



EDUCACIÓN
SECRETARÍA DE EDUCACIÓN PÚBLICA



TECNOLÓGICO
NACIONAL DE MÉXICO

Tecnológico Nacional de México

Centro Nacional de Investigación
y Desarrollo Tecnológico

Tesis de Maestría

Modelado Dinámico y Simulación por Componentes
de una Celda Tipo PEM

presentada por

Ing. Gerardo Reyes Barragan

como requisito para la obtención del grado de
**Maestro en Ciencias en Ingeniería
Electrónica**

Director de tesis

Dra. Ma. Guadalupe López López

Codirector de tesis

Dr. Víctor Manuel Alvarado Martínez

Cuernavaca, Morelos, México. Febrero de 2020.



Centro Nacional de Investigación y Desarrollo Tecnológico
Departamento de Ingeniería Electrónica

Cuernavaca, **07/julio/2021**
Mor., **DIE/146/2021**
No. de Oficio: **Aceptación** de
Asunto: **documentos de tesis**

DR. CARLOS MANUEL ASTORGA ZARAGOZA
SUBDIRECTOR ACADÉMICO
PRESENTE

Por este conducto, los integrantes de Comité Tutorial del Ing. Gerardo Reyes Barragan, con número de control M19CE043 de la Maestría en Ciencias en Ingeniería Electrónica, le informamos que hemos revisado el trabajo de tesis profesional titulado "Modelado Dinámico y Simulación por Componentes de una Celda Tipo PEM" y hemos encontrado que se han realizado todas las correcciones y observaciones que se le indicaron, por lo que hemos acordado aceptar el documento de tesis y le solicitamos la autorización de impresión definitiva.

DIRECTOR DE TESIS

Dra. Ma. Guadalupe López López
Doctora en Ciencias en Ingeniería
Química
Cédula profesional 7980045

CODIRECTOR DE TESIS

Dr. Víctor Manuel Alvarado Martínez
Doctor en Ciencias en Ingeniería
Electrónica
Cédula profesional 8031070

REVISOR 1

Dr. Ricardo Fabricio Escobar Jiménez
Doctor en Ciencias en Ingeniería
Electrónica
Cédula profesional 7534115

REVISOR 2

Dr. Enrique Quintero Mármol Márquez
Doctor en Ciencias en Ingeniería Química
Cédula profesional 10259407

C.p. Lic. Silvia del Carmen Ortiz Fuentes- Jefa del Departamento de Servicios Escolares
Estudiante
Expediente

HEE/mrsr.



Interior Internado Palmira S/N, Col. Palmira, C. P. 62490, Cuernavaca, Morelos
Tel. 01 (777) 3627770, ext. 2225, e-mail: die@cenidet.tecnm.mx tecnm.mx | cenidet.tecnm.mx



2022 Flores
Año de Magón
PRELACION DE LA REVOLUCIÓN MEXICANA

Cuernavaca, Mor.,

27/enero/2022

No. de Oficio:

SAC/28/2022

Asunto:

Autorización de
impresión de tesis

**GERARDO REYES BARRAGAN
CANDIDATO AL GRADO DE MAESTRO EN CIENCIAS
EN INGENIERÍA ELECTRÓNICA
PRESENTE**

Por este conducto tengo el agrado de comunicarle que el Comité Tutorial asignado a su trabajo de tesis titulado "Modelado Dinámico y Simulación por Componentes de una Celda Tipo PEM", ha informado a esta Subdirección Académica, que están de acuerdo con el trabajo presentado. Por lo anterior, se le autoriza a que proceda con la impresión definitiva de su trabajo de tesis.

Esperando que el logro del mismo sea acorde con sus aspiraciones profesionales, reciba un cordial saludo.

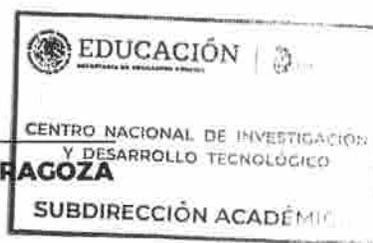
ATENTAMENTE

"Excelencia en Educación Tecnológica"

"Educación Tecnológica al Servicio de México"



**DR. CARLOS MANUEL ASTORGA ZARAGOZA
SUBDIRECTOR ACADÉMICO**



C.c.p. Lic. Silvia del Carmen Ortiz Fuentes, Jefa del Departamento de Servicios Escolares
Expediente
CMAZ/CHG

Dedicatoria

A mis padres: Cipriano Reyes Hernández y Virginia Barragan Pérez.

A mis hermanos y hermanas: Juan, Luis, José, Inés, Ana.

Agradecimientos

Al Centro Nacional de Investigación y Desarrollo Tecnológico por brindarme la oportunidad de cursar un posgrado en esta gran institución académica.

Al TecNM por facilitar sus instalaciones para el desarrollo de mi trabajo y formación académica.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología por facilitarme los recursos necesarios, a través de una beca de posgrado, para permitirme una dedicación de tiempo completo en la maestría.

A mis asesores de tesis: Dra. Ma. Guadalupe López López y Dr. Víctor Manuel Alvarado Martínez, por guiarme durante todo el desarrollo de este trabajo, por su paciencia y confianza.

A mis compañeros de generación en la Maestría: Felipe, Max, Irbin, Antonio y Mujica, por compartir sus conocimientos y tiempo; y forzarme a mejorar para no quedarme atrás.

A mis compañeros asesorados, por sus consejos y observaciones para con mi trabajo de tesis; y por compartir sus conocimientos y experiencia.

A mis revisores: Dr. Ricardo Fabricio Escobar Jiménez y Dr. Enrique Quintero Mármol Márquez, por sus valiosos comentarios que ayudaron a mejorar este trabajo. Además de su tiempo y disponibilidad.

A mis padres, hermanos, hermanas y cuñadas, sin su sacrificio no hubiese podido llegar hasta este punto.

A todos los que de forma directa e indirectamente han contribuido para permitirme llegar a la culminación de este trabajo.

Resumen

En este trabajo se desarrolló una librería enfocada a sistemas de generación de energía con celdas de combustible, para el entorno de programación del software Matlab-Simulink. Se añadió un modelo dinámico multifísico formulado a partir de ecuaciones de sentido físico, tomadas en la literatura científica. Estas describen el comportamiento de la celda en dominio eléctrico, fluídico y térmico. La validación del modelo multifísico se realizó comparando datos experimentales reportados en la literatura con la respuesta del modelo simulado bajo las mismas condiciones.

Se construyó un sistema básico de generación de energía con celdas de combustible en un entorno simulado; el simulador incluye el modelo multifísico desarrollado y componentes auxiliares. Se diseñaron controladores para el subsistema de gestión de aire y subsistema de gestión térmica, donde el objetivo es regular el exceso de alimentación de oxígeno y temperatura en la celda respectivamente. Finalmente se realizaron pruebas y evaluaciones de los controladores, considerando posibles escenarios de operación.

Abstract

In this work, a library focused on fuel cell power generation systems was developed for the Matlab-Simulink software programming environment. A multiphysics dynamic model formulated from equations of physical meaning, taken from the scientific literature, was added. These describe the behavior of the cell in the electrical, fluidic and thermal domains. The validation of the multiphysics model was performed by comparing experimental data reported in the literature with the response of the simulated model under the same conditions.

A basic fuel cell power generation system was built in a simulated environment; The simulator includes the developed multiphysics model and auxiliary components. Controllers were designed for the air management subsystem and the thermal management subsystem, where the objective is to regulate the excess oxygen supply and temperature in the cell, respectively. Finally, tests and evaluations of the controllers were carried out, considering possible operating scenarios.

Índice general

Índice general	XI
Índice de figuras	XIV
Índice de tablas	XV
Nomenclatura	XVII
1. Introducción.	1
1.1. Antecedentes en Cenidet	2
1.2. Estado del arte	4
1.2.1. Modelado multifísico de las celdas de combustible tipo PEM.	4
1.2.2. Simulación multifísica	5
1.2.3. Control en celdas de combustible tipo PEM	6
1.3. Planteamiento del problema	8
1.4. Objetivo general	8
1.5. Objetivos específicos	8
1.6. Justificación	9
1.7. Alcances	9
1.8. Metodología	10
2. Marco Teórico	11
2.1. La celda de combustible tipo PEM	11
2.2. Subsistemas del sistema PEMFC	14
2.2.1. Subsistema de suministro de reactivos	14
2.2.2. Subsistema de gestión térmica	15
2.2.3. Subsistema de gestión de agua	15
2.3. Estrategias de control	15
2.3.1. Control Proporcional integral	15
2.3.2. Control por modelo interno	17
2.3.3. Control RST	19
2.3.4. Índices de desempeño	20
3. Modelo dinámico de celda de combustible tipo PEM	21
3.1. Hipótesis de modelado	22
3.2. Modelo en el dominio eléctrico	24

3.2.1.	Modelo en dominio eléctrico - Capa catalítica del cátodo	24
3.2.2.	Modelo en dominio eléctrico - Membrana	25
3.2.3.	Modelo en dominio eléctrico - Capa catalítica en el ánodo	27
3.3.	Modelo en el dominio fluídico	28
3.3.1.	Modelo en dominio fluídico - Canales de gas en el cátodo	29
3.3.2.	Modelo en dominio fluídico - Capa de difusión en el cátodo	31
3.3.3.	Modelo en dominio fluídico - Capa catalítica del cátodo	32
3.3.4.	Modelo en dominio fluídico - Membrana	33
3.3.5.	Modelo en dominio fluídico - Capa catalítica del ánodo	35
3.3.6.	Modelo en dominio fluídico - Capa de difusión en el ánodo	35
3.3.7.	Modelo en dominio fluídico - Canales de gas en el ánodo	36
3.4.	Modelo en el dominio térmico	39
3.4.1.	Modelo en dominio térmico - Canales de enfriamiento	40
3.4.2.	Modelo en dominio térmico - Soporte sólido de los canales en el cátodo	42
3.4.3.	Modelo en dominio térmico - Canales de gas en el cátodo	43
3.4.4.	Modelo en dominio térmico - Capa de difusión en el cátodo	45
3.4.5.	Modelo en dominio térmico - Capa catalítica en el cátodo	47
3.4.6.	Modelo en dominio térmico - Membrana	48
3.4.7.	Modelo en dominio térmico - Capa catalítica en el ánodo	50
3.4.8.	Modelo en dominio térmico - Capa de difusión en el ánodo	51
3.4.9.	Modelo en dominio térmico - Canales de gas en el ánodo	53
3.4.10.	Modelo en dominio térmico - Soporte sólido de los canales del ánodo	55
3.5.	Validación del modelo en dominio eléctrico	57
3.5.1.	Validación de modelo eléctrico para una monocelda tipo PEM	57
3.5.2.	Validación de modelo eléctrico para apilamiento Nexa de 1.2 kW	59
3.5.3.	Validación de modelo eléctrico para apilamiento Ballard Mark V de 5 kW	61
3.6.	Simulación y validación de modelo multifísico	66
3.6.1.	Simulación 1: Corriente de carga tipo escalón de larga duración	69
3.6.2.	Simulación 2: Perfil de carga dinámica	72
4.	Sistema de generación de energía basado en PEMFC	77
4.1.	Subsistema de gestión de aire	79
4.1.1.	Exceso de alimentación de oxígeno	79
4.1.2.	Modelo de compresor	79
4.1.3.	Diseño de control CMI para el exceso de alimentación de oxígeno	80
4.1.4.	Diseño de control RST para el exceso de alimentación	83
4.1.5.	Implementación de control de exceso de oxígeno en sistema de generación de energía basado en celdas de combustible	85
4.1.6.	Índices de desempeño de controladores de alimentación de oxígeno	88
4.2.	Subsistema de gestión térmica	89
4.2.1.	Celda sin control de temperatura	89
4.2.2.	Diseño de control PI para regulación de temperatura de la celda	91

4.2.3. Implementación del controlador PI para la regulación de temperatura de la celda en sistema PEMFC para generación de energía eléctrica	94
5. Librería especializada en celdas de combustible	99
5.1. Elementos de librería especializada en celdas de combustible	101
5.1.1. Modelos de celdas de combustible	102
5.1.2. Modelos de equipos auxiliares	102
5.1.3. Sistemas de generación de energía	103
6. Conclusiones	105
6.1. Conclusiones generales	105
6.2. Trabajos futuros	107
6.3. Aportaciones	108
Bibliografía	109
Anexo A: Artículo publicado en la 6ta Jornada de Ciencia y Tecnología Aplicada	115
Anexo B: Programa de modelo multifísico de celda de combustible en Matlab	117

Índice de figuras

2.1. Celda de combustible de membrana de intercambio Protónico.	11
2.2. Capas de una celda de combustible tipo PEM.	12
2.3. Subsistemas para el funcionamiento de la PEMFC	14
2.4. Estructura de controlador PI.	16
2.5. Respuesta en forma de S de un sistema con entrada de tipo escalón unitario.	17
2.6. Respuesta oscilatoria de un sistema en lazo cerrado con ganancia crítica. . .	17
2.7. Estructura de control por modelo interno.	18
2.8. Estructura de control RST.	19
3.1. Interacción de las variables entre dominios físicos de una PEMFC.	23
3.2. Diagrama de bloques de una PEMFC en dominio eléctrico.	24
3.3. Diagrama de bloques de una PEMFC en modelo fluídico.	28
3.4. Diagrama de bloques de una PEMFC en modelo térmico.	39
3.5. Curvas de polarización Densidad de corriente-Voltaje a $70^{\circ}C$	58
3.6. Curvas de polarización Corriente-Voltaje a temperatura constante.	60
3.7. Curvas de polarización Corriente-Voltaje a temperatura constante.	60
3.8. Comparación de curvas de polarización Voltaje (V) - corriente (A) de la PEMFC Ballard Mark V a $70^{\circ}C$	62
3.9. Comparación de curvas de polarización Voltaje (V) - corriente (A) de la PEMFC Ballard Mark V a $70^{\circ}C$, alimentando aire u oxígeno.	62
3.10. Efecto de temperatura en el desempeño estático de la PEMFC. Curvas de polarización Voltaje (V) - Densidad de corriente ($\frac{A}{cm^2}$) a P_{O_2} y $P_{H_2} = 303975$ (Pa).	63
3.11. Efecto de la presión en el desempeño estático de la PEMFC. Curvas de polarización Voltaje (V) - Densidad de corriente ($\frac{A}{cm^2}$) a $70^{\circ}C$	63
3.12. Perfil de carga aplicado al modelo del módulo de PEMFC Ballard Mark V . .	65
3.13. Respuesta dinámica del modelo del apilamiento de PEMFC Ballard Mark V.	65
3.14. Perfil de corriente demandada a la celda de combustible.	69
3.15. Voltaje de monocelda simulada con modelo multifísico.	70
3.16. Voltaje en las terminales del apilamiento de PEMFC Respuesta del modelo simulado.	70
3.17. Contenido de agua en la membrana de la celda modelo y experimental [1]. . .	71
3.18. Temperatura en la celda de combustible simulada.	71

3.19. Perfil de corriente aplicado a la celda de combustible.	73
3.20. Voltaje de modelo simulado y experimental de la celda de combustible.	73
3.21. Contenido de agua en la membrana de la celda modelo y experimental.	74
3.22. Temperatura en la celda de combustible simulada.	74
3.23. Temperatura medida en prueba experimental, reportada por Gao et al. [1]	75
4.1. Sistema de una celda de combustible con componentes auxiliares.	77
4.2. Estructura de control CMI para el modelo de compresor.	81
4.3. Respuesta del CMI ante diferentes valores de λ	82
4.4. Estructura de control RST para el modelo de compresor.	83
4.5. Corriente de carga y corriente total en el apilamiento.	86
4.6. Flujo másico de oxígeno que ingresa a la PEMFC.	86
4.7. Exceso de alimentación de oxígeno en la PEMFC.	87
4.8. Voltaje de salida del apilamiento.	87
4.9. Señal de control de compresor.	88
4.10. Temperatura de la celda sin sistema de enfriamiento.	89
4.11. Curva voltaje-flujo másico de ventilador con aire a $25^{\circ}C$	90
4.12. Respuesta al escalón.	91
4.13. Respuesta del sistema con diferentes valores de k_i ante una perturbación.	93
4.14. Respuesta del sistema con diferentes valores de k_i ante cambio de referencia tipo escalón.	93
4.15. Perfil de corriente de carga en la celda de combustible.	94
4.16. Temperatura de los canales del cátodo y la membrana de la celda.	95
4.17. Voltaje de alimentación del ventilador.	95
4.18. Flujo másico de aire que ingresa a los canales de enfriamiento.	96
4.19. Temperatura de los canales del cátodo y la membrana de la celda.	97
4.20. Voltaje de alimentación del ventilador.	98
4.21. Flujo másico de aire que ingresa a los canales de enfriamiento.	98
5.1. Bloque de modelo de PEMFC Ballard Nexa 1.2-kW	99
5.2. Cuadro de dialogo de bloque de PEMFC Ballard Nexa 1.2-kW	99
5.3. Librería de celdas de combustible en entorno Matlab-Simulink.	100
5.4. Diagrama de organización de la librería especializada en celdas de combustible.	101

Índice de tablas

1.	Símbolos.	XVII
2.	Siglas y acrónimos.	XIX
1.1.	Antecedentes sobre modelado y simulación de PEMFC en Cenidet.	3
1.2.	Trabajos sobre modelado de celdas de combustible en dominios físicos.	5
1.3.	Sistemas de control aplicados a celdas de combustible tipo PEM.	7
3.1.	Temperatura y coeficiente de difusión de referencia (fórmula de Cussler) [2].	31
3.2.	Parámetros del modelo de celda de combustible [1,3,4].	56
3.3.	Parámetros de celda de combustible Nexa con membrana Nafion 117 [1,5].	57
3.4.	Condiciones de operación para la simulación del modelo eléctrico [1,5].	58
3.5.	Valores de parámetros para la simulación del modelo eléctrico.	59
3.6.	Parámetros de una celda de combustible Ballard Mark V de 5 kW [6].	61
3.7.	Condiciones de operación del sistema Ballard Mark V [6].	62
3.8.	Condiciones de operación del apilamiento Ballard Mark V [7].	64
3.9.	Parámetros de Ballard Nexa 1.2 kW [1].	66
3.10.	Coefficientes de convección y radiación [1].	68
3.11.	Condiciones de operación de la PEMFC [1].	68
4.1.	Condiciones de operación de la PEMFC.	85
4.2.	Índices de desempeño	88
4.3.	Índices de desempeño del controlador para rechazo a perturbaciones.	92
4.4.	Índices de desempeño del controlador para cambio de referencia.	92

Nomenclatura

Tabla 1: Símbolos.

