOFC a causa del tipo de combustible que se es empleado, existen cuatro reacciones que se dan comúnmente en la celda¹²⁶. Las cuales se ilustran en la tabla 6.

¹²³ PETRUZZI, L.; COCCHI, S. y FINESCHI, F. A global thermo-electrochemical model for SOFC systems design and engineering. En: Journal of Power Sources. vol. 118, no. 1, p. 96-107

¹²⁴ GRAÑA MAGARIÑOS, JUAN JOSÉ. Pilas de Combustible de Óxidos Sólidos para Generación Distribuida de Electricidad. Publicado en revista: PublicacionesDidacticas, Mayo 2015. Pag. 44

¹²⁵ KOH, Joon-Ho, et al. Thermodynamic analysis of carbon deposition and electrochemical oxidation of methane for SOFC anodes. En: Electrochemical and Solid-State Letters. vol. 4, no. 2, p. A15

¹²⁶ *Ibid.*, p. 53.

Tabla 6. Reacciones Químicas.¹²⁷

Nombre	Reacción
Reacción de conversión	$H_2 + \frac{1}{2} O_2 \rightarrow H_2O$
Reacción de descomposición	$CH_4 + H_2O \rightarrow 3H_2 + CO$
Reacción de desplazamiento	$CO + H_2O \rightarrow H_2 + CO_2$
Reacción de disociación	$CH_4 \rightarrow C + 2H_2$ $2CO \rightarrow C + CO_2$

La reacción de conversión conlleva a la obtención de la energía eléctrica, teniendo como reactivo el combustible empleado en la pila de combustible de óxido sólido (SOFC) el cual puede ser hidrógeno como se ilustra en la tabla 4¹²⁸. Las reacciones de descomposición o reformado de hidrocarburos aumenta la concentración de hidrógeno en la celda, las reacciones de desplazamiento aporta de igual forma a la concentración de hidrógeno, teniendo el monóxido de carbono como reactivo¹²⁹.

Las reacciones de disociación se deben evitar, puesto que el carbono presente en la reacción como producto de la misma es un compuesto que depositándose sobre este perjudica el catalizador, bloqueando y provocando fallos en su funcionamiento¹³⁰.

1.11.1 Reacción electrolítica. La reacción electrolítica en la celda de combustible de óxido sólido (SOFC), es donde se oxida en hidrógeno regalando electrones en el ánodo, los cuales circulan por medio del circuito externo al cátodo y en el cátodo se da la reacción donde se reduce el oxígeno¹³¹. Las reacciones antes mencionadas se ilustran a continuación en la tabla 7.

¹²⁷ GRAÑA MAGARIÑOS, JUAN JOSÉ, Op. cit., p. 45.

¹²⁸ Ibid., p. 45.

¹²⁹ Ibid., p. 45.

¹³⁰ Ibid., p. 45.

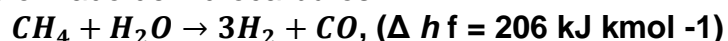
¹³¹ Ibid., p. 46.

Tabla 7. Reacciones electrolíticas.

Nombre	Reacción
Anódica (Oxidación)	$H_2 \rightarrow 2H$ $2H + 2OH^- \rightarrow 2H_2O + 2e^-$
Catódica (Reducción)	$O_2 + 2H_2O + 4e^- \rightarrow 4OH^-$
Reacción electrolítica (RedOx)	$H_2 + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow H_2O$

1.11.2 Reformado de hidrocarburos. La reacción de reformado de hidrocarburos se da al interior de la celda de combustible de óxido sólido (SOFC), con exactitud al interior del canal de flujo de la celda cuando la corriente de metano está en contacto con otra compuesta por una elevada composición de vapor de agua que puede llegar a ser del 50%, tiene lugar la reacción de reformado de metano o hidrocarburos¹³².

Ecuación 7. Reformado de hidrocarburos.



La ecuación anterior se especifica el proceso de reformado de hidrocarburos, y debido a que es una reacción endotérmica se ajusta a las altas temperaturas y a la presencia de calor¹³³. El vapor de agua necesario para que se dé la reacción de reformado de hidrocarburos se produce en el momento en el que el hidrógeno se oxida en la reacción de conversión como se ilustra en la siguiente ecuación la cual es exotérmica¹³⁴.

La reacción de reformado de hidrocarburos también está presente en el proceso de gasificación donde se obtiene el gas de síntesis¹³⁵.

¹³² D, SÁNCHEZ; R, CHACARTEGUI; A, MUÑOZ; T, SÁNCHEZ. Thermal and electrochemical model of internal reforming solid oxide fuel cells with tubular geometry, Disponible en ScienceDirect, ELSEVIER. Vol. 160, Issue 2, 6 October 2006, Pages 1074-1087.

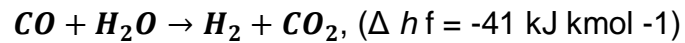
¹³³ *Ibíd.*, p. 1076.

¹³⁴ *Ibíd.*, p. 1076.

¹³⁵ DIMITRIJEWITS, M. I., et al. Reformado de metano con CO₂ sobre catalizadores de níquel: efectos de la técnica de preparación. En: Boletín De La Sociedad Chilena De Química. vol. 46, no. 1, p. 65-75

1.11.3 Desplazamiento del agua (Water gas Shift reaction). La reacción de desplazamiento del agua (Water gas Shift reaction) se da gracias al monóxido de carbono como subproducto en la reacción de reformado de hidrocarburos, donde si aún hay presencia de la corriente de vapor de agua de oxida y pasa a dióxido de carbono, en la reacción de desplazamiento del agua produciendo más hidrógeno¹³⁶.

Ecuación 8. Desplazamiento del agua (Water gas Shift reaction)



Esta reacción es exotérmica y tiene lugar en el interior de la celda de combustible SOFC, exactamente en el canal de flujo anódico de la misma forma que la reacción de reformado de hidrocarburos antes nombrada, esto se da por la presencia de la corriente de vapor con una elevada concentración y a la temperatura en la que opera la celda¹³⁷.

¹³⁶ D, SÁNCHEZ; R, CHACARTEGUI; A, MUÑOZ; T, SÁNCHEZ, Óp. cit., p. 1077.

¹³⁷ *Ibíd.*, p. 1077.

2. PARÁMETROS DE ESTUDIO

Desarrollar el modelo matemático implica definir y explicar el fenómeno que ocurre al interior de la SOFC. Se deben definir las propiedades que se mantienen constantes en el caso de estudio, las condiciones y parámetros iniciales y de esta manera facilitar la solución del desarrollo del modelo matemático.

Los parámetros y condiciones nombradas a continuación son los mismos establecidos en el trabajo de grado “ANÁLISIS DEL MODELO MATEMÁTICO DE UNA CELDA DE COMBUSTIBLE DE ÓXIDO SÓLIDO (SOFC) EMPLEANDO COMO COMBUSTIBLE EL GAS DE SÍNTESIS, PRODUCIDO EN LA GASIFICACIÓN DE LA BIOMASA” de Sergio Alejandro Fuquene y Laura Tatiana López.

Las variables parametrizadas en dicho trabajo de grado son: la velocidad de los fluidos (aire y gas de alimentación), temperatura de entrada y la composición del gas de alimentación. Estas variables son establecidas porque son los datos de la corriente de alimentación de la celda de combustible, la cual da inicio al modelamiento matemático. Las condiciones iniciales establecidas son los datos básicos.

Para hacer que la convergencia del modelo sea posible se deben tener en cuenta otras propiedades, con estas se puede realizar la descripción del fenómeno al interior de la celda. Las propiedades establecidas en el trabajo de grado de Sergio Fuquene y Tatiana López son: adecuada elección de materiales, distribución geométrica, y variables respuestas (potencial eléctrico generado y perfiles térmicos) haciendo posible la ejecución y el análisis del modelo matemático para justificar el desarrollo experimental de la celda modelada.

2.1 NUMERO DE GRADOS DE LIBERTAD

El análisis de los grados de libertad se realiza teniendo en cuenta las ecuaciones y variables conocidas que se usarán en el desarrollo del modelo matemático. Se determinó que las ecuaciones a utilizar en los grados de libertad son: la ecuación de perfil de difusividad, la ecuación de Nernst y la ecuación de la curva de polarización. La variable a utilizar es la composición en el canal de flujo, quedando con un valor de los grados de libertad igual a 2, como se demuestra en la ecuación 29.

Ecuación 21. Numero de Grados de libertad

$$\begin{aligned} NGL &= \text{Ecuaciones} - \text{Variables} \\ &= (\text{ecuación del perfil} + \text{Ecuación de Nernst} \\ &+ \text{Ecuación curva de polarización} - y_{\text{canal de flujo}} = 2 \end{aligned}$$

Como los grados de libertad son iguales a 2 se deben determinar dos variables más, por esta razón se determinan dos variables más, siendo la densidad de corriente y la longitud de la densidad de corriente las variables faltantes, así el modelo ya se puede solucionar y el número de grados de libertad es igual a 0.

2.2 TEMPERATURA

Las SOFC tienen un rango de temperatura de operación que va desde 500 a 1000°C y se pueden clasificar según su nivel de temperatura como se encuentra descrito en la tabla 8¹³⁸.

Tabla 8. Clasificación según su nivel de T (°C)

Criterios de clasificación	Tipos
Nivel de temperatura	1. SOFC de baja temperatura (LT-SOFC) (500-650°C) 2. Temperatura intermedia SOFC (IT-SOFC) (650-800°C) 3. SOFC de alta temperatura (HT-SOFC) (800-1000°C)

FUENTE: OZGUR COLPAN, C; DINCER, Ibrahim; HAMDULLAHPUR, Feridun. Thermodynamic Modeling Of Direct Internal Reforming Solid Oxide Fuel Cells Operating With Syngas, Publicado En: International Journal Of Hydrogen Energy 32. 2017, Disponible en: ScienceDirect, p. 787-795. Adaptado por el Autor.

Las SOFC que operan a altas temperaturas hacen posible la integración térmica con ciclos de desgaste exitosa¹³⁹. Los estudios que se encuentran disponibles en la literatura para la SOFC de alta temperatura son en su mayoría investigan la integración de la celda con gasificadores o turbinas de gas¹⁴⁰¹⁴¹.

La temperatura es asumida como constante durante toda la operación de la celda para este estudio, pero en realidad esta experimenta cambios al interior de la celda. El valor de la temperatura tiene un rango óptimo para modelar los datos, pero se debe determinar un valor para que el método pueda llegar a la convergencia.

¹³⁸ OZGUR COLPAN, C; DINCER, Ibrahim; HAMDULLAHPUR, Feridun. Thermodynamic Modeling Of Direct Internal Reforming Solid Oxide Fuel Cells Operating With Syngas, Publicado En: International Journal Of Hydrogen Energy 32. 2017, Disponible en: ScienceDirect, p. 787-795

¹³⁹ Ibid., p. 787-795

¹⁴⁰ KIVISAARI, P; BJÖRNBOM, C; SYLWAN, B; JACQUINOT, D; JANSEN, A. The Feasibility Of A Coal Gasifier Combined With A High-Temperature Fuel Cell, Disponible en: ScienceDirect (2004), p. 167-180

¹⁴¹ PALSSON, A. SELIMOVIC, L. SJUNNESSON. Combined Solid Oxide Fuel Cell And Gas Turbine Systems For Efficient Power And Heat Generation, Disponible en: ScienceDirect, 86 (2000), p. 442-448

2.3 PRESIÓN

La presión de la celda de combustible de Óxido Sólido se determina teniendo en cuenta que el modelamiento de la celda se va a realizar con un fluido ideal en los canales de flujo, es decir que la presión debe ser baja y la temperatura elevada, por ende la presión de operación de la celda será igual a la presión atmosférica¹⁴². Manejar una presión atmosférica en todo el sistema facilita el cálculo de los perfiles de composición, la convergencia y obtención de los resultados del modelamiento matemático de la celda de combustible de Óxido Sólido.

2.4 FLUJO VOLUMETRICO

La velocidad del flujo en las SOFC está determinada por el gasificador de donde proviene el gas de síntesis que ingresa como combustible a la celda, está es la principal condición para determinar el valor del flujo volumétrico que será usado en el modelo matemático¹⁴³. El valor del flujo volumétrico tiene dependencia con la relación de transferencia de masa en el electrodo, debido a que el potencial electroquímico es generado por la cantidad de combustible que se usa en la celda¹⁴⁴.

2.5 MATERIALES

Los materiales para los componentes (ánodo, cátodo y electrolito) de la celda deben cumplir requisitos para que el funcionamiento de cada de una de estas partes sea adecuado¹⁴⁵. Los materiales deben asegurar que los requisitos de cada componente se cumplen como: estabilidad adecuada (química, fase, morfología y dimensión), conductividad, expansión térmica muy parecida para evitar agrietamientos de los componentes mientras la celda opera, electrolito denso con el fin de evitar mezclas de gases), electrodos porosos para hacer posible el paso del gas al sitio de reacción, alta resistencia y dureza, resistencia a temperaturas elevadas, bajo costo.

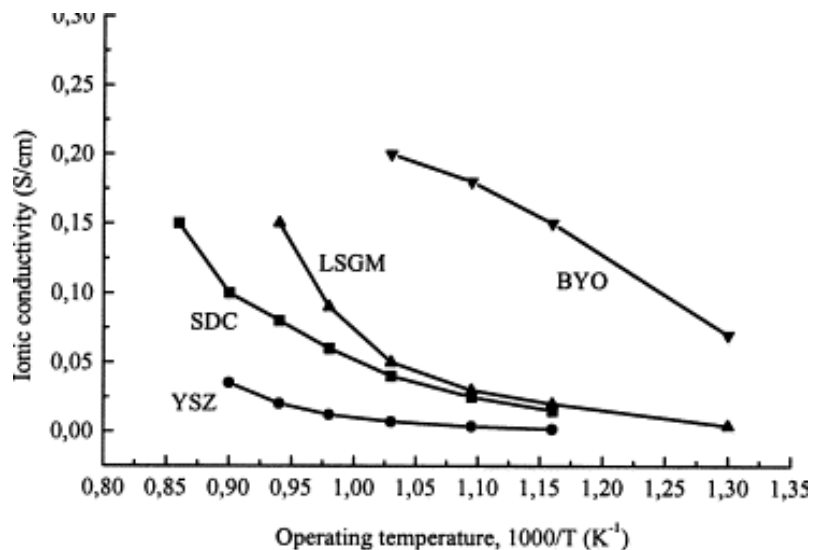
¹⁴² THINH X, Ho. Dynamic Characteristics of a Solid Oxide Fuel Cell with Direct Internal Reforming Methane. Disponible en: ScienceDirect, Volumen 113, 1 de abril de 2016, p. 44-51

¹⁴⁴ *Ibíd.*, p. 44-51

¹⁴⁵ BOUDGHENE STAMBOULI, A; TRAVERSA, E. Solid Oxide Fuel Cells (SOFCs): A Review of an Environmentally Clean and Efficient Source Of Energy. Disponible en: ScienceDirect, Volume 6, Octubre 2002, p. 433-455

2.5.1 Material del electrolito. El electrolito puede ser de diferentes materiales cerámicos¹⁴⁶. Para los electrolitos sólidos no porosos se han usado varias combinaciones de óxidos, siendo la más utilizada la zirconia estabilizada con itria (YSZ) debido principalmente a aspectos de disponibilidad y costo¹⁴⁷. Se han realizado estudios con otras combinaciones de óxidos como: el óxido de cerio dopado con samario (SCD), óxido de itrio de bismuto (BYO) o la cerámica de galato de lantano (LSGM) presentan mejor conducción iónica que el YSZ respecto a la temperatura¹⁴⁸. Como se muestra en la figura 7.

Figura 7. Conductividad iónica de materiales electrolíticos en función de la temperatura



FUENTE: BOUDGHENE STAMBOULI, A; TRAVERSA, E. Solid Oxide Fuel Cells (SOFCs): A Review of an Environmentally Clean and Efficient Source Of Energy. Disponible en: ScienceDirect, Volumen 6, Octubre 2002, p. 433-455

En la literatura encontrada para la conductividad eléctrica del YSZ se investiga su relación con el tamaño del grano, donde se concluyó que los tamaños de grano del electrolito iguales a 0,1-0,4, 0,3-1,5, 1-5 y 8-15 μm pueden usarse en la SOFC cuando la temperatura de operación de la celda es elevada (850°C-1000°C), pues la conductividad no difiere entre los tamaños del grano¹⁴⁹. La figura 8 soporta lo antes dicho.