Símbolo	Descripción	Unidades
$A_{(sub)}$	Área	(m^2)
a_w	Actividad del agua	
c_{dl}	Capacitancia de doble capa	(F)
$C_{p(sub)}$	Capacidad calorífica a temperatura constante	$(\frac{J}{Kg K})$
$D_{(sub)}$	Coefficiente de difusión	$(\frac{m^2}{s})$
F	Constante de Faraday	$(\frac{C}{mol})$
$h_{(sub)}$	Coefficiente de intercambio de calor	$(\frac{W}{m^2 K})$
I_{cell}	Corriente en la celda de combustible	(A)
$M_{(sub)}$	Masa molar	$(\frac{kg}{mol})$
N_{cell}	Número de celdas	
$P_{(sub)}$	Presión	(Pa)
$Q_{(sub)}$	Flujo de calor	$(\frac{J}{s})$
$q_{(sub)}$	Flujo másico	$(\frac{kg}{s})$
R	Constante de gas ideal	$(\frac{J}{mol K})$
R_{mem}	Resistencia eléctrica de la membrana de la celda	(Ω)
$T_{(sub)}$	Temperatura	(K)
$V_{A,cata}$	Voltaje en la capa catalítica del ánodo	(V)
$V_{C,cata}$	Voltaje en la capa catalítica del cátodo	(V)
$V_{C,act}$	Voltaje de activación en el cátodo	(V)
V_{cell}	Voltaje en la celda de combustible	(V)
$V_{cell,mem}$	Voltaje en la membrana de la celda	(V)
V_{corr}	Voltaje de corrección	(V)
$V_{(sub)}$	Volumen	(m^3)
$x_{(sub)}$	Fracción molar	
α	Factor de simetría	
β	Factor de presión	
$\delta_{(sub)}$	Espesor	m
ΔS	Variación de la entropía	$\frac{J}{mol K}$
η_{sat}	Coefficiente electro-osmótico a máxima hidratación	

Sigue en la página siguiente.

λ_w	Contenido de agua	
$\lambda_w(0)$	Contenido de agua en el lado del cátodo	
$\lambda_w(\delta)$	Contenido de agua en el lado del ánodo	
$\lambda_{(sub)}$	Conductividad térmica	$\frac{W}{m \cdot K}$
$\rho_{(sub)}$	Densidad	$(\frac{kg}{m^3})$

Subíndices (*sub*)

<i>A</i>	Ánodo de la celda de combustible
<i>act</i>	Activación
<i>amb</i>	Ambiente
<i>C</i>	Cátodo de la celda de combustible
<i>cata</i>	Capa catalítica de la celda de combustible
<i>cd</i>	Conducción
<i>cell</i>	Celda de combustible
<i>ch</i>	Canales de entrada de la celda de combustible
<i>crit</i>	Crítico
<i>dry</i>	Seco
<i>ext</i>	Exterior
<i>fc</i>	Convección forzada
<i>fluid</i>	Fluido a través de los canales
<i>GDL</i>	Capa de difusión de gas de la celda
<i>H₂</i>	Hidrógeno
<i>H₂O</i>	Agua
<i>in</i>	Entrada
<i>int</i>	Interior
<i>mass</i>	Masa
<i>mem</i>	Membrana de la celda de combustible
<i>nc</i>	Convección natural
<i>net</i>	Neto
<i>out</i>	Salida
<i>O₂</i>	Oxígeno
<i>plate</i>	Plato
<i>R</i>	Enfriamiento
<i>rd</i>	Radiación
<i>ref</i>	Referencia
<i>rxn</i>	Reacción
<i>sat</i>	Saturación
<i>solid</i>	Parte sólida
<i>stack</i>	Apilamiento
<i>supp</i>	SopORTE sólido de los canales

Tabla 2: **Siglas y acrónimos.**

Siglas	Descripción
Cenidet	Centro Nacional de Investigación y Desarrollo Tecnológico
CMI	Control por modelo interno
FC	Fuel cell (Celda de combustible)
HFI	Hydrogen Fuel Initiative
IIE	Instituto de Investigaciones Eléctricas
IAE	Integral del error absoluto
ISE	Integral del error cuadrático
ITAE	Integral del tiempo por el error absoluto
MEA	Membrane Electrode Assamble (Conjunto de electrodos de membrana)
MIMO	Múltiples entradas y múltiples salidas
MRAC	Modelo de control adaptativo de referencia
MYRTE	Mission hYdrogène Renouvelable pour l'inTégration au réseau Electrique (Misión de hidrógeno renovable para la integración en la red eléctrica)
PEM	Proton Exchange Membrane (Membrana de intercambio de protones)
PEMFC	Proton Exchange Membrane Fuel Cell (Celda de combustible de membrana de intercambio de protones)
PI	Proporcional integral
PID	Proporcional Integral Derivativo
RNA	Red Neuronal Artificial
RST	Reference Signal Tracking (Seguimiento de la señal de referencia)

Capítulo 1

Introducción.

Para el año 2020 los combustibles fósiles: petróleo, gas natural y carbón representaban el 82 % de las fuentes de energía usadas en el mundo [8]. Sin embargo, la dependencia y el uso excesivo de estos ha resultado tener un efecto negativo en el medio ambiente, puesto que se trata de recursos no renovables y generadores de residuos contaminantes. Durante las últimas décadas se ha buscado migrar hacia fuentes de energía renovables más limpias, seguras y eficientes. La introducción de combustibles alternativos (hidrógeno, biocombustible, energía solar, entre otras) aún no ha dado lugar a una disminución significativa de la demanda de combustibles fósiles.

La celda de combustible (FC, Por sus siglas en inglés) ha demostrado ser un potencial candidato para el almacenamiento y producción de energía por su capacidad para generar electricidad sin la necesidad de pasar por numerosos procesos intermedios de transformación de energía. La celda de combustible de membrana de intercambio protónico (PEMFC, por sus siglas en inglés) tiene un gran potencial para aplicaciones móviles, debido a que cuenta con un electrolito sólido, es compacta y opera a bajas temperaturas, en comparación con otras celdas de combustible [1].

Durante las últimas dos décadas se han desarrollado sistemas híbridos de generación de energía basados en celdas de combustible. Estos son diseñados principalmente para vehículos y centrales eléctricas. Sin embargo, aún es necesario trabajar para mejorar el rendimiento de estos sistemas a través del diseño eficiente de celdas y estrategias de control, así como reducir los costos de producción del hidrógeno y optimizar la operación de los equipos auxiliares [1].

Debido al potencial de las celdas de combustible, algunos gobiernos han tomado iniciativas que buscan el desarrollo de investigaciones y tecnologías de las FC. Como ejemplo se tiene el programa gubernamental en Estados Unidos llamado "Hydrogen Fuel Initiative" (HFI) [9], lanzado por el presidente George W. Bush en 2003. Este programa busca apoyar el desarrollo de industrias para la generación de hidrógeno e infraestructura que pueda volver factible el uso de vehículos con celdas de combustible. Por otro lado la Unión Europea impulsó el programa "International Partnership for Hydrogen and Fuel Cells in Economy" [10], para la

integración del conocimiento de investigación y desarrollo tecnológico sobre el aprovechamiento de las FC [11].

1.1. Antecedentes en Cenidet

El desarrollo de estudios sobre celdas de combustible tipo PEM en el Centro Nacional de Investigación y Desarrollo Tecnológico (Cenidet) ha dado como resultado la obtención de modelos matemáticos de baterías, super capacitores y PEMFC. Además del diseño de convertidores y controladores para sistemas de generación de energía con celdas de combustible. En algunos de los estudios realizados con celdas a baja potencia (1 kW) se realizó una etapa experimental gracias a que fue posible acceder a un laboratorio con una PEMFC de dicha potencia. Los estudios para potencias mayores se han realizado únicamente en simulación. Hasta el momento no se han realizado tesis en las que se consideren todas las dinámicas de la celda de combustible como parte de un simulador de sistema híbrido. En la Tabla 1.1 se muestran algunos trabajos de investigación en Cenidet enfocados en modelado, simulación y control aplicado a la celdas de combustible.

1.1. Antecedentes en Cenidet

Tabla 1.1: Antecedentes sobre modelado y simulación de PEMFC en Cenidet.

Potencia de la PEMFC	Objetivo	Pruebas de validación	Resultados	Ref.
350w 0-50V 0.6-6.5	Emular el comportamiento eléctrico de una PEMFC mediante la manipulación de una fuente de poder DC programable con interfaz a una computadora.	Pruebas experimentales del emulador con modelo estático y modelo dinámico.	Emulación correcta del modelo estático. Tiempo no constante de la fuente programable para el modelo dinámico	[12]
0.95V-1.75A 0.94V-20A	Formular un modelo de PEMFC semi-analítico que permita estudiar y analizar su desempeño en estado estacionario y transitorio.	Pruebas experimentales de la celda en el laboratorio de celdas del IIE.	Modelo semi-analítico satisfactorio con error de aproximación promedio de 2.33%.	[13]
	Mejorar el modelo dinámico y estacionario presentado por Zamora y Escobedo [13] mediante la integración de nuevos fenómenos. Además del desarrollo de un emulador que celdas que permita el uso del modelo en diversas aplicaciones practicas.	Pruebas experimentales de la celda en el laboratorio de celdas del IIE y pruebas experimentales del emulador con el modelo estático y el modelo dinámico	El nuevo modelo matemático se validó con respecto al modelo base y con respecto a datos experimentales ya disponibles, mejorando la predicción de la respuesta de la celda en un 6% a máximas corrientes.	[14]
50kW 200kW	Desarrollar un simulador en Scilab que logre representar el desempeño de sistemas de alimentación basados en celdas de combustible tipo PEM y permita simular un controlador LQ para el suministro de los gases reactivos.	Comparación de pruebas en simulación con datos de la literatura científica	El simulador desarrollado fue suficiente para los fines del trabajo. Compensadores prealimentados logran los objetivos de control de manera aceptable.	[15]
50-65kW	Simular el balance de planta de un sistema de celdas de combustible tipo PEM, con lazos de control integrados, en el entorno AspenPlus para analizar un sistema de 50-65kW usado para alimentar un vehículo eléctrico.	Simulación del modelo en Aspen Plus, comparación con datos de la literatura científica.	Se logró la construcción del simulador del sistema de celdas de combustible en la plataforma de Aspen Plus y con él se realizaron pruebas que se validan con las reportadas en la literatura.	[16]
75kW	Diseñar un controlador robusto multivariable para el suministro de oxígeno de un sistema de generación de energía basado en celdas de combustible tipo PEM, que permita un desempeño robusto del sistema y considere posibles incertidumbres paramétricas.	Pruebas de los controladores en simulación ante diferentes escenarios de operación del sistema.	El control proporcional no lineal, mejoró los resultados del sistema en comparación con los registrados por Pukruspan.	[17]

1.2. Estado del arte

En esta sección se presentan algunos resultados de investigación, en literatura científica, referente a celdas de combustible. Se muestran algunos trabajos importantes sobre modelado, simulación y aplicación de control en PEMFC, los cuales proveen información relevante para el desarrollo del tema tesis.

El estado del arte se centra en tres principales temáticas: En primer lugar, se busca identificar los modelos de celdas de combustible tipo PEM que describen su dinámica a través de ecuaciones matemáticas de sentido físico. En segundo lugar, se busca conocer los entornos de simulación que han sido desarrollados para sistemas multifísicos, y que permiten establecer y analizar la interacción entre los subsistemas principales de una PEMFC. Por último, se requiere identificar las variables principales a controlar para la operación óptima de una celda de combustible y los controladores que se adecuan a un funcionamiento estándar de las FC.

1.2.1. Modelado multifísico de las celdas de combustible tipo PEM.

Existen diversos modelos propuestos en la literatura para representar la dinámica de las celdas de combustible tipo PEM a través de leyes físicas y relaciones empíricas. Abdin et al. [18] presentaron un modelo de circuito eléctrico equivalente obtenido a partir del análisis de la interacción descrita por las ecuaciones de balance de materia. Wilberforce et al. [19] desarrollaron un modelo basado en ecuaciones físicas tomadas de diferentes fuentes en la literatura, las cuales contemplan los dominios eléctrico, fluídico y térmico y que posteriormente fueron validadas mediante experimentación. En este mismo trabajo se obtuvieron curvas de polarización modeladas por ecuaciones cuyos parámetros fueron relacionados con el modelo dinámico de la FC. En los artículos [18,19] se sugirió que es posible identificar los parámetros que tienen una influencia importante en el comportamiento del sistema. Estos parámetros pueden ser estimados para optimizar el rendimiento de la PEMFC a partir de la dinámica de sus modelos, de tal forma que se obtiene un diseño óptimo de las FC. Randall C et al. [20] presentaron un modelo de PEMFC que incorpora la estructura del ionómero de Nafion y las propiedades de la capa de catalizador de cátodo. Las curvas de polarización obtenidas coinciden estrechamente con los datos experimentales. Además los resultados sugieren que un aumento del grosor del ionómero que rodea las superficies puede conducir a un mejor rendimiento celular debido a una conductividad iónica mejorada. Lan y Strunz [21] desarrollaron un modelo para representar los transitorios multifísicos de los flujos de corriente eléctrica y flujo de gases en el proceso, estos fueron posteriormente representados mediante circuitos eléctricos equivalentes, análogos a los procesos físicos del sistema, los cuales muestran la interacción entre ellos.

Gao et al. [1] indicaron que el modelado de celdas de combustible se puede centrar en la descripción de dominios físicos según las variables de interés y estudio. Estos son: dominio eléctrico, dominio fluídico, y dominio térmico. En la Tabla 1.2 se muestran algunos trabajos

sobre modelado de celdas que clasifican a los submodelos en estos dominios.

Tabla 1.2: **Trabajos sobre modelado de celdas de combustible en dominios físicos.**

Dominio físico		Sistema	Simulación	Experimentación	Ref.
Electro-químico	Fluídico	Celda de combustible NEXA 1.3 kW	Tiempo real, modelo en simulador RT-LAB de Opal-RT	Comparación y validación ante datos experimentales	[22]
		Unicelda de combustible tipo PEM de 0.9 V	En el software ANSYS Fluent		[24]
		PEM de 46 kW instalada en plataforma MYRTE	Por módulos en Matlab-Simulink		[25]
		PEMFC, compresor, batería, convertidor, sistema de enfriamiento	Rostock System Technik	Comparación con datos experimentales reportados en la literatura científica	[26]
			Por módulos en Modelica		[27]

En los trabajos consultados de la Tabla 1.2 [22–27], los autores se enfocan en dos de tres dominios físicos. El manejo de energía térmica se hizo considerando un comportamiento ideal al analizar la dinámica de la celda. En estos trabajos se desarrollaron los modelos estableciendo las ecuaciones de balance de materia, balance de energía, carga eléctrica y leyes de kirchhoff entre otra leyes físicas y químicas. En las referencias [26, 27], la simulación consideró las interacciones entre los modelos multifísicos de la celda de combustible y los modelos multifísicos de componentes auxiliares, como son: compresor, humidificador, batería, entre otros.

Fei Gao et al. [1] presentaron el un modelo de celdas de combustible tipo PEM. Este modelo fue desarrollado considerando los tres dominios físicos antes mencionados por lo tanto, este modelo es considerado como base para el desarrollo del tema de tesis descrito en el presente documento.

1.2.2. Simulación multifísica

En la literatura científica existen trabajos dedicados a la evaluación de sistemas a partir de simulación multifísica. Durante la búsqueda realizada se encontró la aplicación de este tipo de simulación de PEMFC. En los artículos [28–30] se desarrollaron librerías de sistemas multifísicos de PEMFC en Modélica, utilizando parámetros de sistemas reales. Sigfridsson et al. [28] implementaron una arquitectura de modelo flexible para un sistema multi-dominio de vehículos. El modelo consta de un subsistema de celda de combustible con caracterización de

potencia y humidificación, un sistema de propulsión híbrido que incluye batería, convertidor y motor eléctrico, un modelo de vehículo con chasis y frenos, y un modelo de conductor, utilizando la Biblioteca de celdas de combustible (FCL), dinámica de vehículos (VDL) y de electrificación (EL) de Modelon.

Sezgin et al. [31] analizaron el efecto de parámetros críticos de diseño de una FC, consideraron la velocidad de entrada de los gases, así como la conductividad de la membrana de una PEMFC. La simulación de los módulos de un sistema PEMFC y batería se hizo bajo la licencia Comsol Multiphysics 5.0. Los resultados de la simulación fueron comparados con curvas de polarización obtenidas experimentalmente.

En [29] se propusieron modelos físicos para complementar el simulador de una PEMFC usada para alimentar un generador eólico que fue previamente descrito y estudiado en [25]. Como producto del trabajo se obtuvo una librería por componentes para Modélica. En [30] se presentó también un modelo basado en componentes de una PEMFC, utilizando la técnica de gráficos de enlace o Bond-Graph (BG) en lenguaje Modélica. El modelo general fue construido a partir de un conjunto de bloques de BG considerando los dominios térmico, fluido y eléctrico.