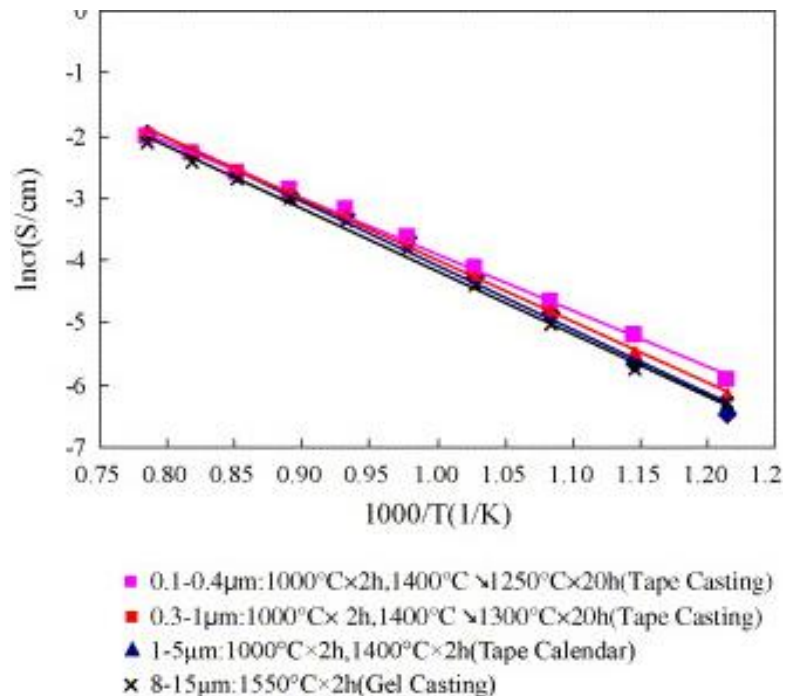
¹⁴⁶ *Ibid.*, p.11-12

¹⁴⁷ *Ibid.*, p.11-12

¹⁴⁸ *Ibid.*, p.11-12

¹⁴⁹ MINFANG, Han; XIULING, Tang; HUIYAN, Yin; SUPING, Peng. Fabrication, microstructure and properties of a YSZ electrolyte for SOFCs. Disponible en: ScienceDirect, Volumen 165. 20 de marzo de 2007, p.757-763

Figura 8. Conductividades de YSZ con diferentes tamaños de grano.



FUENTE: MINFANG, Han; XIULING, Tang; HUIYAN, Yin; SUPING, Peng. Fabrication, microstructure and properties of a YSZ electrolyte for SOFCs. Disponible en: ScienceDirect, Volumen 165. 20 de marzo de 2007, p.757-763

La figura 8 Demuestra que a una temperatura de 1550°C es adecuado usar un tamaño de grado que encuentre entre 8-15 µm.

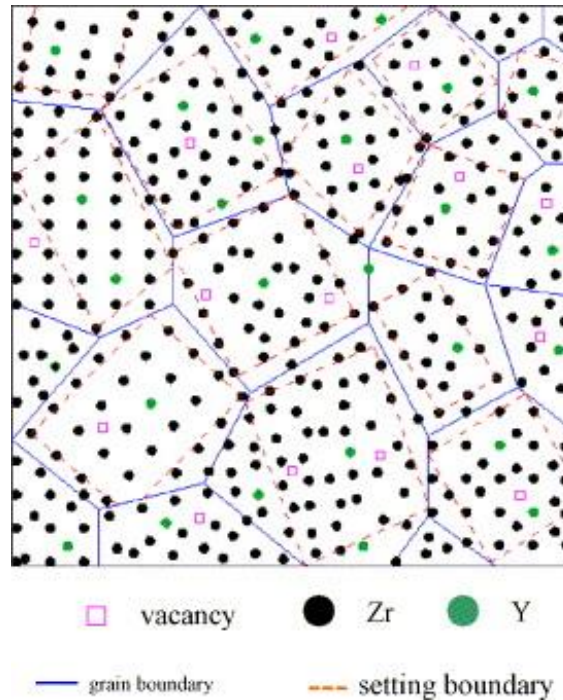
Las propiedades del electrolito, en especial la de la región intergranular tiene un efecto importante en la conductividad general de este, en algunos casos cuando el electrolito presenta mala conductividad se debe a la baja conductividad de la región intergranular¹⁵⁰. “La conductividad del interior del grano suele ser dos o tres veces mayor que la del límite del grano”¹⁵¹ esto se debe a dos factores inicialmente, el primero la formación de fases de impurezas cerca al límite del grano, las cuales tienen mayor aparición cuando la SOFC opera a baja temperatura y el segundo, la conducción de iones de oxígeno es menor en el límite del grano por la disminución de la concentración de vacante de oxígeno en ese mismo lugar¹⁵². El espesor de la región intergranular disminuye al disminuir el tamaño de grano YSZ como se muestra en la Figura 9.

¹⁵⁰ MINFANG, Han; XIULING, Tang; HUIYAN, Yin; SUPING, Peng. Fabrication, microstructure and properties of a YSZ electrolyte for SOFCs. Disponible en: ScienceDirect, Vol. 165. 20 de marzo de 2007, p.757-763

¹⁵¹ *Ibid.*, p. 760

¹⁵² *Ibid.*, p. 760

Figura 9. Modelos de microestructura de muestras cristalinas submicrométricas YSZ.



FUENTE: MINFANG, Han; XIULING, Tang; HUIYAN, Yin; SUPING, Peng. Fabrication, microstructure and properties of a YSZ electrolyte for SOFCs. Disponible en: ScienceDirect, Volumen 165. 20 de marzo de 2007, p.757-763

2.5.2 Material del Cátodo. La magnetita de lantano dopado con estroncio (LSM). La SOFC opera a elevadas temperaturas, por este motivo los únicos materiales que se pueden usar para el cátodo son los metales nobles o el óxido conductor¹⁵³. Donde los metales nobles son costosos y no cuentan con una estabilidad a largo plazo, por esta razón no tienen una aplicación práctica en la celda¹⁵⁴. Quedado como única opciones los óxidos heterometalicos, donde se pueden encontrar varias opciones como: la magnetita de lantano dopado con estroncio (LSM), manganita de estroncio de lantano de tipo perovskita y la manganita cálcica de lantano (LCM)¹⁵⁵. Las cuales tienen en sus propiedades una expansión térmica adecuada cuando se tiene un electrolito de zirconia y presentan buenos rendimientos cuando se operan a temperaturas superiores de 800°C¹⁵⁶.

¹⁵³ BOUDGHENE STAMBOULI, A. op. cit., p.445

¹⁵⁴ Ibid., p.445

¹⁵⁵ Ibid., p 445

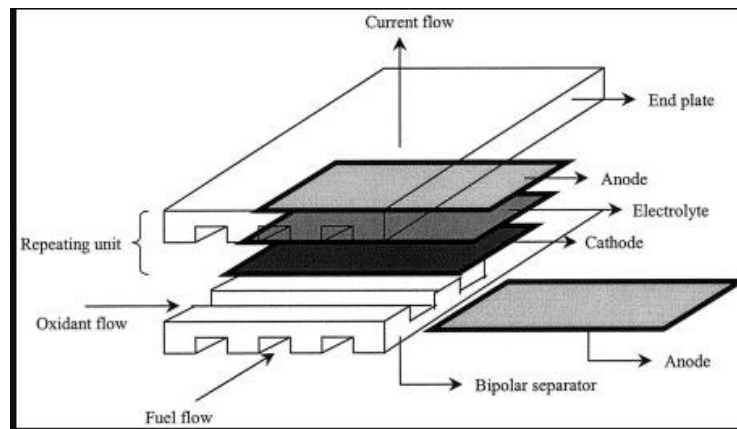
¹⁵⁶ Ibid., p 445

2.5.3 Material del Ánodo. Cermet($Ni - ZrO_2$) el material de ánodo es un metal y no deben ser oxidados debido al cambio de la composición del combustible durante la celda¹⁵⁷. El material del ánodo está compuesto de material electrolítico (YSZ, GDC o SDC) y óxido de níquel (NiO) el cual es reducido a níquel metálico, el cual actúa como inhibidor de las partículas metálicas proporcionando un coeficiente de expansión térmica similar al de los otros materiales de la celda¹⁵⁸. Cuando se usa YSZ como material de electrolito el material adecuado para el ánodo es NiO /YSZ pero si el material de electrolito es basado en ceria los materiales de ánodo son: NiO / SDC y NiO / GDC¹⁵⁹.

2.6 GEOMETRIA DE LA CELDA

La geometría planar de la celda de combustible de Óxido Sólido es la comúnmente usada, pues su fabricación no es complicada y presenta menor resistencia óhmica en el electrolito, disminuyendo las pérdidas de energía y viéndose reflejado de manera favorable en el potencial de la celda¹⁶⁰. En La figura 10 se puede ver la configuración típica de una SOFC planar.

Figura 10.Configuración planar de la SOFC



FUENTE: BOUDGHENE STAMBOULI, A; TRAVERSA, E. Solid Oxide Fuel Cells (SOFCs): A Review of an Environmentally Clean and Efficient Source Of Energy. Disponible en: ScienceDirect, Volumen 6, Octubre 2002, p. 433-455

Existen varios aspectos que dependen de la configuración de la celda como: la obtención de altos valores para la densidad de corriente favoreciendo el resultado

¹⁵⁷

¹⁵⁸ *Ibíd.*, p 444

¹⁵⁹ *Ibíd.*, p 444

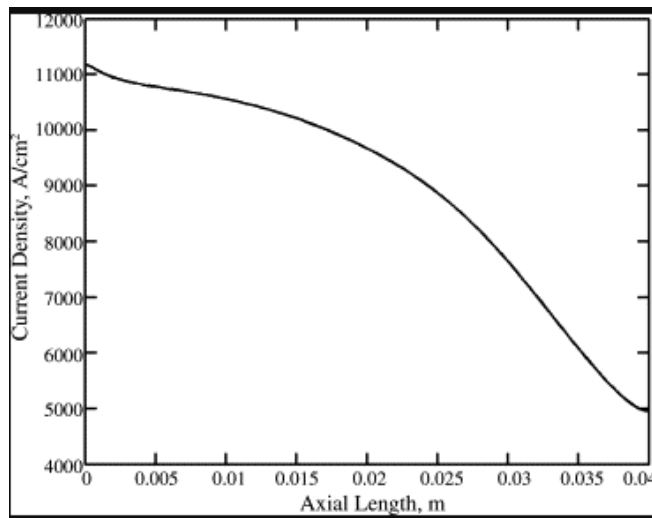
¹⁶⁰ *Ibíd.*, p 448

de potencia de la celda, las caídas del flujo de carga que pueden existir en la celda sea por pérdida de concentración, Óhmica y activación¹⁶¹.

2.7 DENSIDAD DE CORRIENTE

La densidad de corriente se da gracias a la transferencia de iones o electrones de un lado la celda a otro respecto al flujo, es la densidad parcial obtenida por la celda de combustible y se mide por unidad de área¹⁶².

Figura 11. La variación de densidad de corriente a lo largo de la longitud axial de la SOFC en $y = 0$ y $z = 0$ a una tensión de 0.73 V.



FUENTE: RAMAKRISHNA, P. A; YANG, Shi; SOHN, C. H. Innovative design to improve the power density of solid oxide fuel cell. Disponible en: ScienceDirect, Vol. 158, p. 378-384

En la figura 11 se puede apreciar que la densidad de corriente es menor cuando la distancia axial es mayor.

A continuación se presentarán algunas tablas (9 y 10) de consultas literarias donde se darán los valores de entrada de la densidad de corriente.

¹⁶¹ RAMAKRISHNA, P. A; YANG, Shi; SOHN, C. H. Innovative design to improve the power density of solid oxide fuel cell. Disponible en: ScienceDirect, Vol. 158, p. 378-384

¹⁶² RAMAKRISHNA, P. A; YANG, Shi; SOHN, C. H. Innovative design to improve the power density of solid oxide fuel cell. Disponible en: ScienceDirect, Vol. 158, p. 379

Tabla 9. Los valores de entrada que se reparan a lo largo del estudio

Entrada	Valor
Temperatura de la salida (T_z)	850°C
Diferencia de temperatura entre la salida y la entrada (ΔT)	100°C
Presión de la celda	1 barra
Área de superficie activa	100 cm ²
Intercambio la densidad de corriente del ánodo	0.65 A/cm ²
Cambiar la densidad de corriente del cátodo	0.25 A/cm ²
Difusividad gaseosa efectiva a través del ánodo	0.2 cm ² /s
Difusividad gaseosa efectiva a través del cátodo	0.05 cm ² /s
Espesor del ánodo	500µm
Espesor de electrolito	10µm
Espesor del cátodo	50µm

FUENTE: C. OZGUR, Colpan; IBRAHIM, Dincer; FERIDUN, Hamdullahpur. Thermodynamic modeling of direct internal reforming solid oxide fuel cells operating with syngas. Disponible en: ScienceDirect, Vol. 32, Mayo 2007, p.787-795. Mejorado por el autor

Tabla 10.Datos a la entrada de la SOFC

SOFC	
Temperatura de funcionamiento de SOFC	800 ° C
Temperatura de entrada del ánodo	750 ° C
Utilización de combustible, U_f	0.85
Espesor del cátodo, δ_c	50 μm
Espesor del electrolito, δ_e	150 μm
Grosor del ánodo, δ_a	50 μm
Resistencia del cátodo, ρ_c	$0.008114 \exp(600 / T)$ ($\Omega \text{ cm}$)
Resistividad electrolítica, ρ_e	$0.00294 \exp(10350 / T)$ ($\Omega \text{ cm}$)
Resistividad ánodo, ρ_a	$0.00298 \exp(-1392 / T)$ ($\Omega \text{ cm}$)
Limitar la densidad de corriente, i_L	4000 A m^{-2}
Factor <i>preexponencial</i> , γ_a	$5.5 \times 10^8 \text{ A m}^{-2}$
Factor <i>preexponencial</i> , γ_c	$7 \times 10^8 \text{ A m}^{-2}$
$E_{act, a}$	10^5 J mol^{-1}
$E_{act, c}$	$1.2 \times 10^5 \text{ J mol}^{-1}$
Cantidad de celdas de combustible	1000
Actual, I	40 A
Eficiencia del inversor CC / CA	95%
Equipamiento periférico	

FUENTE: JUNXI, Jia; ABULITI, Abudula; LIMING, Wei; BAOZHI, Sun; YUE, Shi. Thermodynamic modeling of an integrated biomass gasification and solid oxide fuel cell system. Disponible en: ScienceDirect, Vol. 81, Septiembre 2015, p. 400-410. Mejorado por el autor

2.8 TABLA DE RESUMEN

TABLA 11. Parámetros para la solución del modelo matemático

PARÁMETROS	
Temperatura de funcionamiento de SOFC	800 ° C
Densidad de corriente	1000 -3000 A m ⁻²
Presión	1 atm
Flujo Volumétrico	106 m3/h
Material del ánodo	Cermet(<i>Ni</i> – <i>ZrO</i> ₂)
Material del cátodo	LSM
Material del electrolito	YSZ

3. MODELO MATEMÁTICO

El desarrollo del modelo matemático se realiza planteando el balance de materia, energía, momentum y por especies, donde se le da solución con ayuda de un método numérico que se encuentra desarrollado y empleado en el trabajo de grado titulado “Análisis del modelo matemático de una celda de combustible de óxido sólido (SOFC) empleando como combustible el gas de Síntesis, producido en la gasificación de Biomasa”, haciendo las especificaciones adecuadas para la solución de este.

El tipo de modelo matemático al igual que las condiciones y parámetros serán los mismos planteados y usados en el proyecto de grado “Análisis del modelo matemático de una celda de combustible de óxido sólido (SOFC) empleando como combustible el gas de Síntesis, producido en la gasificación de Biomasa”. Debido a esto el balance de energía y momentum no fueron considerados.

Las consideraciones para la solución del modelo matemático son las siguientes:

1. Condición de estado Estacionario.
2. La celda de combustible opera a presión y temperatura constante (isotérmico).
3. No hay pérdidas de carga en el electrolito.
4. Existe variación en la concentración de hidrógeno en el canal de flujo de ánodo.
5. El modelo se evaluó como flujo 1D.
6. Para la densidad de corriente el rango será asumido según el numeral 2.7.
7. No existen reacciones paralelas en la frontera límite de las tres fases (TPB).
8. Las reacciones de reformado de metano y desplazamiento del agua (wáter gas shift) que se dan en el canal de flujo del ánodo se tienen en cuenta.
9. La velocidad es contante en los dos canales de flujo.
10. Como es un sistema estacionario el balance de momentum no es considerado.
11. El balance de energía no se evalúa porque el sistema opera isotérmicamente.

3.1 MODELOS DE CELDAS Y CANALES

3.1.1 Modelos continuos. Se conocen dos tipos de modelos continuos que aplican en las celdas de combustible de Óxido Sólido, estos modelos son: el cuasi homogéneo y el heterogéneo.

3.1.1.1 Cuasi homogéneo. El modelo cuasi homogéneo evalúa el fenómeno considerando que el material del lecho es poroso y el flujo gaseoso presenta por el material de la celda flujo intergranular, con este modelo es posible asumir que no hay variación en la concentración de la fase gaseosa con respecto a la fase solida del material¹⁶³.

3.1.1.2 Heterogénea. En este modelo la diferencia de las dos fases gaseosas y la sólida es tenida en cuenta, haciendo que sea posible la variación de la concentración de las dos fases¹⁶⁴. Hay otras clasificaciones para este modelo, una fase solida homogénea, sin gradiente entre la concentración de partículas y una fase solida heterogénea que a diferencia de la anterior tiene gradiente en la concentración de las partículas¹⁶⁵.

Para la solución de este modelo matemático se eligió un modelo heterogéneo con fase solida heterogénea al que se le realizaron simplificaciones para llegar a la convergencia del método. El desarrollo de éste se realiza con ayuda de un método numérico para la solución de ecuaciones diferenciales, estos métodos pueden ser: método de solución analítica, Newton raphson, volúmenes de control, diferencias finitas¹⁶⁶.

3.2 FENÓMENOS

Cuando se cuenta con un gradiente de concentración, hay transferencia de masa siendo este el fenómeno de transporte que se da entre dos puntos analizados¹⁶⁷. La transferencia de masa se puede clasificar en dos fenómenos:

¹⁶³ STOLTEN, Detlef; EMONTS, Bernd, Editores. Fuel Cell Science and Engineering: Materials, Processes, Systems and Technology. Editorial: John Wiley & Sons, 2012. ProQuest EBook Central.

¹⁶⁴ *Ibíd.*, p. 1565

¹⁶⁵ *Ibíd.*, p. 1565

¹⁶⁶ *Ibíd.*, p. 1560

¹⁶⁷ TAYLOR, Ross y KRISHNA, Rajamani. Multicomponent Mass Transfer. Editorial: John Wiley & Sons. 1993

3.2.1 Fenómeno convectivo. La transferencia de masa convectiva se presenta cuando la sustancia que se transporta de un punto a otro es influenciada por los componentes presentes en el fluido y el medio en el que se difunde, este fenómeno se da generalmente en medios abiertos donde no hay tanta resistencia física y con una velocidad difusiva menor que la del fluido¹⁶⁸.

3.2.2 Fenómeno difusivo. La transferencia de masa difusiva es el paso molécula a molécula de una sustancia despreciando el medio en el que se difunde¹⁶⁹. La difusión de la sustancia se da en un una mezcla gaseosa, solución líquida o sólida y se debe al gradiente de concentración de la sustancia en el lugar donde se difunde¹⁷⁰.

Las celdas de combustible de Óxido Sólido en su totalidad puede ser modelada por el fenómeno difusivo por la configuración de la celda, aunque el fenómeno convectivo puede ser usado en la celda para la transferencia de masa el canal de flujo y el difusivo para el medio poroso (electrodos)¹⁷¹.

3.3 ECUACIÓN DE TRANSPORTE

Los balances de materia, momentum y energía son determinados por la ecuación fundamental de balance.

Ecuación 22. Balance fundamental

$$E - S + G = A$$

Ecuación 23. Balance de Materia

$$\frac{\partial \rho y_i}{\partial t} + u \rho \nabla y_i = -\nabla m_i + w_i$$

Ecuación 24. Balance de Energía

$$\frac{\rho \partial e}{\partial t} + u \rho \nabla e = -\nabla Q + S_q$$

Los balances de momentum y energía no se evaluarán en este trabajo de grado por las consideraciones para la solución del modelamiento enumeradas anteriormente. Para realizar el balance de materia se ilustra en la figura 12 de la totalidad de una celda de combustible.

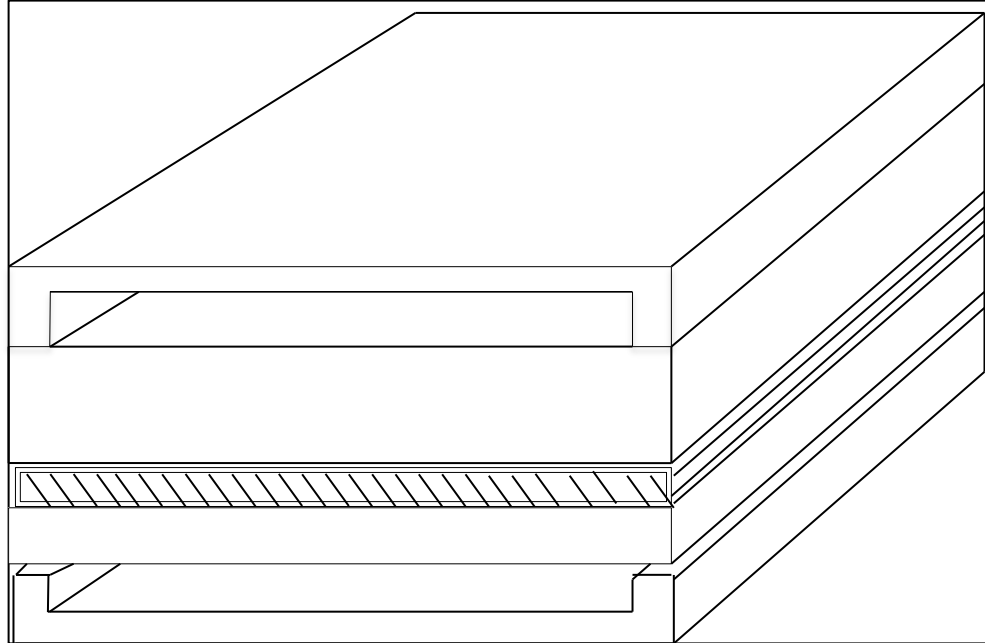
¹⁶⁸ JOONGUEN, Park; YU-MI, Kim y JOONGMYEON, Bae. A numerical study on the heat and mass transfer characteristics of metal-supported solid oxide fuel cells. Disponible en: ScienceDirect, Vol. 36, febrero 2011, p. 3167-3178

¹⁶⁹ *Ibíd.*, p. 3168

¹⁷⁰ *Ibíd.*, p. 3168

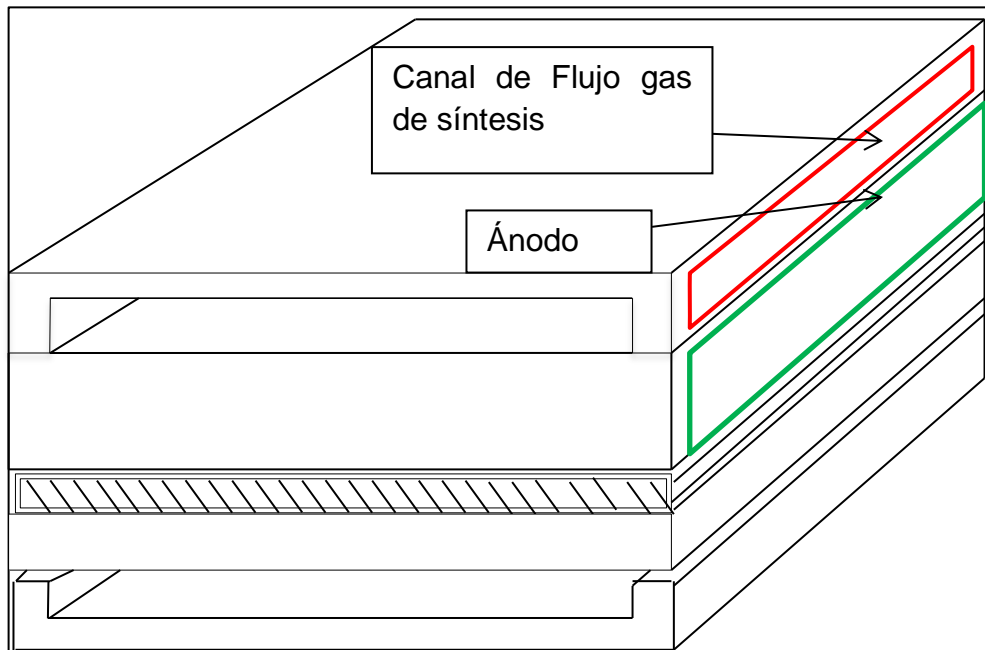
¹⁷¹ *Ibíd.*, p. 3167

Figura 12. SOFC unitaria.



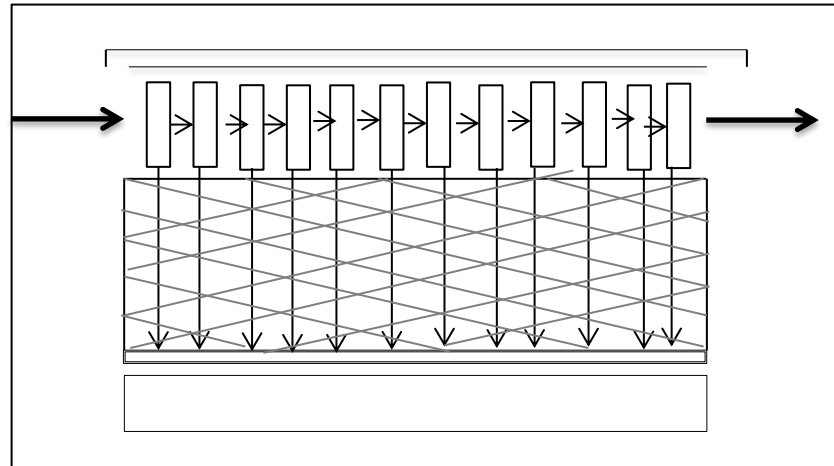
Se analiza la relación del volumen de control del canal de flujo del gas de síntesis y el ánodo, como se ilustra en la figura 13.

Figura 13. Relación volumen de control del canal de flujo del gas de síntesis y ánodo.



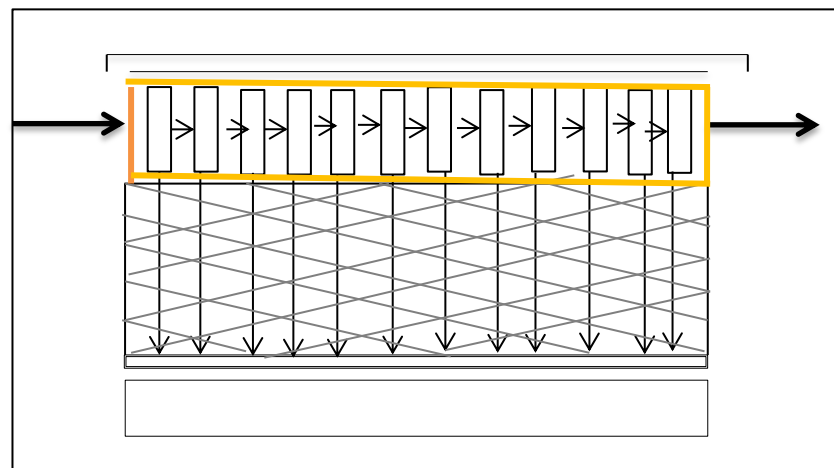
El balance de materia en el canal de flujo en donde se analiza la cantidad que se difunde y la que continúa por el canal de flujo del gas de síntesis se enfoca la sección lateral, como se ilustra en la figura 14.

Figura 14. Sección lateral del canal de flujo del gas de síntesis y el ánodo.



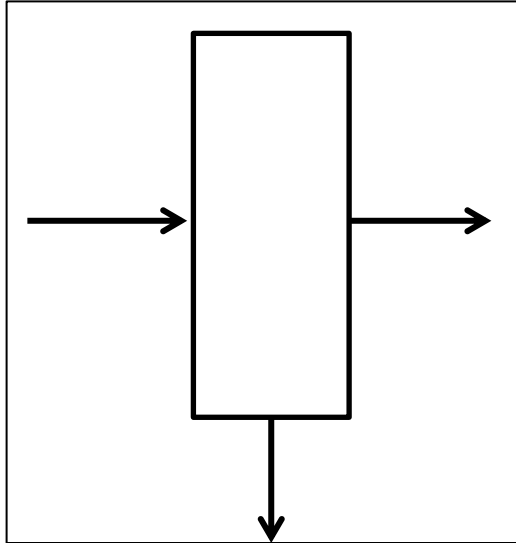
El fenómeno conductivo y difusivo que tiene lugar en el canal de flujo del gas de síntesis se analiza en la figura 15.

Figura 15. Fenómeno difusivo y conductivo en el canal de flujo del gas de síntesis.



Donde se analiza cada uno de los nodos (particiones en el canal de flujo) y la continuidad que tiene el gas que no reaccionó en el nodo anterior con el gas que reaccionó.

Figura 16. Balance de materia unitario del nodo.



En el balance de materia unitario del nodo se puede observar que la cantidad que se difunde corresponde al valor de materia que ingresó al nodo menos la cantidad que sale de este para pasar al siguiente.

3.4 COMPOSICIÓN

La composición del gas de síntesis es de importancia para obtener la convergencia del modelo matemático, solución del balance de materia y análisis de la SOFC. Se realizó la búsqueda en artículos científicos para la composición del gas de síntesis.

Para este proyecto se toman los resultados obtenidos por el artículo "Thermodynamic modeling of an integrated biomass gasification and solid oxide fuel cell system" de los autores: Junxi Jia, Abuliti Abudula, Liming Wei, Baozhi Sun, Yue Shi. En donde realizaron un estudio termodinámico para una SOFC integrada con un gasificador de biomasa, aclarando que la biomasa es madera. El estudio se realizó para 5 casos diferentes, en donde alguno de ellos es el uso de aire y aire enriquecido con oxígeno en el canal de flujo del cátodo. Para este proyecto se toma la composición del caso 1 que es el uso de aire.

La composición que de gas de síntesis que se tomó para este estudio se muestra en la tabla 9. En donde dicha composición corresponde a la de la entrada del ánodo.

Tabla 12. Propiedades termodinámicas de los estados principales para el caso 1.

Parámetro	Corriente					
	Salida de gasificador (estado 3)	Entrada de ánodo (estado 4)	Salida de ánodo (estado 5)	Entrada de cátodo (estado 8)	Salida de cátodo (estado 9)	Salida de combustible (estado 10)
Caso 1 (aire)						
T (K)	1073	1023	1073	1023	1073	1130
Velocidad de flujo (mol / s)	0.6414	0.6414	0.6438	7.3000	7.2000	7.8000
Composición del gas						
H ₂	20.37	20.37	5,72	0	0	0
CO	23.08	23.08	6.12	0	0	0
CO ₂	8.69	8.69	25.72	0	0	2.63
H ₂ O	7.00	7.00	21.92	0	0	2.29
CH ₄	0.19	0.19	0.01	0	0	0
N ₂	40.67	40.67	40.51	79	80.56	77.09
O ₂	0	0	0	21	19.44	17.99

FUENTE: JUNXI, Jia; ABULITI, Abudula; LIMING, Wei; BAOZHI, Sun; YUE Shi. Thermodynamic modeling of an integrated biomass gasification and solid oxide fuel cell system. Disponible en: ScienceDirect, Vol. 81, Septiembre 2015, p. 400-410

3.5 DEMOSTRACIÓN MATEMÁTICA

En este proyecto de grado no se realizara la demostración matemática de cada ecuación utilizada en el modelamiento matemático, estas demostraciones se encuentran ya expresadas en el trabajo de grado “Análisis del modelo matemático de una celda de combustible de Óxido Sólido (SOFC) empleando como combustible el gas de síntesis, producido en la gasificación de la biomasa” de Sergio Alejandro Fuquene Linares y Laura Tatiana López Puerto.

La resolución de un gradiente que se encuentra igualado a cero, implica una solución analítica. El gradiente de flux será evaluado únicamente en el eje z como

se mencionó en las consideraciones. Entonces, la Ecuación 33 demuestra cómo queda el gradiente de flux en una dimensión.

Ecuación 25. Gradiente de flux en una dimensión.

$$\frac{\partial N_i}{\partial z} = 0$$

3.5.1 Difusividad en el ánodo. El ánodo de la celda de combustible de Óxido Sólido es un electrodo poroso y selectivo únicamente para las moléculas de hidrógeno y agua formadas en la interfase del ánodo. El estudio de la transferencia de masa en el ánodo se realizó por medio de la Ley de Fick.

3.5.1.1 Ley de Fick. La Ley de Fick modela los procesos difusivos sin despreciar ningún componente de la mezcla gaseosa a través de un medio poroso (electrodos)¹⁷².

Ecuación 26. Ley de Fick

$$N_i = -\frac{PD_i^{eff}}{RT} \left(\frac{\delta(y_i)}{\delta z} \right)$$

Como se mencionó anteriormente el modelo será evaluado en una única dimensión (z) en el electrodo porque allí es donde ocurre una difusión que se pueda considerar¹⁷³.

3.5.1.2 Perfil de Concentración Ley de Fick. A la ecuación 34 se le realizan algunos despejos e integraciones para llegar a la ecuación 35.

Ecuación 27. Perfil de concentración (Fick)

$$y_i = C_1 z + C_2$$

Teniendo la ecuación 35 se definen las condiciones de frontera y se obtiene la solución analíticamente de la ecuación 35 en el ánodo.

¹⁷² JIMENEZ, R; OTÁLORA, F; KLEITZ, M. Efecto sobre la reacción de oxígeno de la forma y la microestructura de contacto electrodo-electrolito en electrodos a difusión interna en celdas de combustible de óxido sólido (SOFC). Disponible en: Boletín de la Sociedad Española de Cerámica y Vidrio, 1999, p. 625-629

¹⁷³ *Ibid.*, p. 83

3.5.1.3 Condiciones de frontera (Ley de Fick). Las condiciones de frontera son indispensables para poder llegar a la solución analítica del perfil de concentraciones de ánodo. Se necesitan dos condiciones de frontera para el ánodo, la primera es la composición a la que ingresa el gas de síntesis en el canal de flujo siendo esta la condición externa, y la segunda es el término de generación de la reacción electroquímica en la interfase del ánodo y el electrolito, donde la velocidad de difusión en el electrodo depende de la cantidad de corriente producida por la SOFC.

Donde se obtienen las ecuaciones 36 y 37. La demostración matemática para llegar a estas dos ecuaciones de encuentran en la tesis “Análisis del modelo matemático de una celda de combustible de Óxido Sólido (SOFC) empleando como combustible el gas de síntesis, producido en la gasificación de la biomasa” de Sergio Alejandro Fuquene Linares y Laura Tatiana López Puerto.

Ecuación 28. Condición límite de Neumann

$$\left(\frac{dy_i}{dz}\right) = -\frac{JRT}{2D_i^{eff}FP}$$

La ecuación 37 es la utilizada para el perfil de concentración de ánodo solo teniendo en cuenta la reacción electrolítica.

Ecuación 29. Perfil de Difusividad en el ánodo (Reacción Electrolítica)

$$y_{H_2+1} = y_{H_2}^{canal} - \frac{JRT}{2D_i^{eff}FP} dz$$

Para llegar a la ecuación de perfil de difusividad final se deben tener en cuenta las velocidades de reacción de la reacción de reformado de metano y desplazamiento del agua (wáter gas shift).