1.2.3. Control en celdas de combustible tipo PEM

En esta sección se describen algunos trabajos sobre la aplicación de control en celdas de combustible. Kai et al. [32] desarrollaron la administración térmica y de agua de una PEMFC con un controlador MIMO difuso. Además los autores determinaron algunas condiciones óptimas de funcionamiento logrando que el controlador propuesto aumentara la potencia de salida de la celda. En [26] se propuso un controlador dinámico, manipulando el par de carga para variar el flujo de masa de aire, el cual debe eliminar las perturbaciones que provocan los transitorios en el compresor.

En la Tabla 1.3 se concentra información de literatura científica enfocada en el diseño de controladores sintetizados para la regulación de PEMFC. Examinando los trabajos anteriores y un Review de Daud y colaboradores [33] se reconoce como investigación recurrente el control de flujo de los gases reactivos puesto que la reacción entre estos influye directamente en todos los subsistemas, y por lo tanto, en la generación de calor, agua y energía eléctrica.

Como ejemplo, se citan los trabajos [37–40], en los cuales, los autores orientaron su estudio al control del flujo de los reactantes de una PEMFC, aire o hidrógeno. Es admitido que la relación estequiométrica influye en todos los subsistemas y que el manejo efectivo de flujo de fluidos en una FC, así como su distribución en todos los componentes de la FC es esencial para lograr una operación eficiente del sistema. En los estudios de las referencias [34,35], los autores diseñaron un control para la humedad de la membrana polimérica de la PEMFC. Lebreton y colaboradores [34] presentaron un sistema de control en donde el sistema de gestión de agua se combina con el sistema de gestión de los gases, logrando una mayor efectividad y

Tabla 1.3: **Sistemas de control aplicados a celdas de combustible tipo PEM.**

Variable a controlar	Objetivo de control	Estrategia de control	Sistema	Resultado	Ref.
Humedad de la membrana polimérica de la PEMFC	Seguimiento de trayectoria	Un control tolerante a fallas autoajustable usando un controlador PID y una RNA	PEMFC Paxitech de 50 cm de canales en serpentín	El controlador PID autoajustable muestra robustez frente a mediciones de ruido e incertidumbres del modelo	[34]
		Mezcla de aire seco y húmedo por controlador PI y PID	PEMFC de 3 kW, compresor, humidificador, tanque de hidrógeno, bomba, radiador	Mayor velocidad para cambios de nivel de humedad	[35]
Temperatura de la PEMFC	Regulación	Enfriamiento por circulación de agua mediante una bomba con controlador PI		Controlador simple con menor ITAE que otros de mismo nivel de complejidad	[36]
Flujo de aire e hidrógeno	Seguimiento de trayectoria	Control robusto por medio de una RNA adaptable con retroalimentación	PEMFC de 90 celdas, compresor y tanque de hidrógeno	La RNA compensa con éxito las perturbaciones e incertidumbres paramétricas	[37]
Flujo de aire de compresor centrífugo		Modelo de control adaptable de referencia	Sistema de gestión de aire de una celda de combustible automotriz	El MRAC muestra un mejor rendimiento que el algoritmo de control de retroalimentación nominal en el transitorio	[38]
Flujo de aire de compresor		Controlador de linealización de retroalimentación basada en un modelo reducido de tercer orden	Celdas de combustible de 3 kW de Sunrise Power Inc.	El controlador puede regularizar el exceso de oxígeno con un tiempo de sedimentación satisfactorio	[39]
Presión parcial de los gases en la PEMFC		Control adaptable de una RNA con linealización de retroalimentación	PEMFC Ballard MK5-E tanque de hidrógeno, compresor, humidificador	Las RNA compensan las perturbaciones desconocidas y las incertidumbres paramétricas	[40]

velocidad para humectar la membrana. Saygili et al. [36] presentaron un controlador para regular la temperatura de la PEMFC mediante circulación de agua fría alrededor de la celda de combustible. Este es un controlador proporcional integral que manipula el voltaje en la bomba de agua del radiador y logra obtener resultados con menor error de estado estable que otros controladores de complejidad similar.

1.3. Planteamiento del problema

La implementación de sistemas híbridos para la generación de energía eléctrica con celdas de combustible tipo PEM como fuente primaria requiere un proceso de diseño y análisis de la interacción entre los elementos que lo conforman. El objetivo de dicho análisis es conocer las condiciones óptimas de operación que permitan obtener un buen desempeño del sistema, además esto también permite identificar elementos o parámetros que pueden ser modificados para mejorarlo.

La evaluación y análisis del sistema se ve limitado cuando no se cuentan con los elementos necesarios para la realización de pruebas experimentales o que la realización de dichas pruebas puedan representar un riesgo para los equipos y el personal que las realiza.

La simulación del sistema a partir de un modelo matemático descriptivo no permite una visualización detallada de los efectos e interacciones que se producen a nivel físico entre cada componente o variable del sistema. Esto dificulta la identificación de parámetros de diseño a optimizar. Sin embargo una simulación multifísica requiere un mayor costo computacional debido a que, regularmente, la cantidad de cálculos que se deben realizar es mayor. Esto también se vuelve una limitante si se desea realizar la simulación de un sistema grande y complejo, a medida que crecen los componentes de un sistema el costo computacional aumenta. Un reto de esta tesis es formular un modelo con un buen grado de verificación sin contar con datos experimentales de primera mano. El segundo reto es integrar el balance de planta en un simulador multifísico en una plataforma de programación por objetos. El problema final es que el modelo y las librerías estén listos para ser implementados en un módulo experimental de emulación de un sistema de PEMFC.

1.4. Objetivo general

Modelar una celda de combustible tipo PEM y simular el sistema por componentes, incorporando equipos auxiliares y control en sus variables principales.

1.5. Objetivos específicos

- Formular un modelo dinámico en dominio fluídico, térmico y eléctrico de una celda de combustible tipo PEM.
- Construir una librería especializada en celdas de combustible, donde se integra el modelo dinámico de PEMFC y modelos de equipos auxiliares.
- Simular por componentes un sistema celda de combustible - equipos auxiliares.
- Diseñar un control del exceso de alimentación de oxígeno.

- Diseñar un control de temperatura de la celda de combustible.
- Analizar la dinámica del sistema y evaluar el desempeño de controladores.

1.6. Justificación

Un entorno de simulación por componentes permitirá el análisis del comportamiento de celdas de combustible tipo PEM en sistemas de generación de energía híbrida donde se integran equipos auxiliares básicos para su funcionamiento. La simulación en este entorno permitirá la visualización del comportamiento del sistema ante diferentes escenarios posibles de operación, sin el riesgo que conllevan estas mismas pruebas en una implementación física. Un modelo multifísico simplificado podrá hacer posible la simulación del sistema con un menor costo computacional, lo que también dará la oportunidad de añadir nuevos componentes para crear sistemas más grandes y complejos.

Un emulador de celda de combustible tipo PEM, capaz de reproducir físicamente la señal eléctrica y térmica, permitiría realizar pruebas experimentales en la implementación de estrategias de control y conexión de equipos auxiliares eléctricos como baterías, super capacitores y convertidores con el fin de validar experimentalmente los estudios de sistemas de generación de energía híbrida basada en celdas de combustible tipo PEM.

1.7. Alcances

- El modelo dinámico de la celda de combustible tipo PEM corresponde a un apilamiento de 1.2 kW de potencia.
- La librería para la simulación por componentes está constituida por el modelo de la PEMFC desarrollado y los modelos de componentes auxiliares ya existentes en Simscape.
- La evaluación del sistema se hizo con respecto a datos experimentales de bibliografía científica y probando el controlador en el simulador del sistema de celda de combustible.
- Se desarrollaron modelos con diferente grado de complejidad y para aplicaciones de 1 y 5 kW. Los modelos pueden ser usados para representar y estudiar el comportamiento de una celda de combustible o para un sistema de celdas de combustible con equipos auxiliares, en régimen permanente o dinámico. Se construyeron librerías de Simulink con estos modelos y están listos para ser implementados en emuladores que permitan estudiar no solo el comportamiento eléctrico de estos sistemas, sino también el comportamiento térmico. Esta flexibilidad de los modelos, simuladores y librerías desarrollados permitirán la realización de pruebas experimentales de futuros estudios en el CENIDET.

1.8. Metodología

Para cumplir los objetivos planteados se llevaron a cabo las siguientes actividades cumpliendo la metodología que se explica a continuación:

- Se realizó una consulta bibliográfica a lo largo de todo el trabajo de tesis.
- Se desarrolló un modelo semi-analítico de una monocelda de combustible tipo PEM que describe la dinámica en los dominios eléctrico, fluido y térmico, tomando como base el modelo reportado en [1]. Para obtenerlo, se establecieron ecuaciones derivadas de las leyes de conservación y se incluyeron relaciones electroquímicas básicas para describir el desempeño de las PEMFC.
- Se validó el modelo en dominio eléctrico mediante la comparación de curvas de polarización obtenidas por simulación y datos experimentales registrados en la literatura científica para celdas de 1.2 y 5 kW [3, 5–7]
- Se validó el modelo multifísico mediante la comparación de la respuesta dinámica simulada con datos experimentales registrados por Gao et al. [1].
- Se simuló un sistema básico de generación de energía basado en un apilamiento Ballard Nexa 1.2 k-W. En él se integra el modelo multifísico desarrollado y modelos de equipos auxiliares que conforman los subsistemas.
- Se diseñó e implementó un control de exceso de alimentación de oxígeno de la celda como parte del subsistema de gestión de aire.
- Se diseñó e implementó un control de temperatura de la celda como parte del subsistema de gestión térmica.
- Se evaluó el desempeño de los controladores implementados en simulación.
- Se construyó una librería Matlab-Simulink de los modelos correspondientes a la PEMFC y los equipos auxiliares del balance de planta.

Capítulo 2

Marco Teórico

2.1. La celda de combustible tipo PEM

La celda de combustible es un dispositivo electroquímico que genera energía eléctrica a partir la reacción química entre dos sustancias, comúnmente hidrógeno como combustible y oxígeno como oxidante.

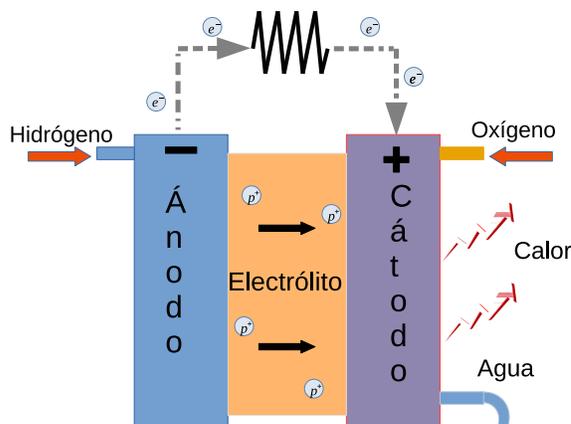


Figura 2.1: Celda de combustible de membrana de intercambio Protónico.

La celda de combustible de membrana de intercambio protónico utiliza como electrolito una membrana de polímero especial recubierta con partículas dispersas de catalizador, comúnmente platino, para separar del combustible la ruta de flujo de los electrones que forman la carga eléctrica. En este proceso, el hidrógeno es separado de sus electrones al ocurrir la reacción electroquímica de disociación de hidrógeno, acelerada por el catalizador. La relación estequiométrica se muestra en la Ecuación (2.1). Los protones y electrones son transportados

por diferentes caminos, los electrones circulan por un circuito externo hacia el cátodo y su paso puede ser aprovechado para alimentar una carga [1].



La capa catalizadora del cátodo ayuda a la unión de los electrones y protones con las moléculas de oxígeno del aire que ingresa por los canales del cátodo, como se muestra en la Figura 2.1. La reacción producida en el cátodo, cuya estequiometría es mostrada en la Ecuación (2.2), genera agua y calor que deben ser gestionados para mantener condiciones de operación adecuadas en la celda de combustible [1].



En la Figura 2.2 se muestran los elementos que forman una celda de combustible tipo PEM:

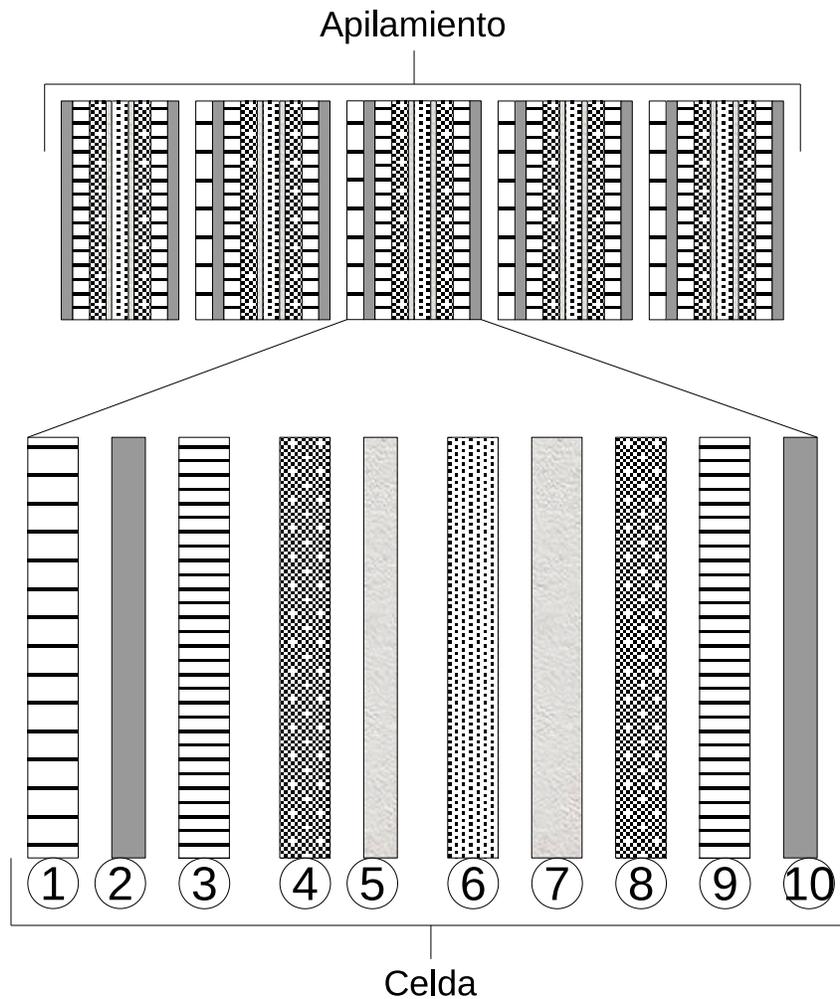


Figura 2.2: Capas de una celda de combustible tipo PEM.

2.2. Subsistemas del sistema PEMFC

1. Canales de enfriamiento.
2. Soporte sólido del cátodo.
3. Canales de gas del cátodo.
4. Capa de difusión en el cátodo.
5. Capa catalítica del cátodo.
6. Membrana.
7. Capa catalítica del ánodo.
8. Capa de difusión en el ánodo.
9. Canales de gas del ánodo.
10. Soporte sólido del ánodo.

Un stack de celdas de combustible es un apilamiento arreglado de tal forma que se pueda obtener una mayor cantidad de energía. Esto permite tener varias configuraciones con diferentes capacidades para aprovecharse en aplicaciones variadas.

A continuación se describe la función de las partes principales de una PEMFC:

- Canales de enfriamiento: Se encargan de transportar un fluido refrigerante a través de la celda para mantenerla a una temperatura de operación adecuada.
- Canales de gas (ánodo y cátodo): Son el punto de entrada de los reactivos hacia la celda. Los canales distribuyen el gas uniformemente en toda la superficies de la capa de difusión de gases.
- Capa de difusión (ánodo y cátodo): Esta capa está hecha de un material poroso y eléctricamente conductor, para permitir que los reactivos se difundan dentro y fuera la membrana, además de proporcionar contacto eléctrico con los electrodos.
- Capa catalítica (ánodo y cátodo): Es una capa muy delgada que envuelve a la membrana, regularmente contiene platino que funciona como catalizador para acelerar las reacciones químicas en la celda.
- Membrana polimérica: Es una capa de polímero que permite conducir únicamente los protones del, del lado del ánodo al cátodo, generalmente echa de polietileno modificado llamado Nafion.

2.2. Subsistemas del sistema PEMFC

Un sistema de generación de energía basado en celdas de combustible tipo PEM se puede dividir en tres subsistemas principales que se encargan de mantener a la celda en condiciones adecuadas de operación [33]. Estos se muestran de forma simplificada en la Figura 2.3 y son:

- Subsistema de suministro de reactivos.
- Subsistema de gestión térmica.
- Subsistema de gestión de agua.