Ecuación 30. Velocidad de reacción (Reacción reformado de metano)

$$r_2 = C_{RF}K_2 \left(x_{CH_4} * x_{H_2O} - \frac{x_{CO}x_{H_2}^3}{k_{eq2}} \right)$$

Ecuación 31. Velocidad de reacción (wáter gas shift)

$$r_3 = C_{RF}K_3 \left(x_{CO} * x_{H_2O} - \frac{x_{CO_2}x_{H_2}}{k_{eq3}} \right)$$

Teniendo las ecuaciones de las velocidades de reacción de la reacción de reformado de metano y desplazamiento del agua (wáter gas shift) se modifica la ecuación 37.

Ecuación 32. Difusividad en el ánodo.

$$y_{H_{2+1}} = y_{H_2}^{Canal} + \left(-\frac{JRT}{2D_i^{eff}FP} + r_2 + r_3 \right) dz$$

3.5.1.4 Coeficientes de difusividad (Ley de Fick). El coeficiente de difusividad relaciona la capacidad con el tipo de material (porosidad, tortuosidad y permeabilidad), de este depende la velocidad de transferencia del gas, según las condiciones en las que opere la celda y las características de la especie y del medio en el que se difunde¹⁷⁴.

Hay dos tipos de difusividades, La difusividad molecular la cual aplica cuando el tamaño del poro del electrodo es grande y se pueden modelar a presiones elevadas¹⁷⁵. Por otra parte está la difusividad de Knudsen la cual es importante cuando el tamaño de las moléculas es mayor que el de los poros del electrodo¹⁷⁶. En la ecuación de difusividad efectiva se tendrán en cuenta los dos tipos de difusividades.

Ecuación 32. Difusividad efectiva.

$$D_i^{eff} = \left(\frac{1}{D_{i,molecular}} + \frac{1}{D_{i,K}} \right)^{-1}$$

3.5.2 Difusividad en el cátodo. El cátodo es un electrodo selectivo solo al paso de oxígeno de la corriente de aire que ingresa al canal de flujo del cátodo¹⁷⁷. La transferencia de masa del cátodo es distinta a la del ánodo porque no hay especies diferentes al oxígeno y es considerado un sistema binario, por otra parte el nitrógeno que se encuentra presente en el aire actúa como inerte (no reacciona), haciendo menos compleja la solución del cálculo¹⁷⁸.

En la figura 17 al igual que para el ánodo se realiza el análisis de la relación del volumen de control del canal de flujo de aire con el cátodo.

¹⁷⁴ ÁLVAREZ, Ana; SOLÍS, Julio; DURÁN, Carmen. Coeficientes De Difusividad Aparente Durante La Extracción De Aceite De Almendras De Zapote Mamey (Pouteria Sapota). Tecnología, Ciencia, Educación, Vol.16, núm. 1, Instituto Mexicano de Ingenieros Químicos A.C, Monterrey, México, Junio 2001, p. 20-27

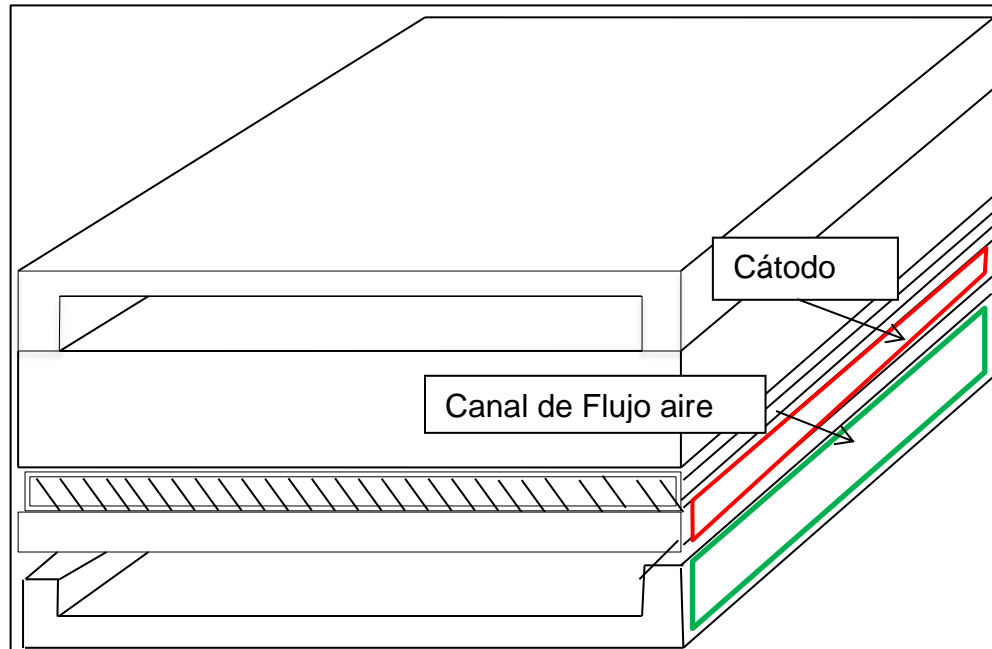
¹⁷⁵ *Ibíd.*, p.25

¹⁷⁶ *Ibíd.*, p.25

¹⁷⁷ JIMENEZ, R; OTÁLORA, F; KLEITZ, M. op., cit, p. 83

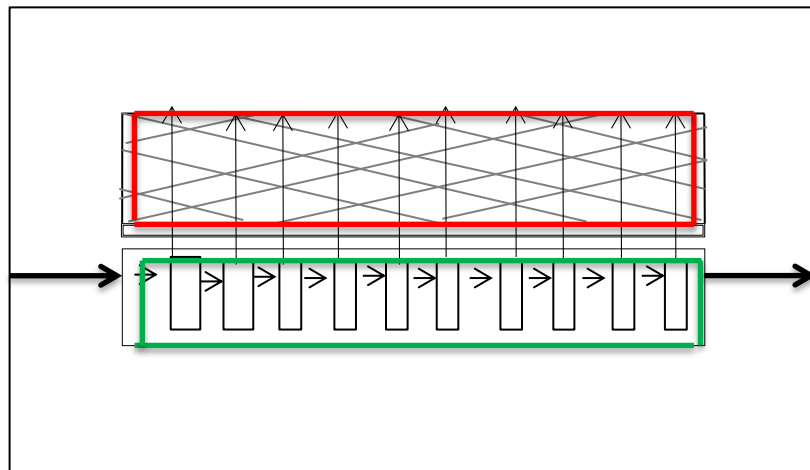
¹⁷⁸ *Ibíd.*, p. 83

Figura 17. Relación volumen de control del canal de flujo del aire y cátodo.



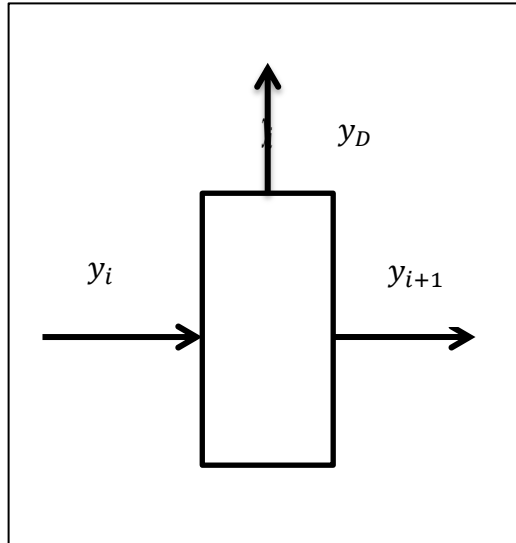
En la Figura 18 de la sección lateral se ilustra la manera en la que se da el fenómeno entre en canal y el electrodo.

Figura 18. Sección lateral del canal de flujo del aire y el cátodo.



En la figura 18 se muestra el análisis nodal que se le realiza al canal de flujo del aire donde a partir de este se puede ilustrar en la figura 19 el balance de materia para cada nodo.

Figura 19. Balance de materia para un nodo del canal de flujo del aire.



En la figura 18 se deduce que la cantidad de oxígeno que se difunde es la diferencia entre lo que sale y lo que ingreso al nodo.

Para realizar la transferencia de masa en el cátodo tiene se considera que hay un volumen de control entre los límites del material y que el flux de la especie (oxígeno) es constante por el material.

Ecuación 33. Gradiente de Flux del oxígeno

$$\frac{\partial N_{O_2}}{\partial z} = 0$$

Ecuación 34. Flux de oxígeno

$$N_{O_2} = \frac{PD_i^{eff}}{RT} \frac{dy_{O_2}}{dz} + y_{O_2} N_{O_2}$$

La ecuación 34 es difiere en algunas cosas con la ecuación de Fick original, para esta ecuación se tuvo en cuenta el flux convectivo del oxígeno, pues es la única especie que está en el cátodo porque como se dijo anteriormente el nitrógeno es considerado un inerte.

El flux del oxígeno que se necesita para que se dé la reacción electrolítica es calculado en términos de la Ley de Faraday.

Ecuación 35. Flux de oxígeno en términos de la Ley de Faraday

$$N_{O_2} = \frac{J}{4F}$$

Al integrar la ecuación 44 se obtiene la ecuación de perfil de difusividad en el cátodo.

Ecuación 36. Perfil de difusividad en el cátodo

$$y_{O_2} = 1 + (y_{O_2}^{canal} - 1) \exp\left(-\frac{JRTdz}{4FD_i^{eff}P}\right)$$

3.6 TABLA DE RESUMEN DE ECUACIONES

Tabla 13. Resumen de ecuaciones

ECUACIONES	
Perfil del	$y_{H_{2+1}} = y_{H_2}^{canal} + \left(-\frac{JRT}{2D_i^{eff}FP} + r_2 + r_3\right) dz$
Perfil del cátodo	$y_{O_2} = 1 + (y_{O_2}^{canal} - 1) \exp\left(-\frac{JRTdz}{4FD_i^{eff}P}\right)$
Límite de Neuman	$\left(\frac{dy_i}{dz}\right) = -\frac{JRT}{2D_i^{eff}FP}$
Velocidad de reacción (reformado de metano)	$r_2 = C_{RF}K_2 \left(x_{CH_4} * x_{H_2O} - \frac{x_{CO}x_{H_2}^3}{k_{eq2}}\right)$
Velocidad de reacción (wáter gas shift)	$r_3 = C_{RF}K_3 \left(x_{CO} * x_{H_2O} - \frac{x_{CO_2}x_{H_2}}{k_{eq3}}\right)$

Las propiedades termodinámicas que se usaron para llegar a los valores de los parámetros presentes en las ecuaciones para la solución del modelo matemático se pueden apreciar en el ["anexo A"](#).

4. IMPLEMENTACIÓN DEL MODELO MATEMÁTICO

Según las consideraciones descritas en el capítulo 3, se realizó la implementación en el modelo matemático de los parámetros que se establecieron para el gas de síntesis, se da solución a los perfiles de concentración de los dos electrodos (ánodo y cátodo), y a partir de esto calcular las pérdidas de voltaje que se dan en la celda (pérdida óhmica, por concentración y activación) y el valor real del potencial para poder obtener la curva de polarización, para posteriormente calcular la eficiencia de la celda y la potencia generada por la SOFC.

4.1 PERFIL DE CONCENTRACIÓN

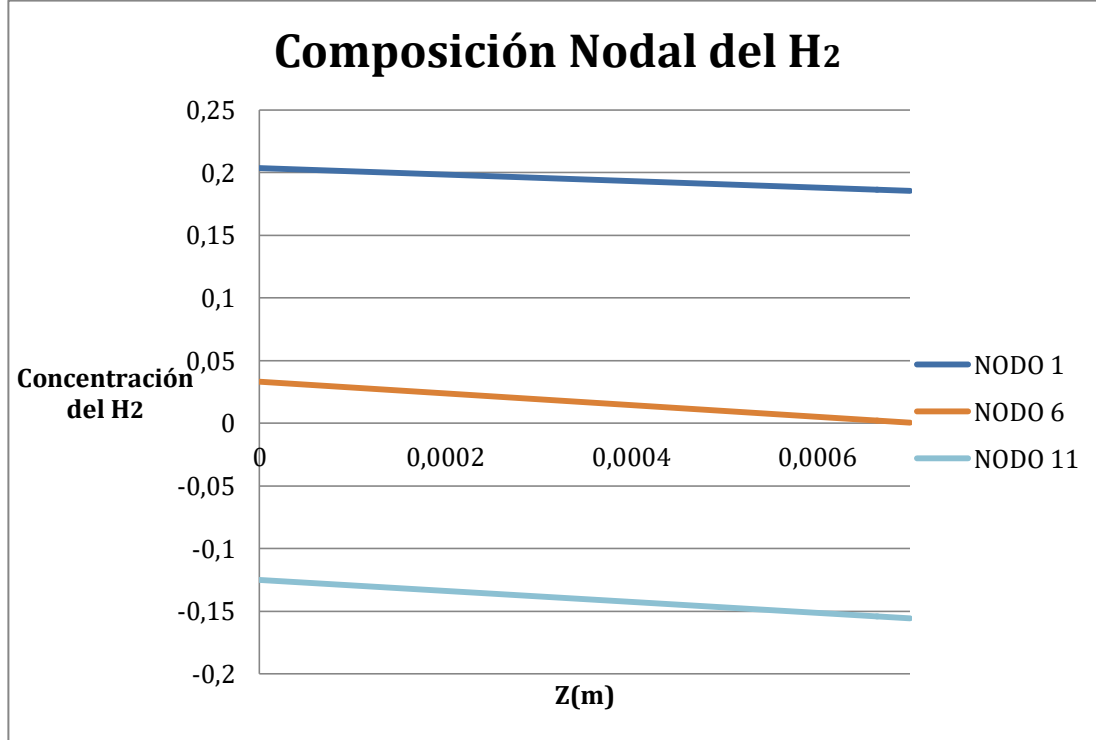
A continuación se demuestra el comportamiento de los perfiles de concentración del gas de síntesis en el ánodo e interface y el del aire en el cátodo.

4.1.1 Perfil de concentración en el ánodo. El cálculo del perfil de concentración del gas de síntesis se realizó usando la Ley de Fick para difusión binaria, teniendo en cuenta las consideraciones establecidas anteriormente para la sección de la celda correspondiente al gas de síntesis.

El balance de materia para el ánodo se hizo con ayuda de las figuras 17, 18, 19 y 20 en donde se demostró cómo se realizó el balance de materia para el canal de flujo del gas de síntesis y el ánodo. Basándose en la figura 19 y los fenómenos (difusivo y convectivo) que se describe en ella, se calculan los perfiles de concentración en las secciones de la celda antes nombradas. El análisis nodal hace posible llegar a la solución de los perfiles de concentración del hidrógeno por medio de la longitud del electrodo.

En la gráfica 1 e presentan tres perfiles de concentración, correspondientes al nodo 1, 6 y 11, donde es posible apreciar el comportamiento del combustible durante su recorrido por la celda.

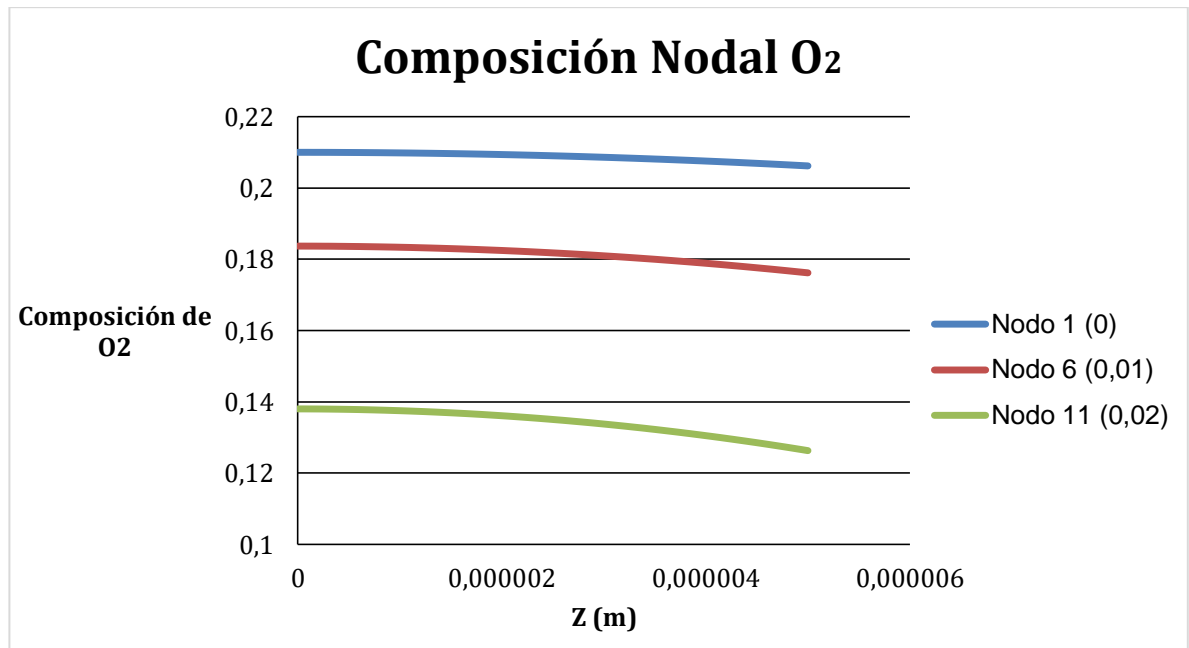
Gráfica 1. Composición nodal del hidrógeno



La composición del hidrógeno que ingresa al canal de flujo del ánodo es de 0,2037, esta cantidad de hidrógeno es alimentada al nodo 1, donde una parte de ella se difunde y la otra pasa al siguiente nodo. El hidrógeno que se difunde da lugar a la reacción electrolítica en la interfase y la reacción de reformado de metano y desplazamiento del agua (wáter gas shift) se generan en el canal de flujo del ánodo. La gráfica 1 demuestra el cambio en la composición del hidrógeno en el inicio, la mitad y el final de la celda con respecto al espesor de ánodo (0,0007m), donde al finalizar el (nodo 6) se empiezan a obtener valores de composición negativos, es decir, el hidrógeno se consumió por completo antes de llegar al nodo 7. Este resultado se le atribuye a varios factores; el primero es la difusividad de Knudsen, la cual hace que la cantidad de hidrógeno que se difunde en cada nodo sea mayor y por ende la concentración en la entrada de los siguientes nodos se reduce drásticamente, el segundo es que las velocidades de reacción del reformado de metano y desplazamiento del agua (wáter gas shift) consideradas secundarias no tienen un valor significativo comparado con la velocidad de reacción de la reacción electrolítica, debido a esto la cantidad de hidrógeno que es producida por las dos reacciones secundarias no representan un cambio que se considere de importancia. Por otra parte la densidad de corriente que se aplica en una celda es menor (1000-3000 A/m²) comparada con la de una pila de combustible de Óxido Sólido (puede llegar a 11000 A/m²).

4.1.2 Perfil de concentraciones en el cátodo. El aire que entra al canal de flujo del cátodo tienen una composición de 0,21 para el oxígeno y 0,79 para el nitrógeno, como se dijo anteriormente el nitrógeno actúa como inerte en esta reacción, por esta razón no se tiene en cuenta. En la gráfica 2 se ilustra el comportamiento del perfil de composición en el cátodo.

Gráfica 2. Composición nodal del oxígeno.

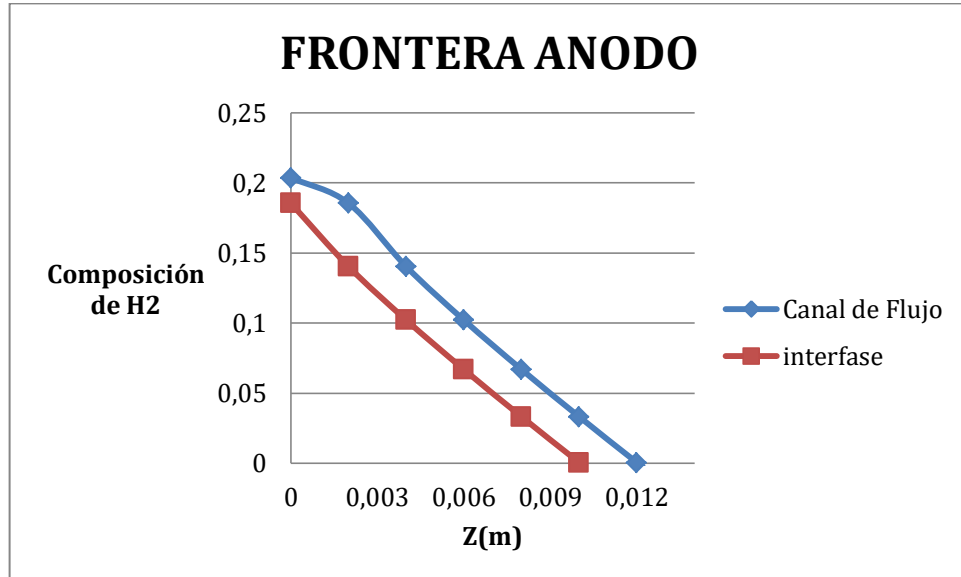


En la gráfica 2 se demuestra que el comportamiento del oxígeno durante toda la longitud (0,02m) de la celda disminuye pero no lo hace drásticamente, incluso para el perfil de concentración del cátodo no se observan valores negativos en ninguno de los nodos, es decir, el oxígeno no se consume por completo. En el gráfico 2 se puede ver que en el último nodo la composición final del oxígeno es cercana al 0,12.

La composición del oxígeno tiene una disminución adecuada ya que para esta parte de la celda la difusividad es considerada constante porque no se presenta una mezcla binaria, pues el oxígeno gaseoso se encuentra puro y en esta parte de la celda no se dan reacciones.

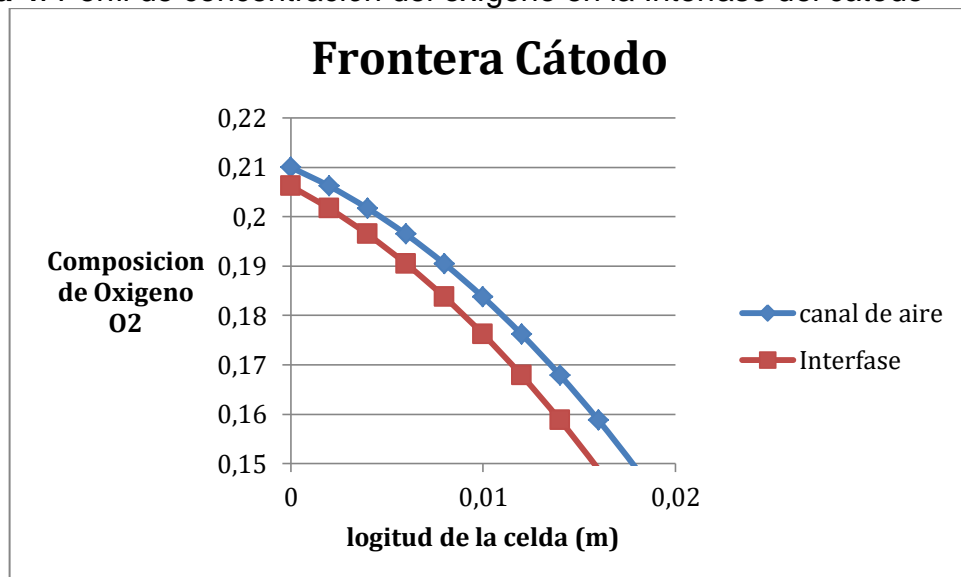
4.1.3 Perfil de concentración en la interfase. Se calcularon los perfiles de concentración en los límites de los electrodos para así obtener el voltaje que generó la celda, para esto es necesario conocer la composición del agua, oxígeno e hidrógeno en la interfase y canal de flujo. Las gráficas 3 y 4 se realizan para poder encontrar el voltaje de la celda.

Gráfica 3. Perfil de concentración del hidrógeno en la Interfase del ánodo



En la gráfica 4 se observa el cambio en la composición del hidrógeno en el canal de flujo y en la interfase entre el electrolito y electrodo (ánodo), donde en ambos casos disminuye la composición debido a la cantidad de hidrógeno que se difunde en cada nodo por medio electrodo poroso. La composición inicial del hidrógeno en la interfase es menor que la del canal de flujo y disminuye linealmente. Esta diferencia de composición entre el canal de flujo y la interfase del ánodo se debe a que la cantidad de hidrógeno que ingresa al nodo del canal de flujo es mayor a la cantidad de hidrógeno que se difunde por el material poroso y llega a la interfase.

Gráfica 4. Perfil de concentración del oxígeno en la Interfase del cátodo



En la gráfica 4 se ilustra como el balance de materia realizado para cada nodo hace que la composición nodo a nodo sea disminuya según la cantidad de oxígeno que se difunde en el nodo inmediatamente anterior. Como se dijo anteriormente la difusividad para esta parte de la celda es considerada contante y el espesor de este electrodo es menor comparado con el del ánodo, a esto se debe que el comportamiento de la gráfica 4 sea lineal.

Según lo anterior, a continuación se demuestra una tabla los valores de las composiciones o presiones parciales en el canal de flujo que para este caso equivalen a lo mismo porque se consideró un valor de presión igual a 1 atm (presión atmosférica), para con esto poder realizar una estimación del voltaje real generado por la celda de combustible de Óxido Sólido.

Tabla 14. Composiciones en los canales del flujo del ánodo y cátodo.

$y_{H_2, Canal}$	$y_{O_2, Canal}$	$y_{H_2O, Canal}$
0,2037	0,21	0,07
0,1855	0,20618412	0,15924832
0,1404	0,20165766	0,38091804
0,1022	0,1964087	0,56838068
0,0669	0,19042335	0,74164525
0,0332	0,1836857	0,9070664
0,0005	0,17617774	1,06756211
0	0,1678793	1,22469823
0	0,15876795	1,37943192
0	0,14881888	1,53237599
0	0,13800482	1,68394647

Para el cálculo de las composiciones en los canales de flujo de ambos electrodos se realizó una suma entre los deltas de concentración de cada especie y la concentración anterior de la misma. Para la composición de hidrógeno los valores negativos se asumieron iguales a cero es decir se consumió todo el hidrógeno. Los perfiles que se obtuvieron están relacionados con el valor de la densidad de corriente que se estimó para la generación de agua en la reacción electrolítica y con las pérdidas (óhmica, concentración y activación) que tuvo el sistema se llega al valor del potencial real de esta.

El modelo se evaluó con unas densidades de corriente pequeñas (1000 a 3000 A/m²) para una celda porque el combustible ingresa con un 15% aproximadamente del total del combustible que se usa para la generación de energía. Las densidades de corriente que se escogieron tienen valores que termodinámicamente hacen posible el funcionamiento de una celda, pues el combustible es pobre en hidrógeno y por este motivo se tomaron las densidades

de corriente de 1000 a 3000 A/m². Generalmente el valor de la densidad de corriente para una celda esta entre 1000 y 10000 A/m².

4.2 CÁLCULO DE POTENCIAL ELECTROQUÍMICO

El valor del potencial electroquímico real es el cálculo del potencial de Nernst o potencial de equilibrio restándole las pérdidas del sistema.

Ecuación 37. Potencial electroquímico

$$V_{cell} = V_{Nernst} - \Delta V_{act} - \Delta V_{conc} - \Delta V_{ohmic}$$

Donde cada pérdida del sistema depende de la densidad de corriente específica que tenga la celda.

Ecuación 38. Potencial electroquímico en función de la densidad de corriente

$$V_{cell} = V_{Nernst} - \Delta V_{act}[f(J)] - \Delta V_{conc}[f(J)] - \Delta V_{ohmic}[f(J)]$$

Según la ecuación 38 el voltaje real de la celda está en función de la densidad de corriente en una posición específica de la celda.

4.2.1 Ecuación de Nernst. Después de realizar el cálculo de los perfiles de concentración en el canal de flujo y electrodo del hidrógeno y oxígeno, se determinan las pérdidas en el sistema.

La ecuación de Nernst da como resultado el potencial eléctrico que puede generar una reacción electroquímica a partir de su energía, a la cual se le deben realizar la resta de las pérdidas por concentración, activación y óhmica que se dan en el sistema. El valor del potencial eléctrico de la celda se calcula a partir del equilibrio ya que el potencial máximo se obtiene a esta condición.

El potencial de Nernst es el voltaje reversible que hace posible la máxima generación de trabajo eléctrico. El cálculo del potencial de Nernst depende de la energía libre de Gibbs, temperatura y presión del sistema. A continuación se presenta la ecuación de Nernst en términos de la energía libre de Gibbs, donde la energía producida por la reacción electrolítica se expresa por medio del voltaje máximo o de equilibrio, dependiendo de las composiciones o presiones parciales de las especies que aportan un mayor potencial electroquímico.

Ecuación 39. Nernst en términos de la energía libre de Gibbs

$$V_{Nernst} = V_r + \frac{RT}{nF} * \ln \frac{P_{H_2O}}{P_{H_2} P_{O_2}}$$

El cálculo de V_r se describe en el apéndice a las condiciones que opera la celda.

$$V_r = 1,21722501 \text{ V}$$

En la tabla 15 se expresa el valor del potencial de Nernst para cada composición de las especies.

Tabla 15. Valores potencial de Nernst.

$y_{H_2, Canal}$	$y_{O_2, Canal}$	$y_{H_2O, Canal}$	$V_{Nernst}(v)$
0,2037	0,21	0,07	1,23053096
0,18552027	0,20618412	0,15924832	1,18778693
0,14036679	0,20165766	0,38091804	1,13406355
0,10218195	0,1964087	0,56838068	1,10027514
0,06688983	0,19042335	0,74164525	1,06767187
0,03319596	0,1836857	0,9070664	1,02514269
0,00050737	0,17617774	1,06756211	0,82336741
0	0,1678793	1,22469823	0
0	0,15876795	1,37943192	0
0	0,14881888	1,53237599	0
0	0,13800482	1,68394647	0

Como el potencial depende de las composiciones de las especies el octavo valor es cero porque la composición de hidrógeno en esa posición de la celda es igual a cero, es decir, el hidrógeno se agotó.

4.2.2 Cálculo de las pérdidas de activación. Las pérdidas de activación se calculan según el rango de las densidades de corriente establecidas anteriormente. La pérdida por activación es la pérdida que se da por la sobretensión del potencial electroquímico entre cada uno de los electrodos con el electrolito para que se dé la reacción electroquímica¹⁷⁹. El cálculo de la pérdida por activación se realizó con ayuda del capítulo de generalidades, polarización por activación¹⁸⁰.

Ecuación 40. Pérdidas por activación

$$\Delta V_{act} = \frac{2RT}{nF} \sinh^{-1} \left(\frac{J}{2J_0} \right)$$

Donde J_0 es la densidad de corriente para el ánodo o cátodo con un valor de 5300 y 2000 A/m² respectivamente¹⁸¹.

¹⁷⁹ VINOD, M; JANARDHANAN; OLAF, Deutschmann. Modeling of Solid-Oxide Fuel Cells. Disponible en: Zeitschrift fur Physikalische Chemie. Apr. Vol. 221, No. 4, p. 443-478

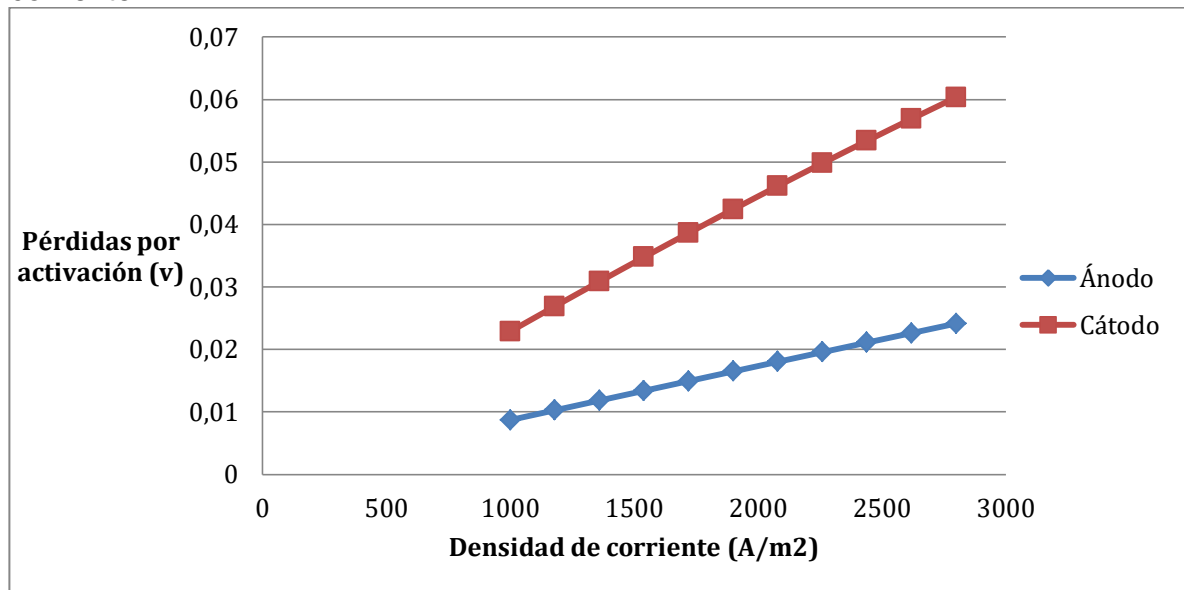
¹⁸⁰ CHAN, S; KHOR,K; XIA,Z. A complete polarization model of a solid oxide fuel cell and its sensitivity to the change of cell component thickness, Disponible en Journal of Power Sources. Vol. 93, No. 1, p. 130-140

¹⁸¹ Ibid., p 130-140

Tabla 16. Pérdidas por activación

$J(\text{A/m}^2)$	ΔV_{act} ánodo	ΔV_{act} cátodo
1000	0,0087	0,0229
1180	0,0102	0,0269
1360	0,0118	0,0309
1540	0,0133	0,0348
1720	0,0149	0,0386
1900	0,0164	0,0424
2080	0,0180	0,0461
2260	0,0195	0,0498
2440	0,0210	0,0534
2620	0,0226	0,0569
2800	0,0241	0,0603

Gráfica 5. Pérdidas por activación respecto con respecto a la densidad de corriente



La pérdida por activación es mayor en el cátodo porque el potencial electroquímico necesario para que el oxígeno llegue a la interfase del electrodo donde se da la reacción es mayor.

4.2.3 Cálculo de las pérdidas Óhmicas. Son las pérdidas que generan las dimensiones o geometrías del material al flujo de los iones y electrones para generar el potencial electroquímico. Cada sección de la celda contribuye una resistencia, especialmente la del electrolito porque permea el paso únicamente del oxígeno a la interfase del ánodo¹⁸².