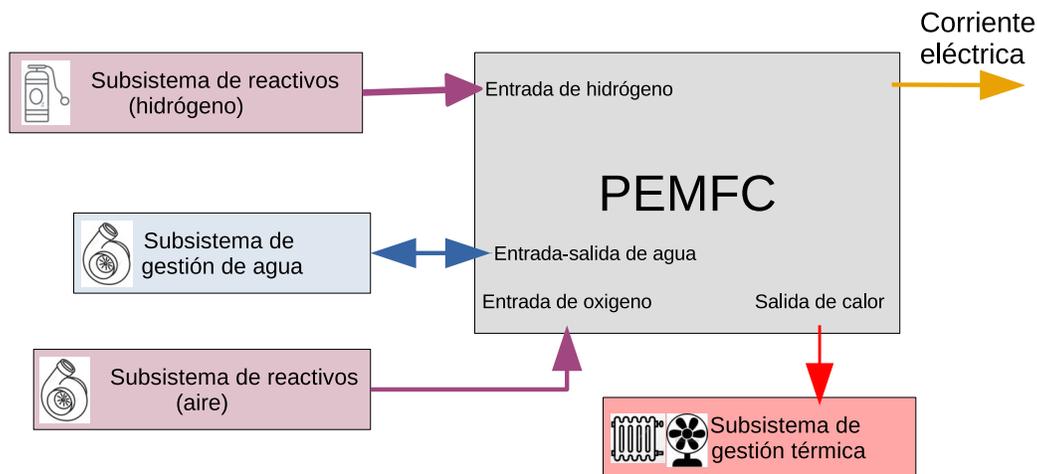


Figura 2.3: Subsistemas para el funcionamiento de la PEMFC

2.2.1. Subsistema de suministro de reactivos

Este subsistema tiene como función el suministro de gases reactantes a la PEMFC. El hidrógeno y el aire se alimentan manteniendo una cierta relación estequiométrica para hacer posible la generación de energía eléctrica y agua por medio de las reacciones químicas. Generalmente el hidrógeno se suministra en el ánodo de la PEMFC, proveniente de un tanque de almacenamiento a altas presiones, mediante un regulador de presión. Por otro lado, el aire se suministra en el cátodo de la PEMFC mediante un soplador, compresor o un tanque de aire comprimido. La presión se controla para suministrar el flujo adecuado, según la relación estequiométrica de hidrógeno-aire requerida para una determinada aplicación del sistema [33].

2.2.2. Subsistema de gestión térmica

El subsistema térmico se encarga de mantener a la PEMFC en un rango de temperatura adecuado, comúnmente de entre 70 a 90 grados celcius. Durante el inicio de operación, la PEMFC requiere alcanzar esta temperatura con ayuda de un calentador que se integra al sistema. El sistema es exotérmico, es decir que genera calor a partir de las reacciones químicas, por lo que es necesario tener un sistema de enfriamiento a base de convección natural o forzada, o mediante un radiador de calor para evitar daños en los componentes de la celda. Así mismo, es necesario mantener controlada la temperatura de entrada de los gases reactantes para evitar que se produzca un choque térmico que pueda afectar el desempeño de la PEMFC [33].

2.2.3. Subsistema de gestión de agua

El subsistema de gestión de agua tiene como función la humidificación de la membrana polimérica en donde ocurre el transporte de protones y el drenado del agua generada por las reacciones del proceso. La membrana debe mantenerse a una humedad adecuada para facilitar el flujo de protones, evitando la polarización provocada por un exceso de agua dentro la celda [33].

Existen dos métodos de humidificación, el primero consiste en humidificar los gases reactantes antes de que ingresen a la celda de combustible. El segundo método consiste en inyectar agua directamente a la zona de la membrana de intercambio protónico [33].

2.3. Estrategias de control

2.3.1. Control Proporcional integral

El control Proporcional integral (PI) aplica una acción correctiva en la señal manipulada $u(t)$, proporcional al error $e(t)$, para llevar el valor de la variable manipulada $y(t)$ al valor de la referencia deseada $r(t)$. A la vez que integra el valor del error en el tiempo para corregir el error en estado estacionario. La Figura 2.4 muestra la estructura del control PI, este controlador puede expresarse con la siguiente función de transferencia [41]:

$$G_{PI}(s) = K_p \left(1 + \frac{1}{\tau_i s}\right) = \frac{K_p s + K_i}{s} \quad (2.3)$$

$$K_i = \frac{K_p}{\tau_i} \quad (2.4)$$

Donde K_p y K_i son las ganancia proporcional y ganancia integral respectivamente.

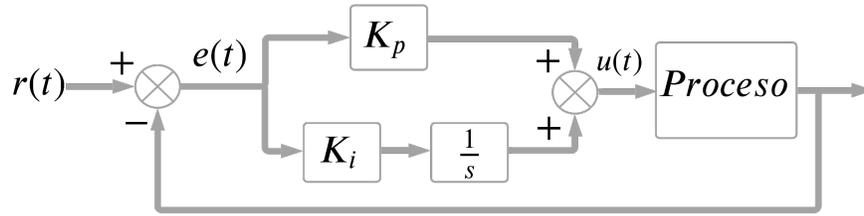


Figura 2.4: Estructura de controlador PI.

Reglas de Ziegler-Nichols para sintonizar controladores PI

Ziegler y Nichols propusieron dos métodos para estimar los valores K_p y K_i a través de la respuesta en estado transitorio de la planta. Los métodos Ziegler-Nichols son descritos a continuación.

Primer método

Para este método se requiere obtener la respuesta de la planta a una entrada de tipo escalón unitario. La sintonización por este método se puede aplicar si la respuesta tiene una curva con forma de S [41, 42].

En la curva de reacción en forma de S se destacan dos parámetros: el tiempo de retardo L y la constante de tiempo τ . Estas se obtienen dibujando una línea tangente en el punto de inflexión de la respuesta de la planta y creando una intersección con el eje de tiempo y $y(t)$ como se muestra en la Figura 2.5. Finalmente los parámetros L y τ se sustituyen en las siguientes ecuaciones para determinar las ganancias del controlador [42]:

$$K_p = 0,9 \frac{\tau}{KL} \quad (2.5)$$

$$\tau_i = \frac{0,3}{L} \quad (2.6)$$

Segundo método

Para este método se integra el controlador a la planta en lazo cerrado, como se muestra en la Figura 2.4. Se establece $K_i = 0$ y K_p se incrementa gradualmente desde 0 hasta un valor de ganancia crítica K_{crit} , donde la salida de la planta presenta oscilaciones sostenidas. (Este método no funciona si para todo valor posible de k_p no hay oscilaciones sostenidas). K_{crit} y el periodo P_{crit} , obtenido de la gráfica de la respuesta mostrada en la Figura 2.6, se usan para determinar las ganancias del controlador a través de las siguientes ecuaciones [41]:

$$K_p = 0,45 K_{crit} \quad (2.7)$$

$$K_i = \frac{1,2}{P_{crit}} \quad (2.8)$$

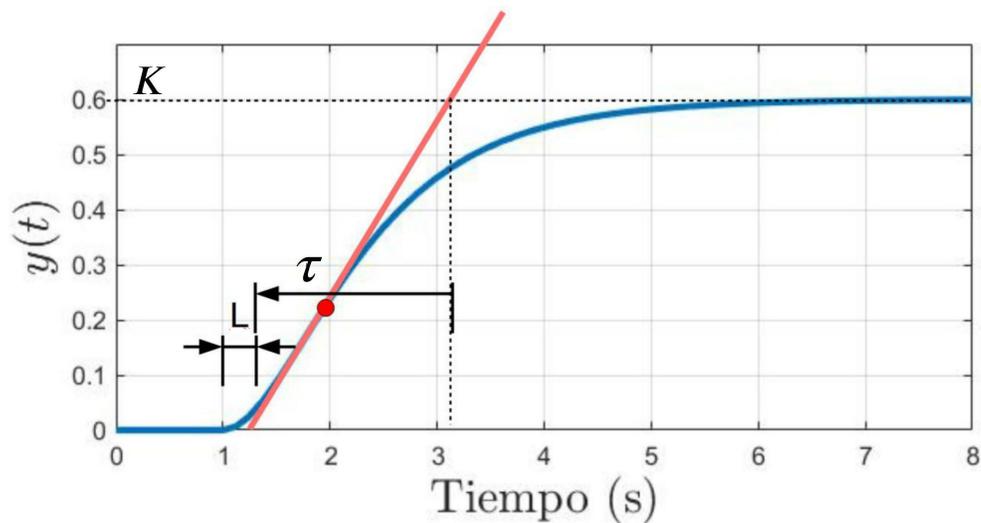


Figura 2.5: Respuesta en forma de S de un sistema con entrada de tipo escalón unitario.

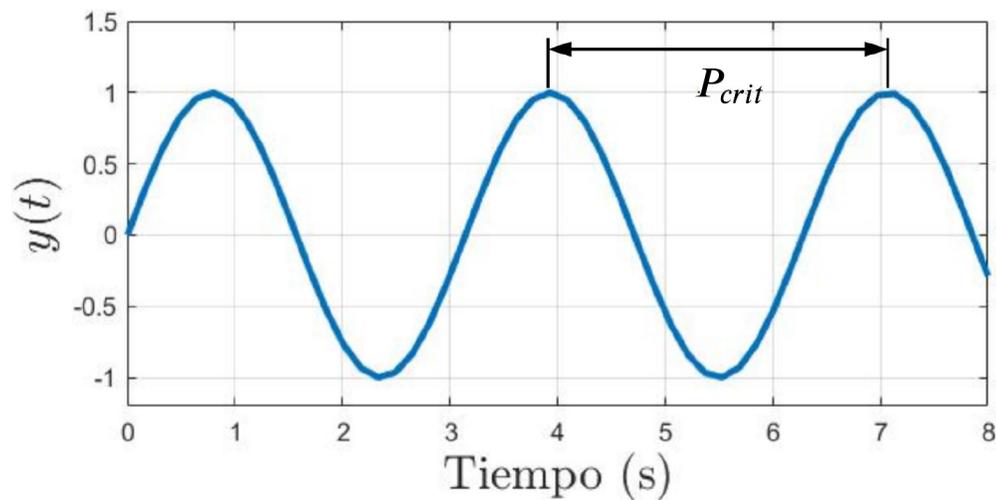


Figura 2.6: Respuesta oscilatoria de un sistema en lazo cerrado con ganancia crítica.

2.3.2. Control por modelo interno

El control por modelo interno (CMI) es un control robusto, puesto que soporta errores de modelado, tolera perturbaciones y permite monitorear perturbaciones no medibles. La

estructura del controlador se muestra en la Figura 2.7, donde $r(t)$ es la referencia, $e(t)$ es el error, $u(t)$ es la entrada de control, $d(t)$ es la perturbación, $\hat{d}(t)$ es la estimación de la perturbación, $y(t)$ es la salida, $G_p(s)$ es la planta, $\hat{G}_p(s)$ es la estimación de la planta, y $G_c(s)$ es el controlador.

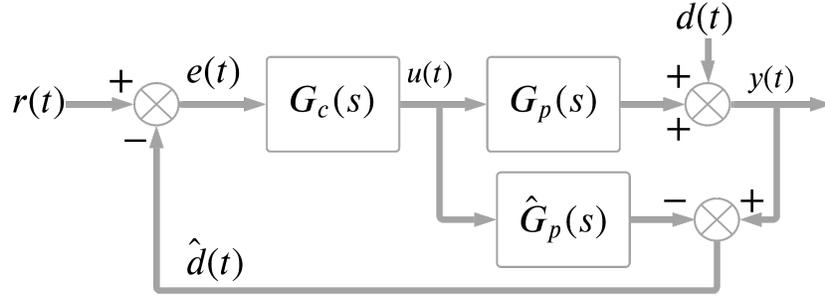


Figura 2.7: Estructura de control por modelo interno.

La salida del sistema en lazo cerrado se expresa en la Ecuación (2.9).

$$y(t) = G_p(s)G_c(s)e(t) + d(t) \quad (2.9)$$

Suponiendo que $d(t) = 0$, la salida del sistema en lazo cerrado (2.9) se reescribe como:

$$y(s) = G_p(s)G_c(s)e(s) \quad (2.10)$$

Se define que $e(s)G_c(s)\hat{G}_p(s) = y(s)$ si el modelo estimado \hat{G}_p es igual al modelo de la planta $G_p(s)$. Suponiendo una salida del sistema con valor $y(t) = 1$ y $e(t) = 1$, se obtiene que el modelo inverso de la planta estimada es el controlador [43].

$$G_c(s) = \hat{G}_p(s)^{-1} = \frac{1}{\hat{G}_p(s)} \quad (2.11)$$

Los polos y ceros de la planta deben estar del lado izquierdo del plano complejo, es decir, deben ser estables para que el modelo sea invertible. Si el resultado de invertir el modelo es una función de transferencia impropia es necesario agregar un filtro como en 4.12. Donde $n \geq 2$ y λ es el parámetro a sintonizar. Los valores pequeños de λ proporcionan una respuesta rápida, mientras que los valores grandes presentan una respuesta lenta [44]:

$$f(s) = \frac{n\lambda s + 1}{(\lambda s + 1)^n} \quad (2.12)$$

Por lo tanto la función de transferencia del controlador $G_c(s)$ queda de la siguiente forma [44]:

$$G_c(s) = f(s)\hat{G}_p(s)^{-1} \quad (2.13)$$

2.3.3. Control RST

El control RST (Siglas en inglés de Reference Signal Tracking) es un control de dos grados de libertad, sintonizado por el método de colocación de polos. La estructura de control RST se muestra en la Figura 2.8, donde R , S , y T son los polinomios del controlador que obedecen las siguientes restricciones de grado:

$$\deg R \leq \deg S \quad (2.14)$$

$$\deg T \leq \deg S \quad (2.15)$$

$$\deg A + \deg B \leq \deg P_c \quad (2.16)$$

P_c es el polinomio característico de la función de transferencia en lazo cerrado del diagrama de bloques de la Figura 2.8.

$$\frac{y(t)}{r(t)} = \frac{B(s)T(s)}{A(s)S(s) + B(s)R(s)} \quad (2.17)$$

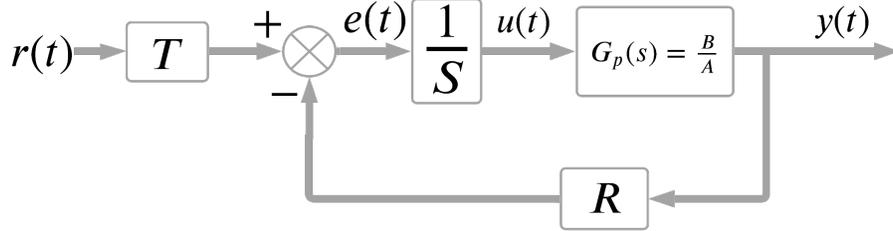


Figura 2.8: Estructura de control RST.

Añadir un integrador al polinomio $S(s)$ del controlador RST permite un rechazo a perturbaciones y asegura que la salida del sistema alcance la referencia deseada. La sintonización del controlador RST se basa en la teoría de la colocación de polos, que consiste en especificar un polinomio de estabilidad arbitraria y calcular y de acuerdo con la ecuación de Bezout [45]:

$$P_c \text{ deseado} = A(s)S(s) + B(s)R(s) \quad (2.18)$$

$T(s)$ actúa como una ganancia que permite llegar al valor de la referencia un tiempo finito. Para encontrar el valor de $T(s)$ se usa el teorema de valor final ante un escalón unitario en la función de transferencia del sistema en lazo cerrado (2.17) [45].

$$1 = \lim_{s \rightarrow 0} s \frac{T(s)B(s)}{A(s)S(s) + B(s)R(s)} \frac{1}{s} \quad (2.19)$$

2.3.4. Índices de desempeño

Los índices de desempeño son herramientas que permiten la cuantificación del desempeño de los controladores a través de la medición del error. Entre estos índices se encuentran: integral del error absoluto (IAE), integral del tiempo por el error absoluto (ITAE) e integral del error cuadrático (ISE).

$$IAE = \int_0^t |e(t)| dt \quad (2.20)$$

$$ITAE = \int_0^t t |e(t)| dt \quad (2.21)$$

$$ISE = \int_0^t |e(t)|^2 dt \quad (2.22)$$

Donde el error $e(t)$ está dado por:

$$e(t) = r(t) - y(t) \quad (2.23)$$

Capítulo 3

Modelo dinámico de celda de combustible tipo PEM

A continuación se presenta un modelo matemático correspondiente a una monocelda de combustible tipo PEM. Este es un modelo multifísico que representa el comportamiento de la celda a nivel de capas, en las que se contemplan los procesos de tres dominios físicos: dominio eléctrico, dominio fluídico y dominio térmico. En la Figura 3.1 se muestra la interacción de las variables debido a la integración de los fenómenos que ocurren en los diferentes dominios.

Para la formulación del modelo se consideraron las ecuaciones mostradas por Gao et al. [1], donde los autores desarrollan el modelado de una celda en los tres dominios físicos. Las ecuaciones fueron tomadas y adecuadas considerando los parámetros disponibles de la celda y buscando la capacidad de conectar variables de la celda con modelos de equipos auxiliares. Las ecuaciones usadas para el modelo del presente trabajo obedecen a leyes físicas que rigen el comportamiento eléctrico, fluídico y térmico de la celda de combustible y de los equipos auxiliares considerados. Los parámetros de los modelos estáticos y/o dinámicos se han definido considerando los datos para una PEMFC de 1.2 kW (reportados en [1, 3, 5]) y los datos de una PEMFC de 5 kW ([4, 6, 7]). Los parámetros de los modelos de los equipos auxiliares se definieron buscando compatibilidad con los rangos de operación de la PEMFC. La congruencia del rango de operación de la FC y de los de equipos auxiliares es importante para una simulación correcta de todo el sistema.

3.1. Hipótesis de modelado

Las hipótesis consideradas para desarrollar este modelo son:

- **Hipótesis 1:** La caída de presión en los canales se debe únicamente a la pérdida mecánica global de gas (pérdida de presión) que pasa a través de los canales rectos y al flujo de masa hacia la capa de difusión. Se ignoran la caída de presión debido a la geometría del canal local (por ejemplo, curvas) y el cambio de fase del agua.
- **Hipótesis 2:** El agua no sale de los canales en fase líquida sino solo en fase vapor: el agua en la fase líquida se considera solo en las condiciones de saturación y cálculo de la presión del gas en los canales.
- **Hipótesis 3:** Se considera que la difusión de especies en las capas de difusión, los sitios catalíticos y la membrana están en régimen permanente.
- **Hipótesis 4:** No hay gradiente de presión total en la capa de difusión: se desprecia el transporte de masa debido a la diferencia de presión.
- **Hipótesis 5:** La caída de voltaje asociada con la pérdida de activación es insignificante en el ánodo en comparación con la del cátodo.
- **Hipótesis 6:** Las pérdidas óhmicas existen solo en la membrana: la resistencia eléctrica de la placa bipolar y las resistencias de contacto se consideran insignificantes.
- **Hipótesis 7:** Los gases circulando a través de las capas de las FC son gases ideales.
- **Hipótesis 8:** La capacidad térmica y la conductividad térmica de cada capa permanecen sin cambios durante la operación de la celda de combustible.
- **Hipótesis 9:** La geometría de la celda de combustible permanece sin cambios durante la operación de la celda de combustible.
- **Hipótesis 10:** La caída de presión en los sitios catalíticos es insignificante (tanto en el lado del ánodo como del cátodo).