Ecuación 41. Pérdidas Óhmicas

$$\Delta V_{ohm} = JR_{total}$$

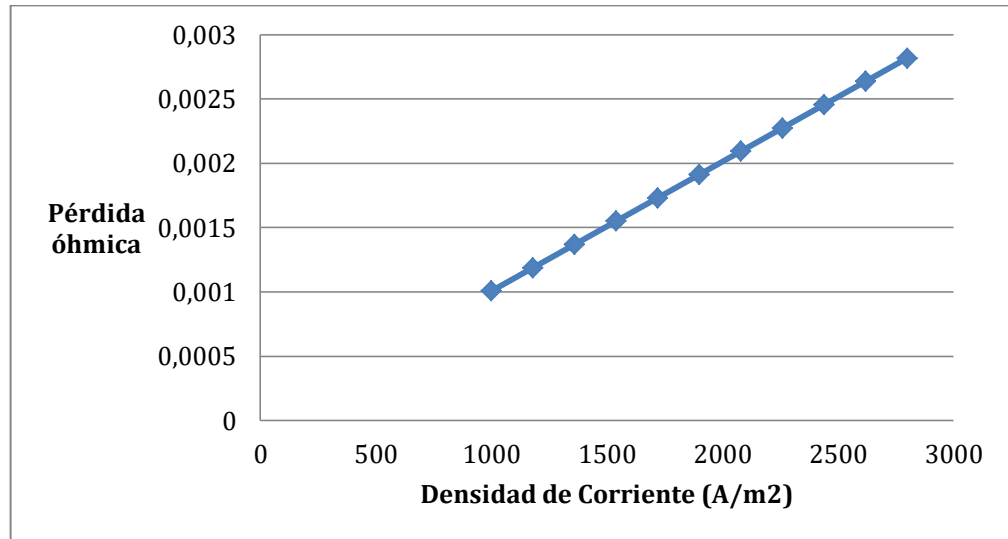
Dando como resultado los siguientes valores para pérdidas óhmicas respecto a la densidad de corriente.

Tabla 17. Pérdidas óhmicas

$J (A/m^2)$	ΔV_{ohm}
1000	0,00100617
1180	0,00118728
1360	0,00136839
1540	0,0015495
1720	0,00173061
1900	0,00191172
2080	0,00209283
2260	0,00227395
2440	0,00245506
2620	0,00263617
2800	0,00281728

¹⁸² ZHU, Huayang; KEE, Robert. A general Mathematical Model for Analyzing the Performance of Fuel-Cell Membrane-Electrode Assemblies. Disponible en: Elsevier, 2003, p. 61-74

Gráfica 6. Pérdidas óhmicas



El electrolito es la parte de la celda que tiene mayor resistencia Óhmica (resistencia del material).

4.2.4 Cálculo de las pérdidas por concentración. La pérdida por concentración es la reducción del voltaje por la falta de reactivos en la interfase entre el ánodo y el electrolito, causando caídas en el potencial. Esta pérdida es analizada respecto a la transferencia de masa a lo largo de la longitud del electrodo, que como anteriormente se expuso fue modelada según la Ley de Fick¹⁸³. La ecuación 42 y 43 representan la forma en la que se calculó el valor de las pérdidas por concentración del ánodo y cátodo

Ecuación 42. Pérdidas por concentración en el ánodo

$$\Delta V_{con,a} = -\frac{RT}{2F} \ln \left(\frac{1 - \frac{JRTz}{2FD_{eff} P_{H_2}^{Canal}}}{1 + \frac{JRTa}{2FD_{eff} P_{H_2O}^{Canal}}} \right)$$

Ecuación 43. Pérdidas por concentración en el cátodo

$$\Delta V_{con,c} = -\frac{RT}{4F} \ln \left(\frac{1}{P_{O_2}^{Canal}} - \left(\frac{1}{P_{O_2}^{Canal}} - 1 \right) \exp \left(\frac{JRTZ}{4FD_{O_2,eff} p_{H_2,Canal}} \right) \right)$$

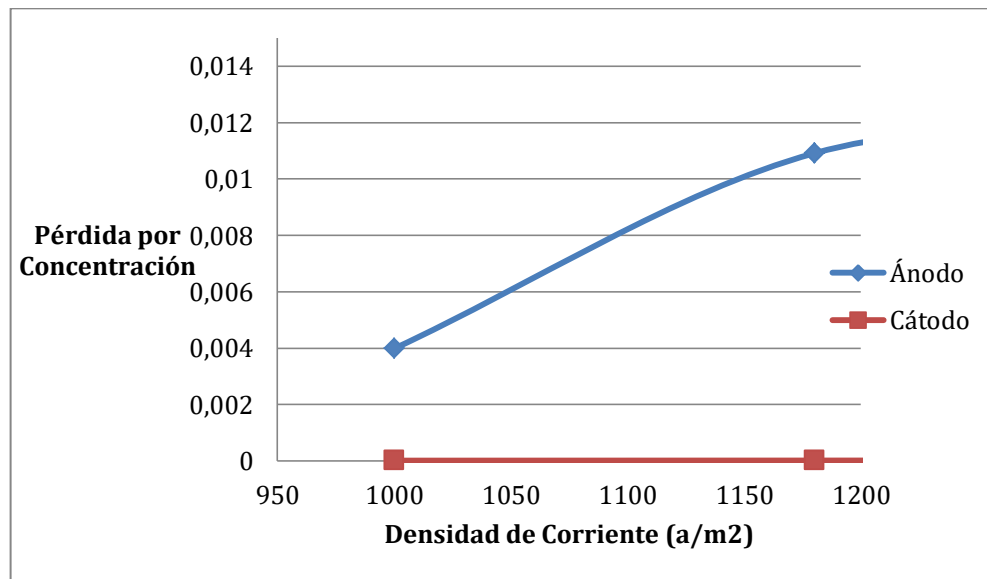
¹⁸³ Óp., cit. p.38

Con la ecuación 42 y 43 se obtienen los valores para las pérdidas de concentración en los canales de flujo.

Tabla 18. Pérdidas por concentración

J (A /m ²)	$D^{eff} H_2$	$P, H_2, Canal$	$\Delta V_{con,a}$	$P, O_2, Canal$	$\Delta V_{con,c}$	J (A/m ²)
1000	3,63973E-05	0,2037	0,003985432	0,07	0,21	1,52118E-05
1180	1,72921E-05	0,185520265	0,010912392	0,15924832	0,20618412	1,83719E-05
1360	2,3567E-05	0,140366789	0,01221101	0,38091804	0,20165766	2,17751E-05
1540	2,88735E-05	0,102181948	0,015559169	0,56838068	0,1964087	2,5485E-05
1720	3,37781E-05	0,066889834	0,022939638	0,74164525	0,19042335	2,95802E-05
1900	3,84605E-05	0,033195964	0,047792286	0,9070664	0,1836857	3,41601E-05
2080	4,30032E-05	0,00050737	0	1,06756211	0,17617774	3,93537E-05
2260	4,74509E-05	-0,03149779	0,048709818	1,22469823	0,1678793	4,53315E-05
2440	5,18305E-05	-0,06301308	0,022495412	1,37943192	0,15876795	5,23261E-05
2620	5,61594E-05	-0,09416331	0,014754648	1,53237599	0,14881888	6,06632E-05
2800	6,04494E-05	-0,12503323	0,010991243	1,68394647	0,13800482	7,0816E-05

Gráfica 7. Pérdidas por concentración con respecto a la densidad de corriente



Las pérdidas por concentración que generan una disminución significativa en el voltaje ideal de la SOFC se dan en el ánodo. Esto se debe al rango de densidad de corriente con el que se realizó el modelo matemático y al disminuir la concentración de hidrógeno la cantidad de agua es menor. En el cátodo el perfil de

concentración indica que la concentración del oxígeno se mantiene alta, sin afectar de manera significativa el voltaje ideal.

En la tabla 19 se encuentran los valores para los potenciales reales electroquímicos de la SOFC teniendo en cuenta las pérdidas antes nombradas las cuales afectan el voltaje real de la celda.

Tabla 19. Potencial electroquímico de la SOFC

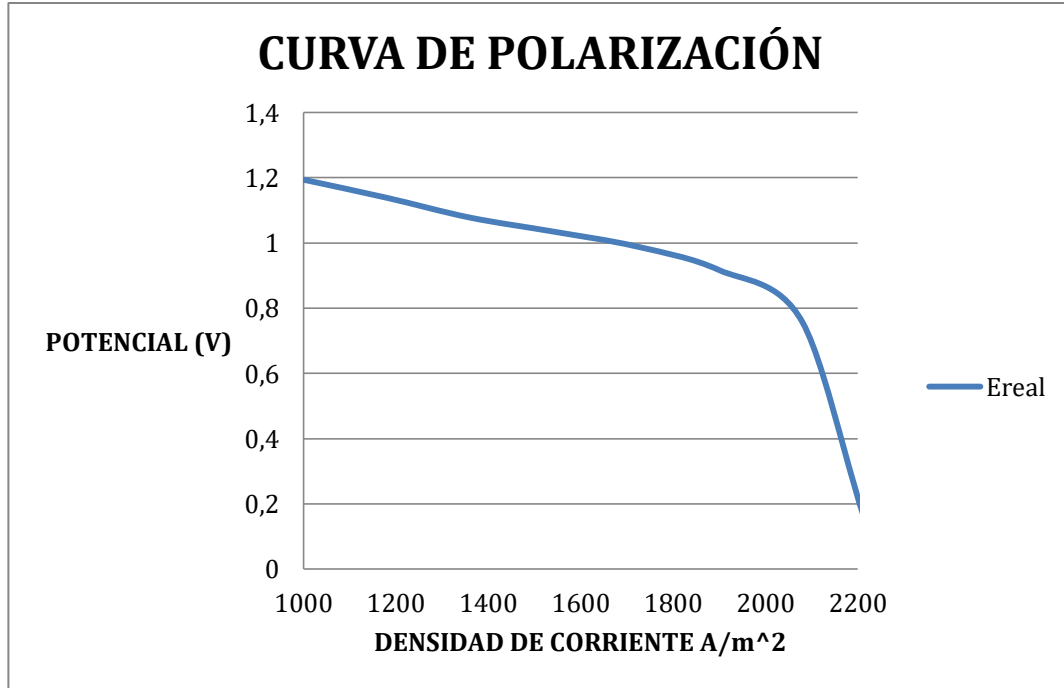
$J (A/m^2)$	$V_{real}(v)$
1000	1,1939
1180	1,1385
1360	1,0778
1540	1,0350
1720	0,9894
1900	0,9165
2080	0,7571
2260	0
2440	0
2620	0
2800	0

El potencial electroquímica de la celda de combustible de Óxido Sólido en la densidades de corriente inferiores a 2080 A/m² tienen un valor igual a cero porque el hidrógeno a esos valores de densidad de corriente ya se ha agotado.

4.3 CURVA DE POLARIZACIÓN

La curva de polarización está relacionada con el potencial electroquímico de la SOFC calculado a partir de la densidad de corriente. Se obtuvo un valor de potencial ideal igual a 1,194 V a una temperatura de 1073 K. En la gráfica 8 se demuestra el comportamiento del potencial según la densidad de corriente (A/m²).

Gráfica 8. Curva de polarización



En la gráfica 8 se puede ver el comportamiento del potencial según la densidad de corriente de una longitud específica en la celda, a menor densidad de corriente el potencial (V) es mayor, el potencial disminuye a medida que aumenta la densidad de corriente y la disminuye la composición de los reactivos en la celda. Por otra parte las pérdidas de activación son las que más afectan el valor del potencial de la celda, se evidencia que la pérdida por activación en el cátodo a una densidad de corriente baja (2000 A/m²) es la más significativa.

4.4 EFICIENCIA Y POTENCIAL DE LA CELDA DE COMBUSTIBLE DE ÓXIDO SÓLIDO

La eficiencia que tiene un proceso se puede evaluar con un enfoque térmico, puede ser evaluada con el valor de la energía total de la celda, para este proceso se realiza con la ayuda de la energía libre de Gibbs. También puede ser calculado usando la energía liberada en las diferentes transferencias de calor que se dan en el proceso con ayuda de la entalpía. En la ecuación 44 y 45 se expresan las dos maneras de calcular la eficiencia térmica para la celda, una en términos de entalpía y la otra en términos de energía libre de Gibbs.

Ecuación 44. Eficiencia térmica de la celda en términos de la energía libre de Gibbs.

$$\eta_{\Delta G} = \frac{\text{actual trabajo util}}{\text{maximo trabajo util}} = \frac{\text{Potencial} * \text{tiempo}}{\Delta G}$$

Ecuación 45. Eficiencia térmica de la celda en términos de la entalpia.

$$\eta_{\Delta H} = \frac{\text{actual trabajo util}}{\text{maximo trabajo util}} = \frac{\text{Potencial} * \text{tiempo}}{\Delta H}$$

Como $\Delta G = \Delta H - T * \Delta S$, entonces $\eta_{\Delta H} < \eta_{\Delta G}$, para la misma potencia de salida en la celda. La eficiencia de una celda de combustible de Óxido Sólido que se encuentra limitada por el contenido calórico (ΔH), se obtiene realizando una división entre el trabajo máximo y la entalpia como se ve en la ecuación 46

Ecuación 46. Eficiencia térmica de una SOFC

$$\eta_{\text{Celda de combustible}} = \frac{\Delta G}{\Delta H}$$

Ecuación 47. Determinación de la eficiencia térmica de una SOFC

$$\eta_{\text{Celda de combustible}} = \frac{157900}{241818} = 0.653 = 65,3\%$$

4.4.1 Potencia de la celda. La potencia de la celda está definida como la capacidad de trabajo por unidad de tiempo para la producción de energía eléctrica para un uso específico.

Ecuación 48. Potencia de la celda

$$P_{\text{celda}} = V * \bar{i}_{\text{total}} * A$$

La potencia está definida como el producto del voltaje que se genera a la salida de la celda por la intensidad total. El área de contacto corresponde al área superficial del electrodo que permea el hidrógeno hasta el interior de la celda.

La descripción paso a paso para determinar el área y la corriente total se encuentra de manera explícita en el trabajo de grado “Análisis del modelo matemático de una celda de combustible de Óxido Sólido (SOFC) empleando como combustible el gas de síntesis, producido en la gasificación de la biomasa” de Sergio Alejandro Fuquene Linares y Laura Tatiana López Puerto, donde el valor del área requerida para el funcionamiento de la transferencia de iones y electrones es:

$$A = 0,035 \text{ m}^2.$$

El valor de la corriente total se asume como $1500 \frac{A}{m^2}$. Finalmente la potencia de la celda se determina de la siguiente manera:

Ecuación 49. Determinación de la potencia de la celda

$$P_{celda} = 1,12 V * 1500 \frac{A}{m^2} * 0,035 m^2 = 58.79 W$$

El voltaje depende de variables como: la temperatura, la presión, la difusividad de los materiales de los electrodos y la densidad de corriente, siendo estos dos últimos los más relevantes para la obtención del potencial de la celda. La difusividad en este proceso es de gran importancia porque con esta se realizan los cálculos para determinar la composición de las especies en una determinada longitud (z) de la celda y de ellas depende el resultado en las pérdidas por concentración, óhmica y por activación que se tienen en cuenta para llegar al valor del potencial. Por otra parte la densidad de corriente es una variable de la cual depende todos los cálculos realizados, estando en un rango de 1000 a 3000 A/m², siendo este el rango que aplica para una celda unitaria y no para la pila de combustible en su totalidad.

4.4.2 Análisis económico. Según el valor que se obtuvo del potencial generado en una celda en el numeral 4.4.1 y considerando que el flujo volumétrico del gas de síntesis que se usa como combustible en la celda es uniforme durante toda la longitud de la pila de combustible de Óxido Sólido, la cual es conformada por 64 celdas¹⁸⁴. La potencia total de una pila de combustible teniendo en cuenta que está confirmada por 64 celdas es la siguiente:

$$Potencia Pila de Combustible = Potencia_{celda} * \#Celdas.$$

$$Potencia Pila de Combustible = 58,79 W * 64 Celdas.$$

$$Potencia Pila de Combustible = 3762,6 W$$

La potencia de la pila de combustible es de 3762.6 W que comparada con la potencia de un motor de un gasificador el cual es tomado como referencia es menor, dicho motor tiene un valor de potencia igual a 15000 W¹⁸⁵. Es decir para lograr la potencia generada por el motor de un gasificador usando la pila de combustible de Óxido Sólido, es necesario contar con 4 pilas de combustible o con 255,14 celdas de combustible para generar 15000 W.

¹⁸⁴ Alibaba. Ballard power marca 1012 acs 64 celular de células de combustible de hidrógeno 2.88 kw 2880 vatios pem. Disponible en: <https://spanish.alibaba.com/product-detail/ballard-power-hydrogen-fuel-cell-mark-1012-ac-64-cell-2-88-kw-2880-watt-pem-149493453.html>

¹⁸⁵ WEIER, K. L., et al. Denitrification and the Dinitrogen/Nitrous Oxide ratio as affected by soil water, available carbon, and nitrate. En: Soil Science Society of America Journal. vol. 57, no. 1, p. 66-72

Se realizó una comparación en costos entre el motor de gasificador y las pilas de combustible necesarias para generar la misma cantidad de potencia.

Tabla 20. Valor económico del motor del gasificador

Motor de Gasificador 15kW¹⁸⁶	
Precio (COP)	\$ 1.337.640,00

Tabla 21. Valor económico de una pila de combustible

4 Pilas de combustible de óxido sólido x64 celdas/Cu^{187 188}	
Precio (COP)	\$ 16.374.400,00

Analizando los valores obtenidos en la tabla 17 y 18 se llega a la conclusión de que usar pilas de combustible para generar 15000 W es 12.24 veces más costoso que emplear el un motor de gasificador para generar la misma cantidad de potencia, los valores antes determinados están relacionados con las consideraciones que se realizaron para la solución del presente modelo, donde únicamente el estudio se hizo para una celda y no para la pila en su totalidad, para lo cual es necesario comprobar experimentalmente los resultados del modelo. Para llegar a una conclusión de que dispositivo es mejor emplear es necesario analizar todas las condiciones que influyen en el correcto funcionamiento de ambos dispositivos.