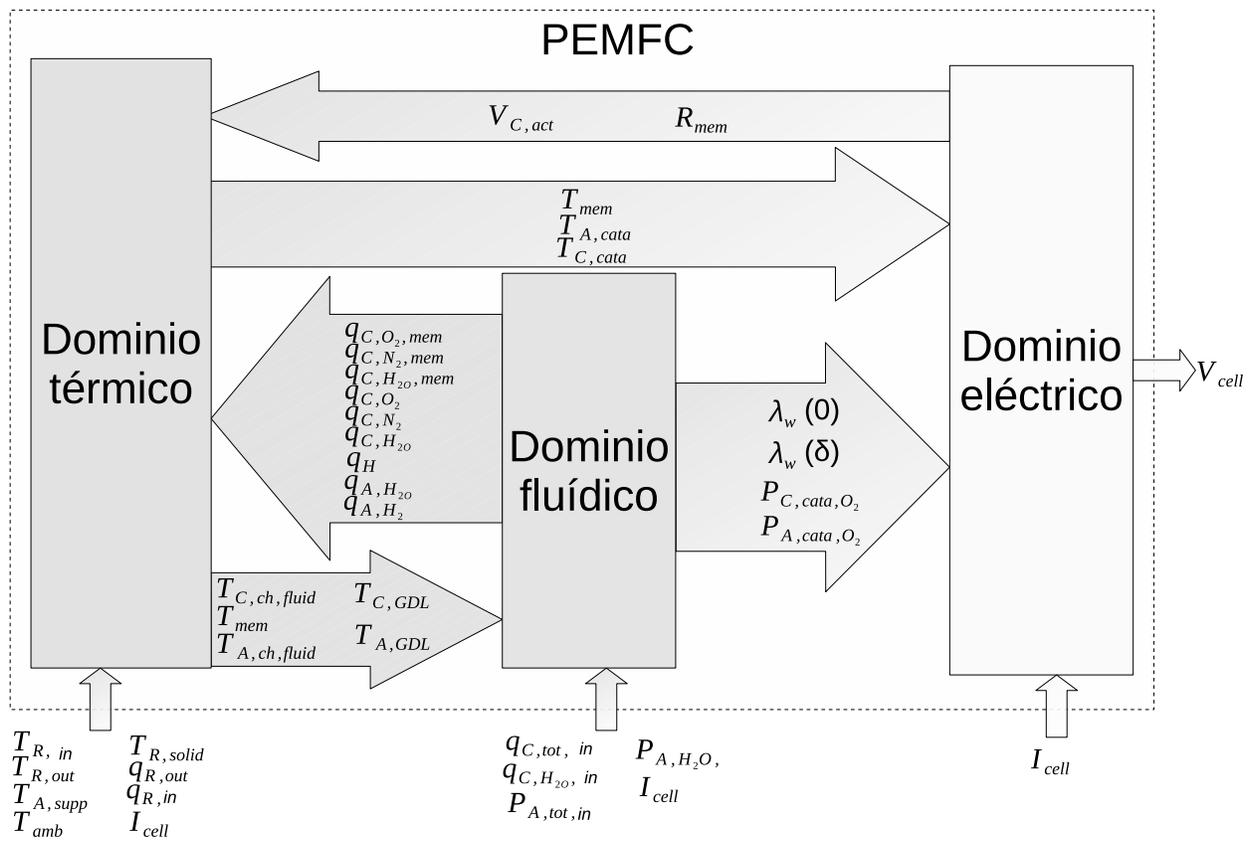


Figura 3.1: Interacción de las variables entre dominios físicos de una PEMFC.

3.2. Modelo en el dominio eléctrico

En esta sección se presenta el modelo matemático del dominio eléctrico de una celda de combustible de membrana de intercambio protónico (PEMFC). En la Figura 3.2 se muestra la interacción entre las variables de las diferentes capas de la PEMFC, las cuales determinan su comportamiento eléctrico.

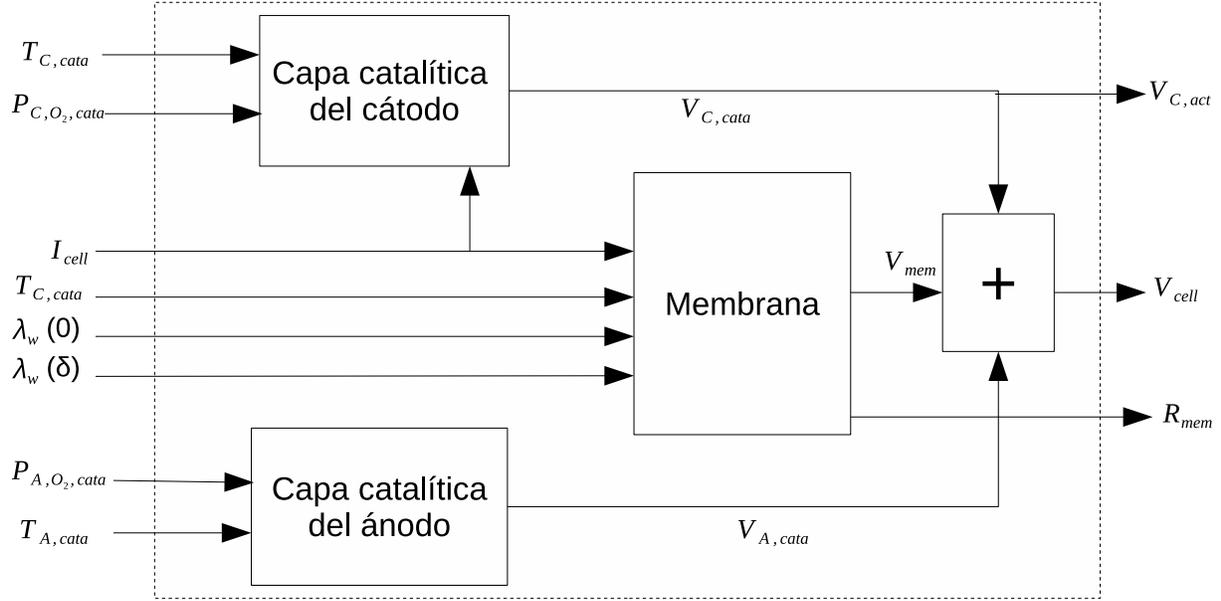


Figura 3.2: Diagrama de bloques de una PEMFC en dominio eléctrico.

El voltaje total de cada FC es igual a la suma de los voltajes de cada una de sus capas constituyentes:

$$V_{cell} = \sum V_{layer} = V_{C,cata} + V_{mem} + V_{A,cata} \quad (3.1)$$

Estados del modelo en dominio eléctrico

La variable del modelo en dominio eléctrico que evoluciona en el tiempo es el sobrepotencial de activación en el cátodo:

$$x_1 = [V_{C,act}] \quad (3.2)$$

3.2.1. Modelo en dominio eléctrico - Capa catalítica del cátodo

Entradas del modelo de capa catalítica del cátodo

- $T_{C,cata}$: Temperatura en la capa catalítica del cátodo (K).
- $P_{C,O_2,cata}$: Presión parcial del oxígeno en la capa catalítica del cátodo (Pa).

- I_{cell} : Corriente eléctrica en la celda (A).

Ecuaciones del modelo de capa catalítica del cátodo

La contribución del cátodo a la fuerza electromotriz se calcula con:

$$E_C = 1,229 - 0,85 \times 10^{-3}(T_{C,cata} - 298,15) + \frac{R * T_{C,cata}}{2F} \ln \left(\sqrt{\frac{P_{C,O_2,cata}}{101325}} \right) \quad (3.3)$$

El cálculo del sobrepotencial o pérdida de voltaje por activación en estado transitorio se modela como:

$$\frac{d}{dt} V_{C,act} = \frac{I_{cell}}{C_{dl}} \left(1 - \frac{1}{\eta_{C,act}} V_{C,act} \right) \quad (3.4)$$

$\eta_{C,act}$ es la pérdida de voltaje por activación en estado estacionario, es decir, el sobrepotencial que ocurre debido a la activación de las reacciones electroquímicas.

Cuando $\eta_{C,act}$ es pequeño, este se puede aproximar como una ecuación lineal:

$$\eta_{C,act} = \frac{RT_{C,cata}}{nF} \frac{I_{cell}}{I_0 A_{C,cata}} \quad (3.5)$$

Cuando $\eta_{C,act}$ es grande se calcula mediante la siguiente relación no lineal:

$$\eta_{C,act} = \frac{RT_{C,cata}}{nF} \frac{I_{cell}}{\alpha i_0 A_{C,cata}} \ln \left(\frac{I_{cell}}{i_0 A_{C,cata}} \right) \quad (3.6)$$

El parámetro característico del sobrepotencial por activación es la densidad de corriente de intercambio i_0 , la cual se calcula en función de las condiciones de la temperatura y presión de operación:

$$i_0 = i_{0,ref} \left(\frac{P_{C,O_2,cata}}{101325} \right) \exp \left(- \frac{E_{O_2}}{RT_{C,cata}} \left(1 - \frac{T_{C,cata}}{298,15} \right) \right) \quad (3.7)$$

El voltaje total (V) de los sitios catalíticos del cátodo se calcula con la siguiente relación:

$$V_{C,cata} = E_C - V_{C,act} \quad (3.8)$$

3.2.2. Modelo en dominio eléctrico - Membrana

Entradas del modelo de la membrana

- T_{mem} : Temperatura de la membrana (K).
- $\lambda_w(z)$: contenido de agua de la membrana en función de la posición en el eje longitudinal z .

- I_{cell} : Corriente eléctrica en la celda (A).
- $\lambda_w(0)$: Contenido de agua en el lado del ánodo.
- $\lambda_w(\delta)$: Contenido de agua en el lado del cátodo.
- $D_{\lambda_w}^-$: Coeficiente de retrodifusión del agua en la membrana ($\frac{m^2}{s}$)¹.

Ecuaciones del modelo de la membrana

$$\{Bn1, Bn2, \Delta z_{dry}\} = \begin{cases} \{0, \delta, 0\} & \text{si } \lambda_w(0) > 1 \text{ and } \lambda_w(\delta) > 1 \\ \{0, z_{crit}, \delta - z_{crit}\} & \text{si } \lambda_w(0) > 1 \text{ and } \lambda_w(\delta) \leq 1 \\ \{z_{crit}, \delta, z_{crit}\} & \text{si } \lambda_w(0) \leq 1 \text{ and } \lambda_w(\delta) > 1 \\ \{0, 0, \delta\} & \text{si } \lambda_w(0) \leq 1 \text{ and } \lambda_w(\delta) \leq 1 \end{cases} \quad (3.9)$$

donde z_{crit} se define abajo según los valores de corriente, y depende de k_A y k_B , los cuales en cualquier caso se calculan de la siguiente forma:

$$k_A = \frac{n_{sat} M_{H_2O} I_{cell}}{22F} \quad (3.10)$$

$$k_B = \frac{\rho_{dry,mem} A_{mem} D_{\lambda_w}^- M_{H_2O}}{M_{mem}} \quad (3.11)$$

El sobrepotencial óhmico es la pérdida de voltaje con relación al voltaje termodinámico o voltaje ideal de la celda de combustible. Este sobrepotencial ocurre debido a la resistencia que oponen los materiales al transporte de carga positiva y negativa. El modelo considera la resistencia de la membrana al paso de protones. El parámetro característico del sobrepotencial óhmico es la resistencia de la membrana R_{mem} (Ω). Para $I_{cell} \neq 0$, z_{crit} es (3.12) y R_{mem} es obtenida por (3.13):

$$z_{crit} = \frac{k_B}{k_a} \ln \left(\frac{(1 - \lambda_w(0)) e^{\frac{k_A}{k_B} \delta} - (1 - \lambda_w(\delta))}{\lambda_w(\delta) - \lambda_w(0)} \right) \quad (3.12)$$

$$R_{mem} = \frac{1}{A_{mem}} \frac{k_B \alpha_3}{k_A \alpha_1} \left[\frac{k_A}{k_B} (Bn2 - Bn1) - \ln \left(\frac{\alpha_1 + \alpha_2 e^{\frac{k_A}{k_B} Bn2}}{\alpha_1 + \alpha_2 e^{\frac{k_A}{k_B} Bn1}} \right) \right] + \frac{\alpha_3 * \Delta z_{dry}}{0,1933 * A_{mem}} \quad (3.13)$$

Donde:

$$\alpha_1 = 0,5193 \frac{\lambda_w(0) e^{\frac{k_A}{k_B} \delta} - \lambda_w(\delta)}{e^{\frac{k_A}{k_B} \delta} - 1} \quad (3.14)$$

¹La retrodifusión en las celdas de combustible tipo PEM (back-diffusion, en inglés) es el mecanismo de transporte de agua que contribuye a equilibrar el perfil del contenido de agua en la membrana, transportando sus moléculas desde el electrodo catódico hacia el lado del ánodo de la membrana [46].

$$\alpha_2 = 0,5193 \frac{\lambda_w(\delta) - \lambda_w(0)}{e^{\frac{k_A}{k_B} \delta} - 1} \quad (3.15)$$

$$\alpha_3 = \exp \left[1268 \left(\frac{1}{T_{mem}} - \frac{1}{303} \right) \right] \quad (3.16)$$

Para $I_{cell} = 0$, z_{crit} es (3.17) y la resistencia de la membrana R_{mem} es obtenida por (3.18):

$$z_{crit} = \frac{(1 - \lambda_w(0))\delta}{\lambda_w(\delta) - \lambda_w(0)} \quad (3.17)$$

$$R_{mem} = \frac{1}{A_{mem}} \frac{\alpha_3}{\alpha_5} \left[\ln \left(\frac{\alpha_4 + \alpha_5 * Bn2}{\alpha_4 + \alpha_5 * Bn1} \right) \right] + \frac{\alpha_3 * \Delta z_{dry}}{0,1933 * A_{mem}} \quad (3.18)$$

Donde:

$$\alpha_4 = 0,5193 * \lambda_w(0) - 0,326 \quad (3.19)$$

$$\alpha_5 = 0,5193 \frac{\lambda_w(\delta) - \lambda(0)}{\delta} \quad (3.20)$$

Finalmente el voltaje en la membrana de la celda V_{mem} (V) se obtiene por la ley de Ohm:

$$V_{mem} = -R_{mem} I_{cell} \quad (3.21)$$

3.2.3. Modelo en dominio eléctrico - Capa catalítica en el ánodo

Entradas del modelo de capa catalítica del ánodo

- $T_{A,cata}$: Temperatura en la capa catalítica del ánodo (K).
- $P_{A,H_2,cata}$: Presión parcial del hidrógeno en la capa catalítica del ánodo (Pa).

Ecuaciones del modelo de capa catalítica del ánodo

La contribución del ánodo a la fuerza electromotriz se obtiene con:

$$E_A = \frac{RT_{A,cata}}{2F} \ln \left(\frac{P_{A,cata,H_2}}{101325} \right) \quad (3.22)$$

El voltaje en la capa catalítica del ánodo se obtiene como:

$$V_{A,cata} = E_A \quad (3.23)$$

3.3. Modelo en el dominio fluidoico

En esta sección se presenta el modelo matemático del dominio fluidoico de una celda de combustible de membrana de intercambio protónico (PEMFC). En la Figura 3.3 se muestran las capas de la PEMFC que son consideradas en esta parte del modelo. También se muestran las interacciones entre las variables de las mismas, que ejercen una influencia en el comportamiento fluidoico del sistema.

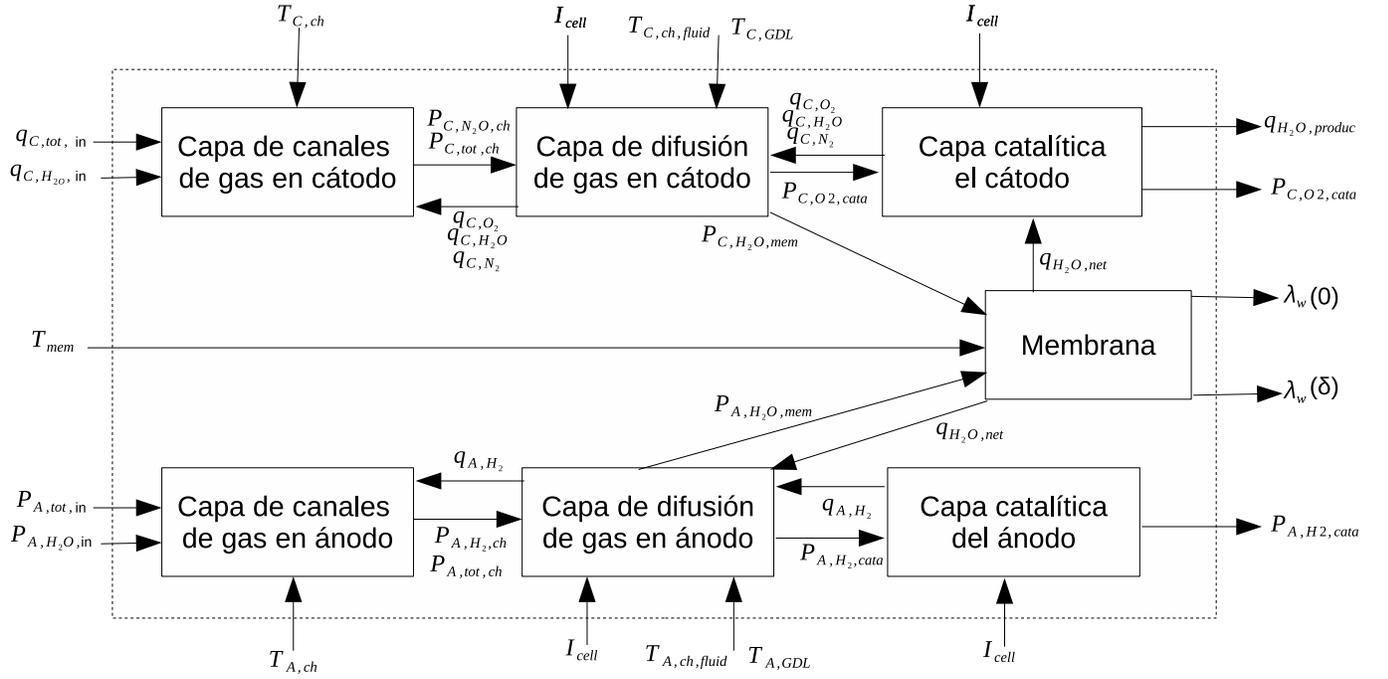


Figura 3.3: Diagrama de bloques de una PEMFC en modelo fluidoico.