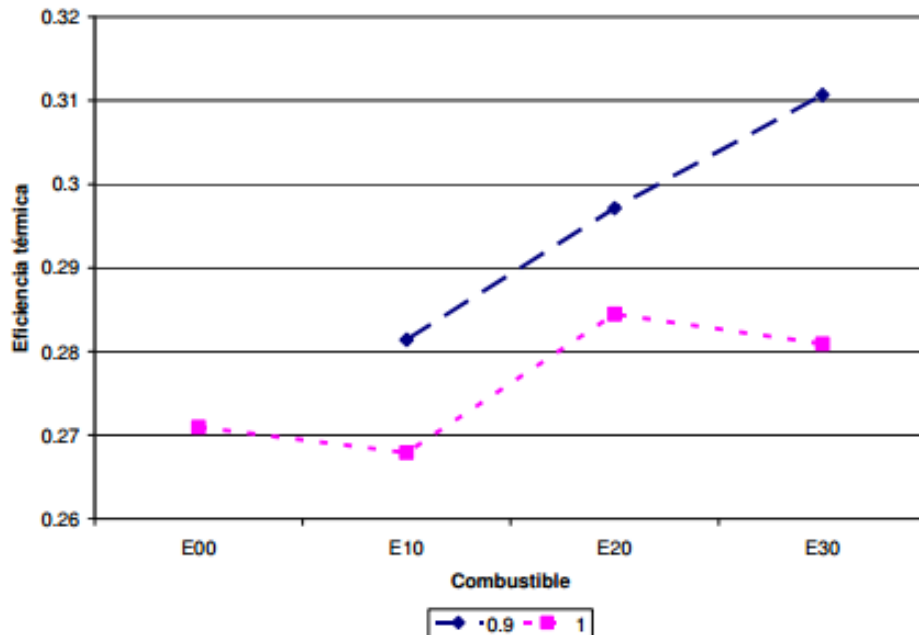
La eficiencia de la celda de combustible de Óxido Sólido es comparada con la eficiencia de un motor de combustión interna el cual es analizado en la tesis de doctorado “Modelado de la combustión de mezclas gasolina-etanol en motores de combustión interna” en donde se estudiaron diferentes casos, en donde cada uno de ellos tenían distintas concentraciones del combustible alimentado y el resultado final de la eficiencia nunca supero el 32%. En la figura 20 se describe lo antes dicho.

¹⁸⁶YEPES, Victor. Motores Endotérmicos O De Combustión Interna. <http://victoryepes.blogs.upv.es/2016/12/12/motores-endotermicos-o-de-combustion-interna/> ed. 2016.

¹⁸⁷Alibaba. 500 W 21 V Placa De Grafito PEM Pila Con Pila De Combustible De Hidrógeno De Humidificación Y Refrigeración Por Aire. [0]: <https://spanish.alibaba.com/product-detail/500w-21v-graphite-plate-pem-stack-with-self-humidifying-and-air-cooling-hydrogen-fuel-cell-60583014853.html> ed.

¹⁸⁸Alibaba. 5kw Células De Combustible De Hidrógeno. <https://spanish.alibaba.com/product-detail/5kw-hydrogen-fuel-cells-1981004008.html> ed.

Figura 20. Eficiencia térmica respecto a las diferentes concentraciones del combustible.



FUENTE: MANTILLA, Juan Miguel. Modelado de la combustión de mezclas gasolina-etanol en motores de combustión interna. Universidad Nacional de Colombia, 2010.

Se concluye que las celdas de combustible de Óxido Sólido comparadas con los motores de combustión interna presentan mayores eficiencias y a diferencia de los motores de combustión interna, las pilas de combustible no presentan pérdidas caloríficas por enfriamiento, debido a que a diferencia de los motores de combustión interna, las pilas de combustible no necesitan disminuir la temperatura del gas de síntesis porque como se dijo anteriormente estas operan a la misma temperatura a la que el gas sale del gasificador. Esta condición hace que se eviten costos y una mayor aparición de contaminantes en el combustible además de la pérdida calorífica.

5. CONCLUSIONES

- se obtuvieron cambios poco significativos en la composición del hidrógeno, pero se aprecia un aumento en el potencial de la celda (1,12 V), comparado con el potencial obtenido por el trabajo de grado titulado “Análisis del modelo matemático de una celda de combustible de óxido sólido (SOFC) empleando como combustible el gas de síntesis, producido en la gasificación de biomasa” el cual fue de 0,52 V.
- A partir de la solución del modelo matemático se logró analizar el comportamiento del gas de síntesis y el oxígeno, con el fenómeno difusivo en medios porosos (electrodos) empleando la Ley de Fick, donde la composición inicial de hidrógeno en el gas de síntesis es de 0,2037 (nodo 0) y al llegar al nodo 1 a una longitud exacta de 0,000362 m el hidrógeno tiene una composición igual a cero, es decir, se consumió por completo. Esto sucede porque las consideraciones para la solución de este modelo matemático no se acercan mucho a la realidad de un celda de combustible, pues, el modelo se evaluó en un estado estacionario, siendo este uno de los principales factores por los que la celda no presenta un resultado viable para el inicio de pruebas a nivel laboratorio, debido a que la celda opera de forma continua. Por otra parte los rangos de densidad de corriente (1000 a 3000) establecidos para la solución de este modelo son un parámetro que afecta el resultado obtenido, pues de este depende la cantidad de energía generada por la celda.
- Se realizó una comparación entre el potencial generado por una la pila de combustible a las condiciones establecidas y un motor de gasificador, donde la potencia de la pila (64 celdas) es igual a 3762,6 W y el del motor es de 15000 W, por esta razón la pila es 12,24 veces más costoso que el motor. Posteriormente se comparó la eficiencia de la pila con un motor de combustión interna encontrado en la literatura, donde la eficiencia de la pila es del 65% y la del motor no superó el 32%, sin embargo, los resultados del modelo obtenido no hacen a la SOFC un dispositivo viable en términos económicos, esto se debe a las consideraciones que se realizaron en este modelo matemático, pues, no se asume el balance de energía y la celda opera de manera continua pero para este modelo se asumió estacionario.
- Las condiciones y parámetros que se establecieron para dar la solución al modelo son uno de los principales factores por los que la celda no presenta un resultado viable para iniciar experimentación a nivel laboratorio, debido a que lo establecido difiere a la realidad en la que opera la celda.

6. RECOMENDACIONES

- Evaluar el modelo desarrollado mediante experimentación que permita obtener perfiles de densidad de corriente a lo largo de la celda de combustible para comparar resultados teóricos en el modelo con los obtenidos en el montaje.
- Evaluar el modelo de la celda de combustible de óxido sólido en estado no estacionario para acercarse un poco más a la realidad de la celda.
- Realizar el modelo del balance de materia en cada una de las secciones de la celda, anidado con el balance de energía que ocurre al interior de la misma.
- Investigar si la velocidad de reacción se encuentra en términos de concentración y difusividad para la reacción electrolítica.
- Realizar el desarrollo del modelo matemático con valores menores a los empleados para la longitud de la celda, dado que en el nodo 7 (0,012m) se empiezan a obtener valores negativos para la composición del hidrogeno.

BIBLIOGRAFIA

ACUÑA GARRIDO, Francisco; MUÑOZ YI, Ventura. Celdas de combustible. Una alternativa amigable con el medio ambiente para la generación de potencia y su impacto en el desarrollo sostenible de Colombia en el siglo xxi. En: Revista ingeniería y desarrollo. Vol. 10 (2001); p. 94-102.

AHO, ATTE, ANTONIETTI, MARKUS, ARNDT, SEBASTIAN, BEHRENS, MALTE, BILL, ECKHARD, BRANDNER, ARMIN, CENTI, GABRIELE, CLAUS, PETER, COX, NICHOLAS y SCHLÖGL, ROBERT. Chemical Energy Storage. 1. Aufl. ed. Berlin/Boston: Walter de Gruyter GmbH Co.KG, 2012. (no. Book, Whole). 9783110264074;3110264072;.

Alibaba. Ballard power marca 1012 acs 64 celular de células de combustible de hidrógeno 2.88 kw 2880 vatios pem. Disponible en: <https://spanish.alibaba.com/product-detail/ballard-power-hydrogen-fuel-cell-mark-1012-ac-s-64-cell-2-88-kw-2880-watt-pem-149493453.html>

ALVARADO FLORES, J. Estudio comparativo de las diferentes tecnologías de celdas de combustible. En: Boletín De La Sociedad Española De Cerámica Y Vidrio. no. 52, p. 105-117.

ÁLVAREZ, Ana; SOLÍS, Julio; DURÁN, Carmen. Coeficientes De Difusividad Aparente Durante La Extracción De Aceite De Almendras De Zapote Mamey (Pauteria Sapota). Tecnología, Ciencia, Educación, Vol.16, núm. 1, Instituto Mexicano de Ingenieros Químicos A.C, Monterrey, México, Junio 2001, p. 20-27

AMEDI, HAMID REZA; BAZOOYAR, BAHAMIN Y PISHVAIE, MAHMOUD REZA. Control of anode supported SOFCs (solid oxide fuel cells): Part I. mathematical modeling and state estimation within one cell. En: Energy. vol. 90, p. 605-621

APARICIO, MARIO, JITIANU, ANDREI y KLEIN, LISA C. Sol-gel processing for conventional and alternative energy. Springer Science & Business Media, 2012. 1461419573.

BOUDGHENE STAMBOULI, A; TRAVERSA, E. Solid Oxide Fuel Cells (SOFCs): A Review of an Environmentally Clean and Efficient Source Of Energy. Disponible en: ScienceDirect, Volume 6, Octubre 2002, p. 433-455

BUBAN, Peter, AND MARSHALL L. SCHMITT. Electricidad y electrónica básicas: conceptos y aplicaciones, McGraw-Hill Interamericana, 1983. ProQuest Ebook Central.

C. OZGUR, Colpan; IBRAHIM, Dincer; FERIDUN, Hamdullahpur. Thermodynamic modeling of direct internal reforming solid oxide fuel cells operating with syngas. Disponible en: ScienceDirect, Vol. 32, Mayo 2007, p.787-795. Mejorado por el autor

CARDONA ALZATE, Carlos Ariel; ORREGO ALZATE, Carlos Eduardo, avances investigativos en la producción de biocombustibles, las microalgas, fuente de aceite para la producción de biodiesel, primera edición, Manizales, Caldas, Colombia, Universidad Nacional de Colombia sede Manizales, Junio de 2009

CHOPRA, SANGEETA y JAIN, A. K. A review of fixed bed gasification systems for biomass. 2007

CLETO ORTIZ, Jorge Arnaldo; GÓMEZ OREA, Leonardo. Simulación y análisis de la dinámica de un motor de combustión interna de cinco cilindros manufacturado por Volkswagen, mediante el software Virtual Lab, Tesis profesional, Departamento de Ingeniería Industrial y Mecánica. Escuela de Ingeniería y Ciencias, Universidad de las Américas Puebla. Cholula, Puebla, México a 11 de enero de 2008.

D, SÁNCHEZ; R, CHACARTEGUI; A, MUÑOZ; T, SÁNCHEZ. Thermal and electrochemical model of internal reforming solid oxide fuel cells with tubular geometry, Disponible en ScienceDirect, ELSEVIER. Vol. 160, Issue 2, 6 October 2006, Pages 1074-1087.

DIMITRIJEVITS, M. I., et al. Reformado de metano con CO₂ sobre catalizadores de níquel: efectos de la técnica de preparación. En: Boletín De La Sociedad Chilena De Química. vol. 46, no. 1, p. 65-75

DONG Hao; JIANPING Shen; YONGPING, Hou; YI, Zhou; HONG Wang. An Improved Empirical Fuel Cell Polarization Curve Model Based on Review Analysis, International Journal of Chemical Engineering, Volume 2016 (2016), p. 10

ESTRADA, CARLOS AUGUSTO y MENESES, ALBERTO ZAPATA. Gasificación de biomasa para producción de combustibles de bajo poder calorífico y su utilización en generación de potencia y calor. En: Scientia et technica. 2004. vol. 2, no. 25

FONSECA GONZÁLEZ, NATALIA ELIZABETH. Estado del Arte del Uso del Gas de Gasificación Termoquímica de Biomasa (GG), en Motores de Combustión Interna Alternativos. 2003

(ANS), FUEL CELL NORWAY. Componentes. 2006).

GARCÍA FERNÁNDEZ, LUIS EDUARDO. Obtención de gas combustible a partir de la gasificación de biomasa en un reactor de lecho fijo. 2011

GARRIDO, FRANCISCO ACUÑA y YI, VENTURA MUÑOZ. Celdas de combustible.

GARRIDO, FRANCISCO ACUÑA y YI, VENTURA MUÑOZ. Celdas de combustible Una alternativa amigable con el medio ambiente para la generación de potencia y su impacto en el desarrollo sostenible de Colombia en el siglo xxi. En: Ingeniería y Desarrollo. 2001, no. 10

GARRIDO, FRANCISCO ACUÑA y YI, VENTURA MUÑOZ. Celdas de combustible Una alternativa amigable con el medio ambiente para la generación de potencia y su impacto en el desarrollo sostenible de Colombia en el siglo xxi. En: Ingeniería y desarrollo. 2001, no. 10

GONZÁLEZ HUERTA, R. G., LÓPEZ CHÁVEZ, E. y VELÁZQUEZ MORALES, B. Hidrógeno: Introducción a la energía limpia. En: Universidad Autónoma de la Ciudad de México, México. 2009

GRANDE RUÍZ, ALFONSO. Análisis experimental del funcionamiento de una celda de combustible de metanol directo en diferentes condiciones operativas. Sevilla (España): Universita Di Roma. Departamento de Termodinámica, 2014. 58 p.

GRAÑA MAGARIÑOS, JUAN JOSÉ. Pilas de Combustible de Óxidos Sólidos para Generación Distribuida de Electricidad. Publicado en revista: PublicacionesDidacticas, Mayo 2015. Pag. 44

GROVE, WILLIAM. Las celdas de combustible: verdades sobre la generación de electricidad limpia y eficiente vía electroquímica. 1999

GROVE, WILLIAM. Las celdas de combustible: verdades sobre la generación de electricidad limpia y eficiente vía electroquímica. 1999

INSTITUTO COLOMBIANO DE NORMAS TÉCNICAS Y CERTIFICACIÓN. Documentación. Presentación de tesis, trabajos de grado y otros trabajos de investigación. NTC 1486. Sexta actualización. Bogotá: El instituto, 2008. 110 p.

_____. Referencias bibliográficas, contenido, forma y estructura. NTC 5613. Bogotá: El instituto, 2008. 45 p.

_____.Referencias documentales para fuentes de informaciones electrónicas.
NTC 4490. Bogotá: El instituto, 1998. 33 p.

JIMENEZ, R; OTÁLORA, F; KLEITZ, M. Efecto sobre la reacción de oxígeno de la forma y la microestructura de contacto electrodo-electrolito en electrodos a difusión interna en celdas de combustible de óxido sólido (SOFC). Disponible en: Boletín de la Sociedad Española de Cerámica y Vidrio, 1999, p. 625-629

JOONGUEN, Park; YU-MI, Kim y JOONGMYEON, Bae. A numerical study on the heat and mass transfer characteristics of metal-supported solid oxide fuel cells. Disponible en: ScienceDirect, Vol. 36, febrero 2011, p. 3167-3178

JUNXI, Jia; ABULITI, Abudula; LIMING, Wei; BAOZHI, Sun; YUE, Shi. Thermodynamic modeling of an integrated biomass gasification and solid oxide fuel cell system, Revista: ScienceDirect, Volumen 81. Septiembre 2015, p. 400-410

KIVISAARI, P; BJÖRNBOM, C; SYLWAN, B; JACQUINOT, D; JANSEN, A. The Feasibility Of A Coal Gasifier Combined With A High-Temperature Fuel Cell, Disponible en: ScienceDirect (2004), p. 167-180

KOH, Joon-Ho, et al. Thermodynamic analysis of carbon deposition and electrochemical oxidation of methane for SOFC anodes. En: Electrochemical and Solid-State Letters. vol. 4, no. 2, p. A15

LAN, W.; CHEN, G.; ZHU, X.; WANG, X.; LIU, C.; XU, B. Biomass gasification-gas turbine combustion for power generation system model based on ASPEN PLUS. En: *Science of The Total Environment*, 628, 1278-1286, 2018.

MAYÉN, Rodrigo. Celdas de Combustible de Óxido Sólido..... ¿Una de las Soluciones al Problema Energético?, Disponible en revista *Ide@s CONCYTEG*, 6. Junio 2011, p. 647-661

MCKENDRY, PETER. Energy production from biomass (part 2): conversion technologies. England: Elsevier Ltd 2002), p. 47-54.

MINFANG, Han; XIULING, Tang; HUIYAN, Yin; SUPING, Peng. Fabrication, microstructure and properties of a YSZ electrolyte for SOFCs. Disponible en: ScienceDirect, Volumen 165. 20 de marzo de 2007, p.757-763

MOGNI, L; ESQUIVEL, M; BAQUE, L; MONTENEGRO, A; SERQUIS, A; ARCE, M; CHANQUIA, C; TROIANI, H; NAPOLITANO, F; BASBUS, J; CANEIRO, A. Integración De La Tecnología De Celdas De Óxido Sólido Reversibles A Una Planta Nuclear Para La Producción De Combustible Y Generación Eléctrica. Departamento De Caracterización De Materiales- Centro Atómico Bariloche. Comisión Nacional De Energía Atómica, p. 1-43

MORENO VILLANUEVA, José Antonio. La nueva nomenclatura electroquímica y su recepción en español, Revista de Investigación Lingüística, 2017.