Estados del modelo en dominio fluidoico

Las variables del modelo en dominio fluidoico que presentan una evolución en el tiempo, o variables dinámicas del sistema, están declaradas en el vector x_2 :

$$x_2 = \begin{bmatrix} P_{C,O_2,ch} \\ P_{C,N_2,ch} \\ m_{C,H_2O,ch} \\ P_{A,H_2,ch} \\ m_{A,H_2O,ch} \end{bmatrix} \quad (3.24)$$

3.3.1. Modelo en dominio fluídico - Canales de gas en el cátodo

Entradas del modelo de canales de gas en el cátodo

- $T_{C,ch}$: Temperatura de los canales de gas en el cátodo (K).
- q_{C,O_2} : Flujo másico del oxígeno ($\frac{kg}{s}$).
- q_{C,N_2} : Flujo másico del nitrógeno ($\frac{kg}{s}$).
- q_{C,H_2O} : Flujo másico del agua ($\frac{kg}{s}$).
- $q_{C,H_2O,in}$: Flujo másico del agua que ingresa a la celda del lado del cátodo ($\frac{kg}{s}$).
- $q_{C,tot,in}$: Flujo másico total que entra a la celda del lado del cátodo ($\frac{kg}{s}$).

Ecuaciones del modelo de la capa de canales de gas en el cátodo

La presión total en el medio de los canales $P_{C,tot,ch}$ es obtenida por:

$$P_{C,tot,ch} = P_{C,O_2,ch} + P_{C,N_2,ch} + P_{C,H_2O,ch} \quad (3.25)$$

Donde $P_{C,O_2,ch}$, $P_{C,N_2,ch}$ y $P_{C,H_2O,ch}$ son respectivamente la presión parcial del oxígeno, nitrógeno y vapor de agua en los canales del cátodo.

El comportamiento dinámico del fluido en los canales del cátodo se rige por el principio y las ecuaciones de conservación de la materia de cada especie gaseosa en el volumen de control de los canales de suministro de gas:

$$\frac{V_{C,ch}M_{O_2}}{RT_{C,ch}} \frac{dP_{C,O_2,ch}}{dt} = q_{C,O_2,in} + q_{C,O_2,out} - q_{C,O_2} \quad (3.26)$$

$$\frac{V_{C,ch}M_{N_2}}{RT_{C,ch}} \frac{dP_{C,N_2,ch}}{dt} = q_{C,N_2,in} + q_{C,N_2,out} - q_{C,N_2} \quad (3.27)$$

$$\frac{dm_{C,H_2O,ch}}{dt} = q_{C,H_2O,in} + q_{C,H_2O,out} - q_{C,H_2O} \quad (3.28)$$

Donde $q_{C,O_2,in}$, $q_{C,N_2,in}$ y $q_{C,H_2O,in}$ son respectivamente los flujos másicos del oxígeno, nitrógeno y vapor de agua en los canales de entrada en el cátodo; $q_{C,O_2,out}$, $q_{C,N_2,out}$ y $q_{C,H_2O,out}$ son los respectivos flujos másicos de oxígeno, nitrógeno, y vapor de agua en la salida de los canales en el cátodo; $m_{C,H_2O,ch}$ es el total de masa del agua (líquida y en vapor) en los canales.

La presión de vapor de agua $P_{C,H_2O,ch}$ en los canales del cátodo obedece a la siguiente ecuación:

$$P_{C,H_2O,ch} = \begin{cases} \frac{m_{C,H_2O,ch}RT}{V_{C,ch}M_{H_2O}} & \text{si } \frac{m_{C,H_2O,ch}RT}{V_{C,ch}M_{H_2O}} \leq P_{C,H_2O,ch}^{Sat} \\ P_{C,H_2O,ch}^{Sat} & \text{si } \frac{m_{C,H_2O,ch}RT}{V_{C,ch}M_{H_2O}} > P_{C,H_2O,ch}^{Sat} \end{cases} \quad (3.29)$$

$P_{C,H_2O,ch}^{Sat}$ es la presión de saturación del agua en los canales. Esta presión de saturación se calcula en función de la temperatura en los canales:

$$\log_{10}(10^{-5} \times P_{H_2O}^{Sat}) = -2,1794 + 0,02953(T - 273,15) - 9,1837 \times 10^{-5}(T - 273,15)^2 + 1,4454 \times 10^{-7}(T - 273,15)^3 \quad (3.30)$$

Los flujos máxicos de oxígeno y nitrógeno en la entrada de los canales del cátodo se calculan dependiendo del tipo de comburente (aire u oxígeno puro); el flujo máxico total en la entrada $q_{C,tot,in}$; y el flujo máxico del vapor en la entrada $q_{C,H_2O,in}$:

$$q_{C,O_2,in} = q_{C,in} \frac{x_{C,O_2,in} M_{O_2}}{C_{C,in}} \quad (3.31)$$

$$q_{C,N_2,in} = q_{C,in} \frac{x_{C,N_2,in} M_{N_2}}{C_{C,in}} \quad (3.32)$$

Donde:

$$q_{C,in} = q_{C,tot,in} - q_{C,H_2O,in} \quad (3.33)$$

$$C_{C,in} = x_{C,O_2,in} M_{O_2} + x_{C,N_2,in} M_{N_2} \quad (3.34)$$

$x_{C,(sub),in}$ representa la fracción molar del gas seco en la entrada del cátodo:

$$\{x_{C,O_2}; x_{C,N_2}\} = \begin{cases} \{0,22; 0,78\} & \text{Aire} \\ \{1; 0\} & \text{Oxígeno puro} \\ \{0; 1\} & \text{Nitrógeno puro} \end{cases} \quad (3.35)$$

Los flujos máxicos de oxígeno, nitrógeno y vapor en la salida de los canales del cátodo se obtienen del caudal máxico de salida total $q_{C,tot,out}$, masa molar de gases y presiones parciales de oxígeno, nitrógeno y agua en los canales:

$$q_{C,O_2,out} = q_{C,tot,out} \frac{P_{C,O_2,ch} M_{O_2}}{C_{C,out}} \quad (3.36)$$

$$q_{C,N_2,out} = q_{C,tot,out} \frac{P_{C,N_2,ch} M_{N_2}}{C_{C,out}} \quad (3.37)$$

$$q_{C,H_2O,out} = q_{C,tot,out} \frac{P_{C,H_2O,ch} M_{H_2O}}{C_{C,out}} \quad (3.38)$$

Donde:

$$C_{C,out} = P_{C,O_2,ch} M_{O_2} + P_{C,N_2,ch} M_{N_2} + P_{C,H_2O,ch} M_{H_2O} \quad (3.39)$$

3.3.2. Modelo en dominio fluídico - Capa de difusión en el cátodo

Entradas del modelo de la capa de difusión en el cátodo

- $T_{C,ch,fluid}$: Temperatura del fluido en los canales del cátodo (K).
- $P_{C,N_2,ch}$: Presión parcial del nitrógeno en los canales del cátodo (Pa).
- $P_{C,tot,ch}$: Presión en los canales del cátodo (Pa).
- $T_{C,GDL}$: Temperatura en la capa de difusión de gases del cátodo (K).

Ecuaciones del modelo de capa catalítica del cátodo

De acuerdo con la suposición de modelado 3, se considera que la ecuación de conservación de materia aplicada en la capa de difusión del ánodo se establece en régimen permanente (sin acumulación de materia). En estas condiciones, el flujo de entrada de cada especie es igual a su flujo de salida.

El coeficiente de difusión binaria en el vacío entre i y j se puede obtener en función de la presión total mediante la ecuación de Cussler [2]:

$$D_{i-j} = D_{i-j}^{ref} \frac{P_{tot}}{101325} \left(\frac{T}{T_0} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (3.40)$$

D_{i-j}^{ref} es el coeficiente de difusión de referencia entre i y j ($\frac{m^2}{s}$). $i \in O_2, N_2, H_2O$, j representa todas las especies diferentes de i . T_0 es la temperatura de referencia.

Tabla 3.1: **Temperatura y coeficiente de difusión de referencia (fórmula de Cussler) [2].**

Gases	T_0 (K)	D_{i-j}^{ref} ($\frac{m^2}{s}$)
$H_2 - H_2O$	307.1	$9,15 \times 10^{-5}$
$O_2 - H_2O$	308.1	$2,82 \times 10^{-5}$

El coeficiente de difusión efectivo D_{i-j}^{eff} , para adaptar las fórmulas de difusión de vacíos a un ambiente poroso, se logra con la corrección de Brüggerman [47].

$$D_{i-j}^{eff} = D_{i-j} \varphi^\xi \quad (3.41)$$

Donde φ es la porosidad y ξ es la tortuosidad de la capa de difusión.

Debido a que no existe un consumo o generación de Nitrógeno (N_2) en el funcionamiento de la celda, no se crea un flujo másico q_{C,N_2} hacia los sitios catalíticos y se considera $P_{C,N_2,ch} =$

$P_{C,N_2,cata}$. En este caso, se describe únicamente el fenómeno de difusión entre el oxígeno (O_2) y el vapor de agua (H_2O). El coeficiente de difusión efectivo entre $i = O_2$ y $j = H_2O$ se obtiene de la Ecuación (3.41) resultando como:

$$D_{O_2-H_2O}^{eff} = 2,82 \times 10^{-5} \frac{P_{C,tot,ch}}{101325} \left(\frac{T_{C,ch,fluid}}{308,1} \right)^{\frac{3}{2}} (\varphi_{GDL})^{\xi_{GDL}} \quad (3.42)$$

La presión parcial del oxígeno en la capa de difusión del cátodo se obtiene de la siguiente forma:

$$P_{C,O_2,GDL} = P_{C,O_2,ch} - \left(\frac{(\frac{I_{cell}}{4F})RT_{C,GDL}}{D_{O_2-H_2O}^{eff}A_{GDL}} \right) \delta_{GDL} \quad (3.43)$$

La presión parcial del vapor de agua en la capa de difusión del cátodo se obtiene considerando lo siguiente:

$$P_{C,tot,GDL} = P_{C,tot,ch} \quad (3.44)$$

$$P_{C,tot,GDL} = P_{C,O_2,GDL} + P_{C,H_2O,GDL} + P_{C,N_2,ch} \quad (3.45)$$

$$P_{C,H_2O,GDL} = P_{C,tot,GDL} - P_{C,O_2,GDL} - P_{C,N_2,ch} \quad (3.46)$$

3.3.3. Modelo en dominio fluídico - Capa catalítica del cátodo

Entradas del modelo de la capa catalítica del cátodo

- I_{cell} : Corriente eléctrica en la celda (A).
- $P_{C,H_2O,GDL}$: Presión parcial del vapor de agua en la capa de difusión del cátodo (Pa).
- $P_{C,N_2,GDL}$: Presión parcial del nitrógeno de agua en la capa de difusión del cátodo (Pa).
- $P_{C,O_2,GDL}$: Presión parcial del oxígeno de agua en la capa de difusión del cátodo (Pa).

Ecuaciones del modelo de capa catalítica del cátodo

Los flujos másicos de gas están determinados por la velocidad de reacción electroquímica de la celda de combustible, por lo tanto, dependen de la corriente eléctrica I_{cell} . El flujo másico de oxígeno que se distribuye en los sitios catalíticos es el siguiente:

$$q_{C,O_2} = \frac{M_{O_2}I_{cell}}{4F} \quad (3.47)$$

El flujo másico de nitrógeno hacia los sitios catalíticos es el siguiente:

$$q_{C,N_2} = 0 \quad (3.48)$$

3.3. Modelo en el dominio fluídico

El flujo másico de agua producida por la reacción electroquímica está dado por:

$$q_{C,H_2O,prod} = \frac{M_{H_2O} I_{cell}}{2F} \quad (3.49)$$

El flujo másico de agua desde los sitios catalíticos hacia los canales del cátodo q_{C,H_2O} está impuesto por el balance de agua en la membrana. El balance de materia para el agua se obtiene mediante:

$$q_{C,H_2O} + q_{C,H_2O,prod} + q_{C,H_2O,mem} = 0 \quad (3.50)$$

Donde $q_{C,H_2O,mem}$ es el flujo másico neto de agua a través de la membrana desde el lado del cátodo al lado del ánodo.

Las presiones parciales en la capa catalítica del cátodo son iguales a las presiones parciales en la capa de difusión del cátodo.

$$P_{C,H_2O,cata} = P_{C,H_2O,GDL} \quad (3.51)$$

$$P_{C,O_2,cata} = P_{C,O_2,GDL} \quad (3.52)$$

$$P_{C,N_2,cata} = P_{C,N_2,GDL} \quad (3.53)$$

3.3.4. Modelo en dominio fluídico - Membrana

Entradas del modelo de la membrana

- I_{cell} : Corriente eléctrica en la celda (A).
- T_{mem} : Temperatura de la membrana de la celda (K).
- $P_{C,H_2O,cata}$: Presión parcial del agua en la capa catalítica del cátodo (Pa).
- $P_{A,H_2O,cata}$: Presión parcial del agua en la capa catalítica del ánodo (Pa).

Ecuaciones del modelo fluídico de la membrana

El contenido de agua en una membrana tipo Nafion no es uniforme. El coeficiente de contenido de agua, λ_w , se define como la relación entre el número de moléculas de agua por sitio cargado.

$$\lambda_w = \begin{cases} 0,043 + 17,81a_w - 39,85a_w^2 + 36a_w^3 & si \ 0 < a_w \leq 1 \\ 14 + 1,4(a_w - 1) & si \ 1 < a_w \leq 3 \end{cases} \quad (3.54)$$

Donde a_w es la actividad del agua, determinada en función de la presión parcial de agua P_{H_2O} y la presión de saturación de vapor $P_{H_2O}^{sat}$:

$$a_w = \frac{P_{H_2O}}{P_{H_2O}^{sat}} \quad (3.55)$$

Los contenidos de agua $\lambda_{w,C} = \lambda_w(\delta_{mem})$ y $\lambda_{w,A} = \lambda_w(0)$ en los lados del cátodo y del ánodo se pueden calcular a partir de $P_{C,H_2O,mem}$ y $P_{A,H_2O,mem}$, que son las presiones del agua en la membrana, del lado del cátodo y ánodo respectivamente.

$$P_{C,H_2O,mem} = P_{C,H_2O,cata} \quad (3.56)$$

$$P_{A,H_2O,mem} = P_{A,H_2O,cata} \quad (3.57)$$

El contenido promedio de agua de la membrana es:

$$\bar{\lambda}_w = \frac{1}{2}(\lambda_{w,C} + \lambda_{w,A}) \quad (3.58)$$

D_{λ_w} ($\frac{m^2}{s}$) es el coeficiente medio de retrodifusión de agua en la membrana.

$$D_{\lambda_w} = 10^{-4} \exp\left(2,416 \left(\frac{1}{303} - \frac{1}{T_{mem}}\right)\right) C_D(\bar{\lambda}_w) \quad (3.59)$$

Con:

$$C_D(\bar{\lambda}_w) = \begin{cases} 10^{-6} & \text{si } \bar{\lambda}_w < 2 \\ 10^{-6}(1 + 2(\bar{\lambda}_w - 2)) & \text{si } 2 \leq \bar{\lambda}_w \leq 3 \\ 10^{-6}(3 - 1,67(\bar{\lambda}_w - 3)) & \text{si } 3 < \bar{\lambda}_w < 4,5 \\ 1,25 \times 10^{-6} & \text{si } \bar{\lambda}_w \geq 4,5 \end{cases} \quad (3.60)$$

Cuando $I_{cell} \neq 0$ la expresión del flujo másico neto de agua en la membrana es la siguiente:

$$q_{H_2O,net} = \frac{k_A}{e^{\frac{k_A}{k_B} \delta_{mem}} - 1} \left(\lambda_w(0) e^{\frac{k_A}{k_B} \delta_{mem}} - \lambda_w(\delta_{mem}) \right) \quad (3.61)$$

$$C_1 = \frac{1}{e^{\frac{k_A}{k_B} \delta_{mem}} - 1} (\lambda_w(\delta_{mem}) - \lambda_w(0)) \quad (3.62)$$

Cuando $I_{cell} = 0$ la expresión del flujo másico neto de agua en la membrana es la siguiente:

$$q_{H_2O,net} = \frac{k_B(\lambda_w(0) - \lambda_w(\delta_{mem}))}{\delta_{mem}} \quad (3.63)$$

$$C_2 = \lambda_w(0) \quad (3.64)$$

Con:

$$k_A = \frac{n_{sat} M_{H_2O} I_{cell}}{22F} \quad (3.65)$$

$$k_B = \frac{\rho_{dry,mem} A_{mem} D_{\lambda_w} M_{H_2O}}{M_{mem}} \quad (3.66)$$

3.3.5. Modelo en dominio fluídico - Capa catalítica del ánodo

Entradas del modelo de canales del ánodo

- I_{cell} : Corriente eléctrica en la celda (A).
- $P_{A,H_2O,GDL}$: Presión parcial del vapor de agua en la capa de difusión del ánodo (Pa).
- $P_{A,H_2,GDL}$: Presión parcial del hidrógeno en la capa de difusión del ánodo (Pa).

Ecuaciones del modelo de capa catalítica del ánodo

La tasa de flujo másico de hidrógeno está determinada por la velocidad de reacción electroquímica de la celda de combustible.

$$q_{A,H_2} = \frac{M_{H_2} I_{cell}}{2F} \quad (3.67)$$

El flujo másico de agua que pasa a través de la membrana desde el ánodo q_{A,H_2O} ($\frac{kg}{s}$) está determinado por el balance másico de agua en la membrana.

Las presiones parciales en la capa catalítica del ánodo son iguales a las presiones parciales en la capa de difusión del ánodo.

$$P_{A,H_2O,cata} = P_{A,H_2O,GDL} \quad (3.68)$$

$$P_{A,H_2,cata} = P_{A,H_2,GDL} \quad (3.69)$$

3.3.6. Modelo en dominio fluídico - Capa de difusión en el ánodo

Entradas del modelo de capa de difusión en el ánodo

- $P_{A,tot,ch}$: Presión en la entrada de los canales del ánodo (Pa).
- $P_{A,H_2O,ch}$: Presión parcial del agua en la entrada de los canales del ánodo (Pa).
- $T_{A,ch,fluid}$: Temperatura del fluido en los canales del ánodo (K).
- $T_{A,GDL}$: Temperatura en la capa de difusión de gases del ánodo (K).

En el lado del ánodo el fenómeno de difusión es entre el Hidrógeno (H_2) y el vapor de agua (H_2O). El coeficiente de difusión efectivo entre $i = H_2$ y $j = H_2O$ se obtiene de la Ecuación (3.41) resultando como:

$$D_{H_2-H_2O}^{eff} = 9,15 \times 10^{-5} \frac{P_{A,tot,ch}}{101325} \left(\frac{T_{A,ch,fluid}}{307,1} \right)^{\frac{3}{2}} (\varphi_{GDL})^{\xi_{GDL}} \quad (3.70)$$

La presión parcial del oxígeno en la capa de difusión del cátodo se obtiene de la siguiente forma:

$$P_{A,H_2,GDL} = P_{A,H_2,ch} - \left(\frac{\left(\frac{I_{cell}}{2F}\right)RT_{A,GDL}}{D_{H_2-H_2O}^{eff}A_{GDL}} \right) \delta_{GDL} \quad (3.71)$$

La presión parcial del vapor de agua en la capa de difusión del ánodo se obtiene considerando lo siguiente:

$$P_{A,tot,ch} = P_{A,tot,GDL} \quad (3.72)$$

$$P_{A,tot,GDL} = P_{A,H_2,GDL} + P_{A,H_2O,GDL} \quad (3.73)$$

$$P_{A,H_2O,GDL} = P_{A,tot,ch} - P_{A,H_2,GDL} \quad (3.74)$$

3.3.7. Modelo en dominio fluídico - Canales de gas en el ánodo

Entradas del modelo de canales de gas en el ánodo

- $P_{A,tot,in}$: Presión parcial en la entrada (Pa).
- $P_{A,H_2O,in}$: Presión parcial del agua en la entrada (Pa).
- $T_{A,ch}$: Temperatura en los canales del ánodo (K).
- q_{A,H_2} : Flujo másico de hidrógeno ($\frac{kg}{s}$).
- q_{A,H_2O} : Flujo másico del agua ($\frac{kg}{s}$).

Ecuaciones del modelo de canales de gas en el ánodo

La presión total en el medio de los canales $P_{A,tot,ch}$ es obtenida por:

$$P_{A,tot,ch} = P_{A,H_2,ch} + P_{A,H_2O,ch} \quad (3.75)$$

Donde $P_{A,H_2,ch}$ y $P_{A,H_2O,ch}$ son respectivamente la presión parcial del hidrógeno y vapor de agua en los canales del ánodo.

El comportamiento dinámico del fluido en los canales del ánodo viene dado por la conservación de la masa de cada especie gaseosa en el volumen de control de los canales:

$$\frac{V_{A,ch}M_{H_2}}{RT} \frac{dP_{A,H_2,ch}}{dt} = q_{A,H_2,in} + q_{A,H_2,out} - q_{A,H_2} \quad (3.76)$$

$$\frac{dm_{A,H_2O,ch}}{dt} = q_{A,H_2O,in} + q_{A,H_2O,out} - q_{A,H_2O} \quad (3.77)$$

Donde $q_{A,H_2,in}$ y $q_{A,H_2O,in}$ son respectivamente los flujos másicos de hidrógeno y vapor de agua en los canales de entrada en el ánodo; $q_{A,H_2,out}$ y $q_{A,H_2O,out}$ son los respectivos flujos másicos de hidrógeno, y vapor de agua en la salida de los canales en el ánodo; $m_{A,H_2O,ch}$ es

3.3. Modelo en el dominio fluídico

el total de masa del agua (líquida y en vapor) contenida en los canales.

Para tener en cuenta el agua en fase líquida en los canales y las condiciones de humedad, la presión de vapor $P_{A,H_2O,ch}$ en los canales del ánodo debe verificarse mediante la siguiente ecuación:

$$P_{A,H_2O,ch} = \begin{cases} \frac{m_{A,H_2O,ch}RT}{V_{A,ch}M_{H_2O}} & \text{si } \frac{m_{A,H_2O,ch}RT}{V_{A,ch}M_{H_2O}} \leq P_{A,H_2O,ch}^{Sat} \\ P_{A,H_2O,ch}^{Sat} & \text{si } \frac{m_{A,H_2O,ch}RT}{V_{A,ch}M_{H_2O}} > P_{A,H_2O,ch}^{Sat} \end{cases} \quad (3.78)$$

Donde $P_{A,H_2O,ch}^{Sat}$ es la presión de saturación del agua en los canales.

Los flujos másicos de hidrógeno y vapor en la entrada de los canales del ánodo se obtienen según el gas comburente que se alimente (hidrógeno puro, gas reformado), y depende del flujo másico total en la entrada $q_{A,tot,in}$; la presión total en la entrada $P_{A,tot,in}$ y la presión parcial del vapor de agua en la entrada $P_{A,H_2O,in}$:

$$P_{A,tot,in} = P_{A,H_2,in} + P_{A,H_2O,in} \quad (3.79)$$

$$q_{A,tot,in} = 1,4319 \times 10^{-8}(P_{A,tot,in} - P_{A,tot,ch}) \quad (3.80)$$

$$q_{A,H_2,in} = q_{A,tot,in} \frac{x_{AH_2,in}(P_{A,tot,in} - P_{A,H_2O,in})M_{H_2}}{C_{A,in}} \quad (3.81)$$

$$q_{A,H_2O,in} = q_{A,tot,in} \frac{P_{A,H_2O,in}M_{H_2O}}{C_{A,in}} \quad (3.82)$$

$$C_{A,in} = x_{A,H_2,in}(P_{A,tot,in} - P_{A,H_2O,in})M_{H_2} + P_{A,H_2O,in}M_{H_2O} \quad (3.83)$$

$x_{A,H_2,in}$ representa la fracción molar del gas seco en la entrada del ánodo:

$$x_{A,H_2,in} = \begin{cases} 1 & \text{Hidrógeno puro} \\ \alpha_{hidrógeno} & \text{Gas reformado} \end{cases} \quad (3.84)$$

Los flujos másicos de oxígeno, nitrógeno y vapor en la salida de los canales del ánodo se obtienen del flujo másico total de salida total $q_{A,tot,out}$ ($\frac{kg}{s}$), masa molar de gases y presiones parciales de oxígeno, nitrógeno y agua en los canales:

$$q_{A,H_2,out} = q_{A,tot,out} \frac{P_{A,H_2,in}M_{H_2}}{C_{A,out}} \quad (3.85)$$

$$q_{A,H_2O,out} = q_{A,tot,out} \frac{P_{A,H_2O,in}M_{H_2O}}{C_{A,out}} \quad (3.86)$$

$$C_{A,out} = P_{A,H_2,ch}M_{H_2} + P_{A,H_2O,ch}M_{H_2O} \quad (3.87)$$

Los flujos máxicos de hidrógeno y vapor de agua a través de la GDL representados por q_{A,H_2} y q_{A,H_2O} , respectivamente, en los sitios catalíticos y la membrana dependen de la corriente demandada a la celda de combustible.

3.4. Modelo en el dominio térmico

Se presenta el modelo matemático, en el dominio térmico, de una celda de combustible de membrana de intercambio protónico (PEMFC). En la Figura 3.4 se muestra la interacción de las variables en las capas de la PEMFC que influyen en el sistema en el dominio térmico.

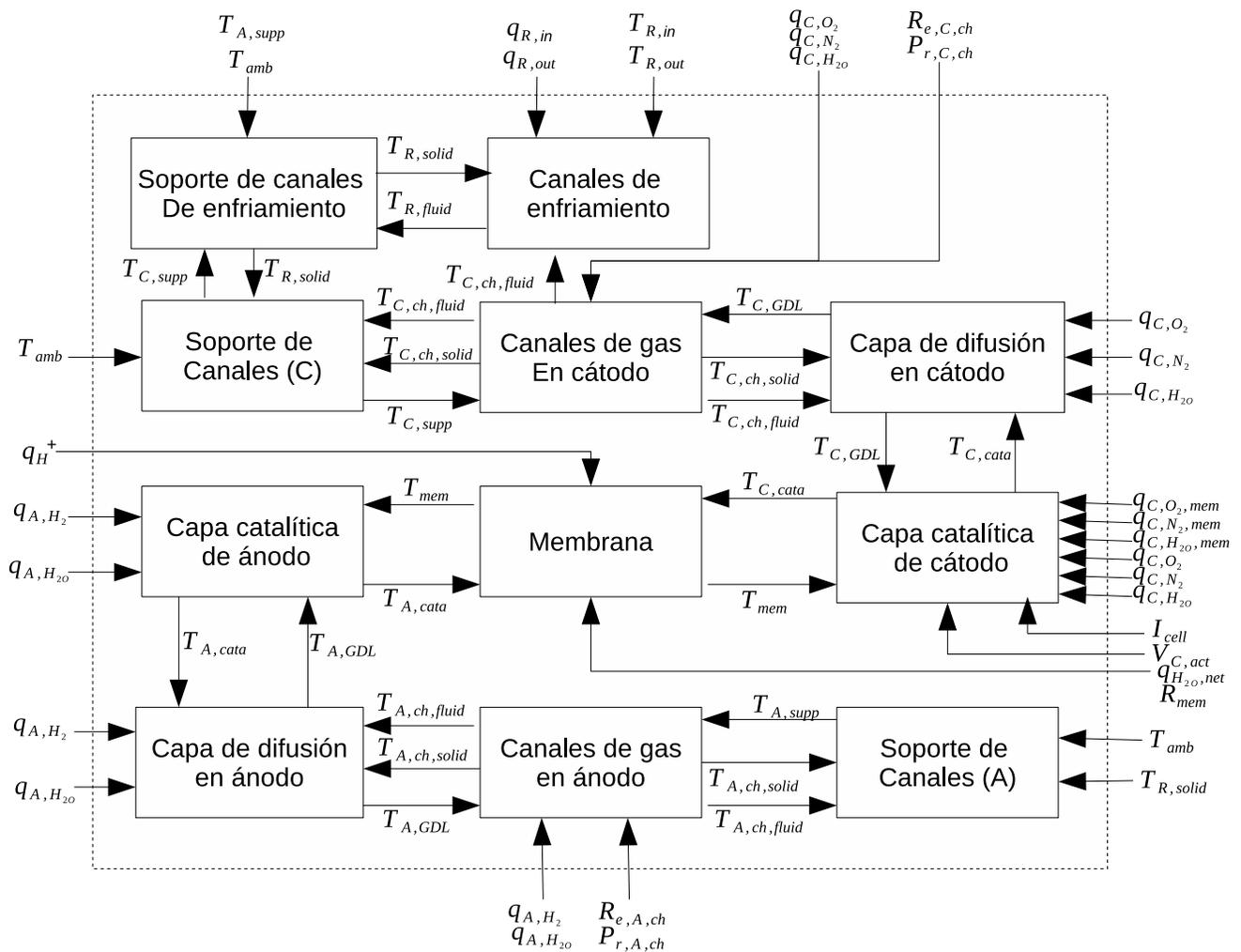


Figura 3.4: Diagrama de bloques de una PEMFC en modelo térmico.

Estados del modelo en dominio térmico

Las variables del modelo en dominio térmico que presentan una evolución en el tiempo, o variables dinámicas del sistema, están declaradas en el vector x_3 :

$$x_3 = \begin{bmatrix} T_{R,fluid} \\ T_{R,solid} \\ T_{C,supp} \\ T_{C,fluid} \\ T_{C,solid} \\ T_{C,GDL} \\ T_{C,cata} \\ T_{mem} \\ T_{A,cata} \\ T_{C,GDL} \\ T_{C,solid} \\ T_{C,fluid} \\ T_{C,supp} \end{bmatrix} \quad (3.88)$$

Los estados del sistema son considerados un control de volumen térmico. Las ecuaciones del modelo presentan un balance de energía expresado mediante flujos de calor. A continuación se presentan las ecuaciones del modelo, agrupadas de a cuerdo a la capa de la celda a la que pertenecen.

3.4.1. Modelo en dominio térmico - Canales de enfriamiento

Entradas del modelo de los canales enfriamiento

- $q_{R,in}$: Flujo másico que ingresa a los canales de enfriamiento ($\frac{kg}{s}$).
- $q_{R,out}$: Flujo másico que sale de los canales de enfriamiento ($\frac{kg}{s}$).
- T_{amb} : Temperatura ambiente (K).
- $T_{A,supp}$: Temperatura del soporte sólido del ánodo (K).
- $T_{C,supp}$: Temperatura del soporte sólido del cátodo (K).

Ecuaciones del modelo de los canales enfriamiento

El flujo de calor $Q_{R-A,supp}$ ($\frac{J}{s}$), procedente de la placa del ánodo a los canales se debe al intercambio de calor por convección forzada entre el fluido refrigerante y la placa del ánodo. De la ley de enfriamiento de Newton, este flujo se puede escribir como:

$$Q_{R-A,supp,fc} = h_{fc,R} A_{R,fluid} (T_{R-A,supp} - T_{R,fluid}) \quad (3.89)$$

3.4. Modelo en el dominio térmico

El flujo de calor procedente de la placa del cátodo se puede obtener así de la misma ley:

$$Q_{R-C,supp,fc} = h_{fc,R}A_{R,fluid}(T_{R-C,supp} - T_{R,fluid}) \quad (3.90)$$

El flujo de calor entre las superficies laterales de los canales y la parte sólida en la misma capa de enfriamiento se puede calcular mediante un balance de energía:

$$Q_{R,lateral} = h_{fc,R}A_{R,lateral}(T_{R,solid} - T_{R,fluid}) \quad (3.91)$$

Los flujos de calor asociados con el transporte convectivo del material que entra o sale del volumen de control:

$$Q_{R,in} = q_{R,in}C_{p,R,fluid}(T_{R,in} - T_{R,fluid}) \quad (3.92)$$

$$Q_{R,out} = q_{R,out}C_{p,R,fluid}(T_{R,out} - T_{R,fluid}) \quad (3.93)$$

Sí consideramos un intercambio de calor completo entre el fluido y el volumen de control:

$$T_{R,out} = T_{R,fluid} \quad (3.94)$$

La dinámica de la temperatura se puede obtener del balance de energía en los canales de refrigeración:

$$(\rho_{fluid}V_{R,ch}C_{p,R,fluid})\frac{dT_{R,fluid}}{dt} = Q_{R-A,supp,fc} + Q_{R-C,supp,fc} - Q_{R,lateral} + Q_{R,in} + Q_{R,out} \quad (3.95)$$

Los flujos de calor debidos a mecanismos de transporte por conducción se establecen a partir de la ley de Fourier:

$$Q_{R-A,supp,cd} = \frac{2\lambda_{plate}A_{R,solid}}{\delta_R}(T_{R-A,supp} - T_{R,solid}) \quad (3.96)$$

$$Q_{R-C,supp,cd} = \frac{2\lambda_{plate}A_{R,solid}}{\delta_R}(T_{R-C,supp} - T_{R,solid}) \quad (3.97)$$

Los flujos de calor debidos a los mecanismos de convección natural y radiación también deben sumarse. Según la ley de enfriamiento de Newton:

$$Q_{R,nc+rd} = h_{R,nc+rd}A_{R,ext}(T_{amb} - T_{R,solid}) \quad (3.98)$$

La dinámica de la temperatura se puede obtener así a partir del balance de energía aplicados en la parte sólida de la capa de enfriamiento:

$$(\rho_{plate}V_{R,solid}C_{p,plate})\frac{dT_{R,solid}}{dt} = Q_{R-A,supp,cd} + Q_{R-C,supp,cd} - Q_{R,lateral} + Q_{R,nc+rd} \quad (3.99)$$

Al considerar ambos volúmenes de control para establecer el transporte de energía térmica, los flujos de calor totales intercambiados con las capas adyacentes son los siguientes:

$$Q_{R-C,supp} = Q_{E-C,supp,fc} + Q_{R-C,supp,cd} \quad (3.100)$$

$$Q_{R-A,supp} = Q_{R-A,supp,fc} + Q_{R-A,supp,cd} \quad (3.101)$$

$T_{R-C,supp}$ es la temperatura en la superficie de contacto entre la capa de enfriamiento y el soporte sólido de los canales del cátodo. $T_{R-C,supp}$ es obtenido a partir de la Ecuación (3.108) y se escribe en la forma:

$$T_{R-C,supp} = \frac{2\lambda_{plate}A_{C,supp}\delta_R T_{C,supp} + 2\lambda_{plate}A_{R,solid}\delta_{C,supp}T_{R,solid} + h_{fc,R}A_{R,fluid}\delta_{C,supp}\delta_R T_{R,fluid}}{2\lambda_{plate}A_{C,supp}\delta_R + 2\lambda_{plate}A_{R,solid}\delta_{C,supp} + h_{fc,R}A_{R,fluid}\delta_{C,supp}\delta_R} \quad (3.102)$$

$T_{R-A,supp}$ es la temperatura en la superficie de contacto entre la capa de enfriamiento y el soporte sólido de los canales del ánodo. $T_{R-A,supp}$ es obtenido a partir de la Ecuación (3.197) y se expresa de la siguiente forma:

$$T_{R-A,supp} = \frac{2\lambda_{plate}A_{C,supp}\delta_R T_{A,supp} + 2\lambda_{plate}A_{R,solid}\delta_{A,supp}T_{R,solid} + h_{fc,R}A_{R,fluid}\delta_{A,supp}\delta_R T_{R,fluid}}{2\lambda_{plate}A_{A,supp}\delta_R + 2\lambda_{plate}A_{R,solid}\delta_{A,supp} + h_{fc,R}A_{R,fluid}\delta_{A,supp}\delta_R} \quad (3.103)$$

3.4.2. Modelo en dominio térmico - Soporte sólido de los canales en el cátodo

Entradas del modelo de soporte sólido de los canales en el cátodo

- $T_{C,ch,fluid}$: Temperatura del fluido en los canales de gas del ánodo (K).
- $T_{C,ch,solid}$: Temperatura de los canales del cátodo (K).
- $T_{R,solid}$: Temperatura de los canales de enfriamiento (K).