NAVARRO CINTAS, Esther Análisis del proceso de síntesis de gas natural de sustitución (SNG) a partir de biomasa. Trabajo de grado Ingeniería Química, Dpto. de Ingeniería Química y Ambiental, Escuela Técnica Superior de Ingeniería Universidad de Sevilla. Sevilla, Septiembre 2014, p.13

ORTIZ, JORGE ARNALDO CLETO. Simulación y análisis de la dinámica de un motor de combustión interna de cinco cilindros manufacturado por Volkswagen, mediante el software Virtual Lab. 2008

OZGUR COLPAN, C; DINCER, Ibrahim; HAMDULLAHPUR, Feridun. Thermodynamic Modeling Of Direct Internal Reforming Solid Oxide Fuel Cells Operating With Syngas, Publicado En: International Journal Of Hydrogen Energy 32. 2017, Disponible en: ScienceDirect, p. 787-795

PALSSON, A. SELIMOVIC, L. SJUNNESSON. Combined Solid Oxide Fuel Cell And Gas Turbine Systems For Efficient Power And Heat Generation, Disponible en: ScienceDirect, 86 (2000), p. 442-448

PADTURE, NITIN P., GELL, MAURICE y JORDAN, ERIC H. Thermal Barrier Coatings for Gas-Turbine Engine Applications. En: Science. 2002. vol. 296, no. 5566, p. 280-284

PÉREZ, JUAN, BORGE, DAVID y AGUDELO, JOHN. Proceso de gasificación de biomasa: una revisión de estudios teórico- experimentales. En: Revista Facultad de Ingeniería Universidad de Antioquia. 2010, no. 52, p. 95-107

PETRUZZI, L., COCCHI, S. y FINESCHI, F. A global thermo-electrochemical model for SOFC systems design and engineering. En: Journal of Power Sources. 2003. vol. 118, no. 1-2, p. 96-107

PETRUZZI, L., COCCHI, S. y FINESCHI, F. A global thermo-electrochemical model for SOFC systems design and engineering. En: Journal of Power Sources. 2003/05/25/, 2003. vol. 118, no. 1, p. 96-107

POSADA, Dionisio. Introducción a la electroquímica, Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA). La Plata, ARGENTINA. 1980, p. 25-28.

COMBUSTIBLE, PILAS DE. AFC - Alcalina. 2013).

REVIE, R. WINSTON. Corrosion and corrosion control: an introduction to corrosion science and engineering. John Wiley & Sons, 2008. 0470277254.

R. WINSTON REVIE; HERBERT H. UHLIG. Corrosion and corrosion control, An Introduction to Corrosion Science and Engineering, cuarta edición. John Wiley & Sons, 2008. Pag. 12

RAMAKRISHNA, P. A; YANG, Shi; SOHN, C. H. Innovative design to improve the power density of solid oxide fuel cell. Disponible en: ScienceDirect, Vol. 158, p. 378-384

SÁNCHEZ BASTARDO, NURIA. Obtención de gas de síntesis a partir de biomasa utilizando catalizadores de níquel. 2014

STOLTEN, Detlef; EMONTS, Bernd, Editores. Fuel Cell Science and Engineering: Materials, Processes, Systems and Technology. Editorial: John Wiley & Sons, 2012. ProQuest EBook Central.

TAYLOR, Ross y KRISHNA, Rajamani. Multicomponent Mass Transfer. Editorial: John Wiley & Sons. 1993

THINH X, Ho. Dynamic Characteristics of a Solid Oxide Fuel Cell with Direct Internal Reforming Methane. Disponible en: ScienceDirect, Volumen 113, 1 de abril de 2016, p. 44-51

VALERY A. DANILOV; MOSES O.TADE. A New Technique Of Estimating Anodic And Cathodic Charge Transfer Coefficients From SOFC Polarization Curves. Published By Elsevier Ltd. 2009

VILLANUEVA, JOSÉ ANTONIO MORENO. La nueva nomenclatura electroquímica y su recepción en español. En: Revista de Investigación Lingüística. 2017. vol. 20, p. 97-118

VILLANUEVA, JOSÉ ANTONIO MORENO. Manuala nueva nomenclatura electroquímica y su recepción en español. En: Revista de Investigación Lingüística. 2017, 2017. vol. 20, p. 97-118

SUSTENTABLE, VIVIENDA. Celdas de combustible. 2010).

VINOD, M; JANARDHANAN; OLAF, Deutschmann. Modeling of Solid-Oxide Fuel Cells. Disponible en: Zeitschrift fur Physikalische Chemie. Apr. Vol. 221, No. 4, p. 443-478

VYAS, GAYATRI, ELHAMID, MAHMOUD ABD y TRABOLD, THOMAS. Stable conductive and hydrophilic fuel cell contact element. Google Patents 2007).

WEIER, K. L., et al. Denitrification and the Dinitrogen/Nitrous Oxide ratio as affected by soil water, available carbon, and nitrate. En: Soil Science Society of America Journal. vol. 57, no. 1, p. 66-72

WIEMANN, S.; HEGNER, R.; ATAKAN, B.; SCHULZ, C.; KAISER, S. A. Combined production of power and syngas in an internal combustion engine—Experiments and simulations in SI and HCCI mode. En: Fuel, 2018, vol. 215, p. 40-45.2018. Modificado por el autor.

WOLFE, DREW H. Química general, orgánica y biológica (2a. ed.). México, D.F., MEXICO: McGraw-Hill Interamericana, 1996. 9781615028139.

WOLFE, DREW H. Química general, orgánica y biológica (2a. ed.). México, D.F., MEXICO: McGraw-Hill Interamericana, 1996. 9781615028139.

YEPES, Victor. Motores Endotérmicos O De Combustión Interna. <http://victoryepes.blogs.upv.es/2016/12/12/motores-endotermicos-o-de-combustion-interna/> ed. 2016.

ZHU, Huayang; KEE, Robert. A general Mathematical Model for Analyzing the Performance of Fuel-Cell Membrane-Electrode Assemblies. Disponible en: Elsevier, 2003, p. 61-74

ANEXO

ANEXO A. CÁLCULO DE PROPIEDADES TERMODINÁMICAS

El cálculo de las propiedades termodinámicas (entalpía, y la energía libre de Gibbs con su corrección por temperatura) es necesario para la determinar la cantidad de energía generada por la celda de combustible de Óxido Sólido en términos de voltaje.

La entalpía es una propiedad que identifica la cantidad de energía que se encuentra en el sistema. Las propiedades termodinámicas a calcular deben tener una corrección por temperatura y presión, según las condiciones a las que opera el sistema.

$$\text{Propiedad} \rightarrow f(P, T) \quad (1)$$

Donde el cálculo de la entalpía se realiza a partir de las entalpías de formación de cada una de las reacciones que se tienen en cuenta en el sistema.

$$\Delta H(T) = \Delta H(T_{ref.}) + \int_{T_{ref.}}^T C_p(T) dT \quad (2)$$

La determinación de la entalpía con la temperatura corregida se puede realizar usando la capacidad calorífica (C_p) porque se considera un gas ideal y la entalpía estaría únicamente en función de la temperatura.

$$\frac{C_p^{gi}}{R} = A + B T + C T^2 + D T^{-2}$$

En donde este cálculo se realizó con ayuda del libro de Excel llamado constantes de equilibrio químico que se adjunta al final del presente anexo, el cual fue facilitado por el docente Felipe Correa y creado por el docente Jaime Arturo Calvache.

Los valores que se tomaron en cuenta para el cálculo de la entalpía son los siguientes para la reacción electrolítica.

ESTEQUIOMETRIA DE LA REACCION				
	A	B	C	D
Especie	H2	O2	H2O	0
No. Compuesto	36	45	48	0
Coeficiente estequiom.	a	b	C	D
	1	0,5	1	0

CONSTANTES CAPACIDAD CALORIFICA				
Constante	Especies			
	H2	O2	H2O	0
A	3,249	3,639	3,47	0
B	4,22E-04	5,06E-04	1,45E-03	0
C	0	0	0	0
D	8,30E+03	-2,27E+04	1,21E+04	0
T (max, K)	3000	2000	2000	0

DATOS TERMODINAMICOS DE FORMACION				
Constante	Especies			
	H2	O2	H2O	0
$\Delta H^0_{298 K} \text{ (J/mol)}$	0	0	-241818	0

CALCULOS DE REACCION	
Δ Capacidad calorífica :	
$\Delta A =$	-1,5985
$\Delta B =$	0,000775
$\Delta C =$	0
$\Delta D =$	15150
Entalpía:	
$\Delta H^0_{298 K} \text{ (J/mol)}$	-241818

Para la reacción reformado de metano.

ESTEQUIOMETRIA DE LA REACCION				
Especie	A	B	C	D
	CH4	H2O	CO	H2
No. Compuesto	1	48	32	36
Coefficiente estequiom.	a	b	C	D
	1	1	1	3

CONSTANTES CAPACIDAD CALORIFICA				
Constante	Especies			
	CH4	H2O	CO	H2
A	1,702	3,47	3,376	3,249
B	9,08E-03	1,45E-03	5,57E-04	0,000422
C	-2,164E-06	0	0	0
D	0,00E+00	1,21E+04	-3,10E+03	8300

T (max, K)	1500	2000	2500	3000
DATOS TERMODINAMICOS DE FORMACION				
Constante	Especies			
	CH4	H2O	CO	H2
$\Delta H^0_{298 K} (J/mol)$	-74520	-241818	-110525	0

CALCULOS DE REACCION

Δ Capacidad calorífica :

$\Delta A =$	7,951
$\Delta B =$	-0,008708
$\Delta C =$	2,164E-06
$\Delta D =$	9700

Entalpía:

$\Delta H^0_{298 K} (J/mol)$	205813
------------------------------	--------

Para la reacción de desplazamiento del agua (wáter gas shift)

ESTEQUIOMETRIA DE LA REACCION

	A	B	C	D
Especie	CO	H2O	CO2	H2
No. Compuesto	32	48	33	36
Coefficiente estequiom.	a	b	C	D
	1	1	1	1

CONSTANTES CAPACIDAD CALORIFICA

Constante	Especies			
	CO	H2O	CO2	H2
A	3,376	3,47	5,457	3,249
B	5,57E-04	1,45E-03	1,05E-03	0,000422
C	0	0	0	0
D	-3,10E+03	1,21E+04	-1,16E+05	8300
T (max, K)	2500	2000	2000	3000

DATOS TERMODINAMICOS DE FORMACION				
Constante	Especies			
	CO	H2O	CO2	H2
$\Delta H^0_{298\text{ K}} \text{ (J/mol)}$	-110525	-241818	-393509	0

CALCULOS DE REACCION

Δ Capacidad calorífica :

$\Delta A =$	1,86
$\Delta B =$	-0,00054
$\Delta C =$	0
$\Delta D =$	-116400

Entalpía:

$\Delta H^0_{298\text{ K}} \text{ (J/mol)}$	-41166
---	--------

La energía libre de Gibbs es una propiedad termodinámica intensiva es decir analiza la espontaneidad o el equilibrio que puede alcanzar la reacción. La energía libre de Gibbs con su respectiva corrección por temperatura se encuentra en de manera explícita en el libro de Excel llamado constantes de equilibrio químico que se adjunta al final del presente anexo, el cual fue facilitado por el docente Felipe correa y creado por el docente Jaime Arturo Calvache. A continuación se presentan las tablas con parámetros y resultados finales para la energía libre de Gibbs y contantes de equilibrio cal culadas a partir de la energía libre de Gibbs para las 3 reacciones.

Para la reacción electrolítica

DATOS TERMODINAMICOS DE FORMACION				
Constante	Especies			
	H2	O2	H2O	0
$\Delta G^0_{298\text{ K}} \text{ (J/mol)}$	0	0	-228572	0

CALCULOS DE REACCION

Δ Capacidad calorífica :

$\Delta A =$	-1,5985
$\Delta B =$	0,000775
$\Delta C =$	0
$\Delta D =$	15150

Energía libre de Gibbs:

$\Delta G^0_{298 K}$ (J/mol)	-228572
------------------------------	---------

CALCULOS FINALES

$$\frac{\Delta G^0}{RT} = -2,113E+01$$

$$\Delta G^0 = -1,885E+05$$

$$\text{Ln } K = 21,12780$$

$$K = 1498605198$$

Reacción de reformado de metano

DATOS TERMODINAMICOS DE FORMACION

Constante	Especies			
	CH4	H2O	CO	H2
$\Delta G^0_{298 K}$ (J/mol)	-50460	-228572	-137169	0

CALCULOS DE REACCION

Δ Capacidad calorífica :

$$\Delta A = 7,951$$

$$\Delta B = -0,008708$$

$$\Delta C = 2,164E-06$$

$$\Delta D = 9700$$

Energía libre de Gibbs :

$$\Delta G^0_{298 K}$$
 (J/mol) 141863

CALCULOS FINALES

$$\frac{\Delta G^0}{RT} = -5,101E+00$$

$$\Delta G^0 = -4,551E+04$$

$$\text{Ln } K = 5,10086$$

$$K = 164,163325$$

Reacción de desplazamiento del agua (wáter gas shift)

DATOS TERMODINAMICOS DE FORMACION

Constante	Especies			
	CO	H2O	CO2	H2

$\Delta G^0_{298\text{ K}} \text{ (J/mol)}$	-137169	-228572	-394359	0
---	---------	---------	---------	---

CALCULOS DE REACCION

Δ Capacidad calorífica :

$\Delta A =$	1,86
$\Delta B =$	-0,00054
$\Delta C =$	0
$\Delta D =$	-116400

Energía libre de Gibbs :

$\Delta G^0_{298\text{ K}} \text{ (J/mol)}$	-28618
---	--------

CALCULOS FINALES

$$\frac{\Delta G^0}{RT} = -9,821\text{E-}02$$

$$\Delta G^0 = -8,762\text{E+}02$$

$$\text{Ln Keq} = 0,09821$$

$$\text{Keq} = 1,10319092$$

A continuación se adjunta el Excel con los correspondientes cálculos y resultado antes nombrados.



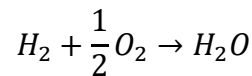
Constantes de
Equilibrio químico_est

ANEXO B. CÁLCULO DEL POTENCIAL REVERSIBLE DE LA CELDA.

A partir de la ecuación de Nernst y la relación que tiene con la ley de Faraday, el potencial máximo basado en el equilibrio en función de la temperatura, se expresa según la energía libre de Gibbs. Este potencial es el parámetro inicial para realizar el cálculo de los voltajes evaluados con la ecuación de Nernst y así realizar las curvas de polarización.

Asumiendo:

- Temperatura de referencia de 25°C
- Temperatura del sistema 800°C
- Presión atmosférica
- Reacción electroquímica.
- Reacción desplazamiento del agua (wáter gas shift)
- Reacción reformado de metano



Se calcula las propiedades de referencia a las condiciones de referencia

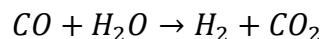
$$\Delta G = \Delta G_{f(H_2O)_g} - \Delta G_{f(H_2)_g} - 1/2\Delta G_{(O_2)_g}$$

$$\Delta G = \left(-241818 \frac{J}{mol} * 1\right) - \left(0 \frac{J}{mol * K} * 1\right) - \left(\frac{1}{2} * 0 \frac{J}{mol * K}\right)$$

$$\Delta G = -228578 \frac{J}{mol} \text{ A } 298.15 \text{ K}$$

El ΔG a 1073 K es igual a -1,885E+05 y el valor de C_{RF} es igual a 100 para las dos reacciones (reformado de metano y desplazamiento del agua (wáter gas shift)).

Reacción de desplazamiento del agua (wáter gas shift)



Se calcula las propiedades de referencia a las condiciones de referencia

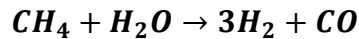
$$\Delta G = \Delta G_{f(H_2)_g} + \Delta G_{(CO_2)_g} - \Delta G_{f(H_2O)_g} - \Delta G_{f(CO)_g}$$

$$\Delta G = \left(0 \frac{J}{mol} * 1\right) + \left(-394359 \frac{J}{mol} * 1\right) - \left(-228572 \frac{J}{mol * K} * 1\right) - \left(-137169 \frac{J}{mol * K}\right) * 1$$

$$\Delta G = -28618 \frac{J}{mol} \text{ A } 298.15 \text{ K}$$

El ΔG a 1073 K es igual a -8,762E+02

Reacción de reformado de metano



Se calcula las propiedades de referencia a las condiciones de referencia

$$\Delta G = 3\Delta G_{f(H_2)_g} + \Delta G_{f(CO)_g} - \Delta G_{(CH_4)_g} - \Delta G_{f(H_2O)_g}$$

$$\Delta G = \left(0 \frac{J}{mol} * 3\right) + \left(-137169 \frac{J}{mol} * 1\right) - \left(-50460 \frac{J}{mol * K} * 1\right) - \left(-228572 \frac{J}{mol * K}\right) * 1$$

$$\Delta G = 141863 \frac{J}{mol} \text{ A } 298.15 \text{ K}$$

El ΔG a 1073 K es igual a -4,551E+04

Para la temperatura (1073 K) en la que opera la celda de combustible modelada en potencial E_r es igual a:

$$E_r = \frac{\Delta G_{r1} + \Delta G_{r2} + \Delta G_{r3}}{nF} = \frac{-1,885E + 05 + (-8,762E + 02) + (-4,551E + 04)}{2 \frac{mol e^-}{mol combustible} * 96487 \frac{C}{mol e^-}}$$

$$= 1,2172 \frac{J}{C} = 1,2172 \text{ V}$$