Ecuaciones del modelo de soporte sólido de los canales en el cátodo

Los flujos de calor debidos a la convección se escriben como:

$$Q_{C,supp-R} = \frac{2\lambda_{plate}A_{C,supp}}{\delta_{C,supp}}(T_{R-C,supp} - T_{C,supp}) \quad (3.104)$$

$$Q_{C,supp-C,ch} = \frac{2\lambda_{plate}A_{C,supp}}{\delta_{C,supp}}(T_{C,supp-C,ch} - T_{C,supp}) \quad (3.105)$$

El flujo de calor debido a la convección natural y la radiación se obtienen en función de la temperatura del soporte del canal del cátodo $T_{C,supp}$:

3.4. Modelo en el dominio térmico

$$Q_{C,supp.nc+rd} = h_{C,supp.nc+rd} A_{C,supp,ext} (T_{amb} - T_{C,supp}) \quad (3.106)$$

La dinámica de la temperatura se obtiene aplicando un balance de energía en el soporte sólido del canal del cátodo:

$$\rho_{plate} V_{C,supp} C_{p,plate} \frac{dT_{C,supp}}{dt} = Q_{C,supp-R} + Q_{C,supp-C,ch} + Q_{C,supp.nc+rd} \quad (3.107)$$

Asumiendo que la disipación de energía térmica al medio ambiente es despreciable y de acuerdo con el principio de conservación de energía, el flujo de calor proveniente de la capa de enfriamiento es igual al flujo de calor que ingresa al soporte sólido del cátodo por el mismo lado:

$$Q_{C,supp-R} + Q_{R-C,supp} = 0 \quad (3.108)$$

$T_{R-C,supp}$ es la temperatura en la superficie de contacto entre la capa del soporte sólido de los canales del cátodo y los canales del cátodo. $T_{R-C,supp}$ es obtenido a partir de la Ecuación (3.124) y se expresa de la siguiente forma:

$$T_{C,supp-C,ch} = \frac{2\lambda_{plate} A_{C,supp} \delta_{C,ch} T_{C,supp} + h_{fc,C,ch} A_{C,ch,fluid} \delta_{C,supp} T_{C,ch,fluid} + 2\lambda_{plate} A_{C,ch,solid} \delta_{C,supp} T_{C,ch,solid}}{2\lambda_{plate} A_{C,supp} \delta_{C,ch} + h_{fc,C,ch} A_{C,ch,fluid} \delta_{C,supp} + 2\lambda_{plate} A_{C,ch,solid} \delta_{C,supp}} \quad (3.109)$$

3.4.3. Modelo en dominio térmico - Canales de gas en el cátodo

Entradas del modelo de canales de gas en el cátodo

- $q_{C,N_2,ch}$: Flujo másico del nitrógeno en el canal del cátodo ($\frac{kg}{s}$).
- $q_{C,O_2,ch}$: Flujo másico del oxígeno en el canal del cátodo ($\frac{kg}{s}$).
- $q_{C,H_2O,ch}$: Flujo másico de agua en el canal del cátodo ($\frac{kg}{s}$).
- $T_{C,ch,in}$: Temperatura de entrada de los gases en los canales del cátodo (K).
- $T_{C,GDL}$: Temperatura de la capa de difusión del cátodo (K).
- $T_{C,supp}$: Temperatura del soporte sólido de los canales del cátodo (K).

Ecuaciones del modelo de canales de gas en el cátodo

Fluido en los canales del cátodo:

Los flujos de calor debidos a la convección forzada se escriben como:

$$Q_{C,ch-C,supp,fc} = h_{fc,C,ch} A_{C,ch,fluid} (T_{C,supp-C,ch} - T_{C,ch,fluid}) \quad (3.110)$$

$$Q_{C,ch-C,GDL,fc} = h_{fc,C,ch}A_{C,ch,fluid}(T_{C,ch-C,GDL} - T_{C,ch,fluid}) \quad (3.111)$$

$$Q_{C,ch,lateral} = h_{fc,C,ch}A_{C,ch,lateral}(T_{C,ch,solid} - T_{C,ch,fluid}) \quad (3.112)$$

Los flujos de calor debidos al transporte de masa por convección se escriben como:

$$Q_{C,ch,in} = q_{C,tot,in}C_{p,C,fluid}(T_{C,ch,in} - T_{C,ch,fluid}) \quad (3.113)$$

$$Q_{C,ch,out} = q_{C,tot,out}C_{p,C,fluid}(T_{C,ch,out} - T_{C,ch,fluid}) \quad (3.114)$$

El flujo de calor hacia la capa de difusión, debido al transporte de masa convectivo, se calcula mediante:

$$Q_{C,ch-C,GDL,mass} = \sum_i (-q_{C,i}C_{p,i})(T_{C,ch-C,GDL} - T_{C,ch,fluid}) \quad (3.115)$$

Donde $i \in \{O_2, N_2, H_2O\}$

Sí consideramos un intercambio de calor completo entre el fluido y el volumen de control:

$$T_{C,ch,out} = T_{C,ch,fluid} \quad (3.116)$$

La dinámica de la temperatura se obtiene aplicando un balance de energía en los canales del cátodo:

$$\begin{aligned} \rho_{C,ch,fluid}V_{C,ch}C_{p,C,fluid}\frac{dT_{C,fluid}}{dt} &= Q_{C,ch-C,supp,fc} + Q_{C,ch-C,GDL,fc} + Q_{C,ch,in} \\ &+ Q_{C,ch,out} + Q_{C,ch,lateral} + Q_{C,ch-C,GDL,mass} \end{aligned} \quad (3.117)$$

Parte sólida de los canales:

Los flujos de calor por conducción a través del volumen de control considerado se escriben como:

$$Q_{C,ch-C,supp,cd} = \frac{2\lambda_{plate}A_{C,ch,solid}}{\delta_{C,ch}}(T_{C,supp-C,ch} - T_{C,ch,solid}) \quad (3.118)$$

$$Q_{C,ch-C,GDL,cd} = \frac{2\lambda_{plate}A_{C,ch,solid}}{\delta_{C,ch}}(T_{C,ch-C,GDL} - T_{C,ch,solid}) \quad (3.119)$$

El flujo de calor por convección natural y por radiación en este volumen de control debe ser también considerado:

$$Q_{C,ch,nc+rd} = h_{C,ch,nc+rd}A_{C,ch,ext}(T_{amb} - T_{C,ch,solid}) \quad (3.120)$$

La dinámica de la temperatura se obtiene del balance de energía aplicado en la parte sólida de los canales del cátodo:

3.4. Modelo en el dominio térmico

$$\rho_{plate} V_{C,ch,solid} C_{p,plate} \frac{dT_{C,solid}}{dt} = Q_{C,ch-C,supp,cd} + Q_{C,ch-C,GDL,cd} + Q_{C,ch,nc+rd} - Q_{C,ch,lateral} \quad (3.121)$$

Al considerar ambos volúmenes de control (parte sólida y fluido en los canales del cátodo), los flujos de calor intercambiados con las capas adyacentes son los siguientes:

$$Q_{C,ch-C,supp} = Q_{C,ch-C,supp,fc} + Q_{C,ch-C,supp,cd} \quad (3.122)$$

$$Q_{C,ch-C,GDL} = Q_{C,ch-C,GDL,fc} + Q_{C,ch-C,GDL,cd} + Q_{C,ch-C,GDL,mass} \quad (3.123)$$

Por conservación de la energía:

$$Q_{C,ch-C,supp} + Q_{C,supp-C,ch} = 0 \quad (3.124)$$

$T_{C,ch-C,GDL}$ es la temperatura en la superficie de contacto entre la capa de los canales del cátodo y la capa de difusión en el cátodo. $T_{C,ch-C,GDL}$ es obtenido a partir de la Ecuación (3.134) y se expresa de la siguiente forma:

$$T_{C,ch-C,GDL} = \frac{2\lambda_{plate} A_{C,ch,solid} \delta_{GDL} T_{C,ch,solid} + \sum_i (-q_{C,i} C_{p,i}) \delta_{GDL} \delta_{C,ch} (T_{C,GDL} - T_{C,ch,fluid}) + h_{fc,c,ch} A_{C,ch,fluid} \delta_{GDL} \delta_{C,ch} T_{C,GDL} + 2\lambda_{GDL} A_{GDL} \delta_{C,ch} T_{C,GDL}}{2\lambda_{plate} A_{C,ch,solid} \delta_{GDL} + h_{fc,c,ch} A_{C,ch,fluid} \delta_{GDL} \delta_{C,ch} + 2\lambda_{GDL} A_{GDL} \delta_{C,ch}} \quad (3.125)$$

Donde $i \in \{O_2, N_2, H_2O\}$

3.4.4. Modelo en dominio térmico - Capa de difusión en el cátodo

Entradas del modelo de capa de difusión en el cátodo

- $q_{C,N_2,GDL}$: Flujo másico del nitrógeno en la capa de difusión del cátodo ($\frac{kg}{s}$).
- $q_{C,O_2,GDL}$: Flujo másico del oxígeno en la capa de difusión del cátodo ($\frac{kg}{s}$).
- $q_{C,H_2O,GDL}$: Flujo másico de agua en la capa de difusión del cátodo ($\frac{kg}{s}$).
- $T_{C,ch,fluid}$: Temperatura del fluido en los canales del cátodo (K).
- $T_{C,ch,solid}$: Temperatura de los canales en el cátodo (K).
- $T_{C,cata}$: Temperatura en la capa catalítica del cátodo (K).

Ecuaciones del modelo de capa de difusión en el cátodo

Los flujos de calor por conducción se escriben de acuerdo con la ley de Fourier:

$$Q_{C,GDL-C,ch,cd} = \frac{2\lambda_{GDL}A_{GDL}}{\delta_{GDL}}(T_{C,ch-C,GDL} - T_{C,GDL}) \quad (3.126)$$

$$Q_{C,GDL-C,cata,cd} = \frac{2\lambda_{GDL}A_{GDL}}{\delta_{GDL}}(T_{C,GDL-C,cata} - T_{C,GDL}) \quad (3.127)$$

Los flujos de calor debidos al transporte de masa por convección desde las capas adyacentes durante la operación de la celda de combustible se escriben como:

$$Q_{C,GDL-C,cata,mass} = \sum_i (-q_{C,i}C_{p,i})(T_{C,GDL-C,cataL} - T_{C,GDL}) \quad (3.128)$$

Donde $i \in \{O_2, N_2, H_2O\}$

$$Q_{C,GDL-C,ch,mass} = \sum_i (q_{C,i}C_{p,i})(T_{C,ch-C,GDL} - T_{C,GDL}) \quad (3.129)$$

Donde $i \in \{O_2, N_2, H_2O\}$

Los flujos de calor totales intercambiados con las capas adyacentes son los siguientes:

$$Q_{C,GDL-C,cata} = Q_{C,GDL-C,cata,cd} + Q_{C,GDL-C,cata,mass} \quad (3.130)$$

$$Q_{C,GDL-C,ch} = Q_{C,GDL-C,ch,cd} + Q_{C,GDL-C,ch,mass} \quad (3.131)$$

Por tanto, la dinámica de la temperatura se puede obtener del balance de energía en la capa de difusión del cátodo:

$$\left(\sum_{i=fluid,solid} \rho_i V_i C_{p,i} \right) \frac{dT_{C,GDL}}{dt} = Q_{C,GDL-C,cata} + Q_{C,GDL-C,ch} \quad (3.132)$$

Con:

$$\sum_{i=fluid,solid} \rho_i V_i C_{p,i} = (\rho_{C,fluid,GDL} V_{fluid,GDL} C_{p,fluid,GDL} + \rho_{C,solid,GDL} V_{solid,GDL} C_{p,solid,GDL}) \quad (3.133)$$

Por conservación de energía:

$$Q_{C,GDL-C,ch} + Q_{C,ch-C,GDL} = 0 \quad (3.134)$$

$T_{C,GDL-C,cata}$ es la temperatura en la superficie de contacto entre la capa de difusión y la capa catalítica del cátodo. $T_{C,GDL-C,cata}$ es obtenido a partir de la Ecuación (3.144) y se expresa como:

$$\begin{aligned}
 T_{C,GDL-C,cata} = & \frac{2\lambda_{GDL}A_{GDL}\delta_{cata}T_{C,GDL} + \sum_i (q_{C,i}C_{p,i})\delta_{GDL}\delta_{cata}T_{C,cata} \\
 & + \sum_i (-q_{C,i}C_{p,i})\delta_{GDL}\delta_{cata}T_{C,GDL} + 2\lambda_{cata}A_{cata}\delta_{GDL}T_{C,cata}}{2\lambda_{GDL}A_{GDL}\delta_{cata} + \sum_i (q_{C,i}C_{p,i})\delta_{GDL}\delta_{cata}} \\
 & + \sum_i (-q_{C,i}C_{p,i})\delta_{GDL}\delta_{cata} + 2\lambda_{cata}A_{cata}\delta_{GDL}
 \end{aligned} \tag{3.135}$$

Donde $i \in \{O_2, N_2, H_2O\}$

3.4.5. Modelo en dominio térmico - Capa catalítica en el cátodo

Entradas del modelo de capa catalítica en el cátodo

- I_{cell} : Corriente de carga en la celda de combustible (A).
- $q_{C,N_2,mem}$: Flujo másico del nitrógeno en la membrana de la celda ($\frac{kg}{s}$).
- $q_{C,O_2,mem}$: Flujo másico del oxígeno en la membrana de la celda ($\frac{kg}{s}$).
- $q_{C,H_2O,mem}$: Flujo másico de agua en la membrana de la celda ($\frac{kg}{s}$).
- q_{H^+} : Flujo de protones de hidrógeno en la membrana de la celda ($\frac{kg}{s}$).
- $T_{C,GDL}$: Temperatura en la capa de difusión del cátodo (K).
- T_{mem} : Temperatura en la membrana de la celda de combustible (K).
- $V_{C,act}$: Voltaje de activación en la capa catalítica del cátodo (V).

Ecuaciones del modelo de capa catalítica en el cátodo

Los flujos de calor por conducción se pueden escribir mediante la ley de Fourier:

$$Q_{C,cata-mem,cd} = \frac{2\lambda_{cata}A_{cata}}{\delta_{cata}}(T_{C,cata-C,mem} - T_{C,cata}) \tag{3.136}$$

$$Q_{C,cata-A,GDL,cd} = \frac{2\lambda_{cata}A_{cata}}{\delta_{cata}}(T_{C,GDL-C,cata} - T_{C,cata}) \tag{3.137}$$

Los flujos de calor debidos al transporte de masa por convección desde las capas adyacentes se pueden escribir como:

$$Q_{C,cata-mem,mass} = \left[\sum_i (q_{C,i,mem}C_{p,i}) \right] (T_{C,cata-mem} - T_{C,cata}) \tag{3.138}$$

Donde $i \in \{H^+, H_2O\}$

$$Q_{C,cata-C,GDL,mas} = \left[\sum_i q_{C,i} C_{p,i} \right] (T_{C,GDL-C,cata} - T_{C,cata}) \quad (3.139)$$

Donde $i \in \{O_2, N_2, H_2O\}$

Además, la fuente de calor interna se obtiene en términos del cambio de entropía:

$$Q_{C,cata,int} = -I_{cell} \frac{T_{C,cata} \Delta S}{2F} + I_{cell} V_{C,act} \quad (3.140)$$

Los flujos de calor totales intercambiados con las capas adyacentes son los siguientes:

$$Q_{C,cata-mem} = Q_{C,cata-mem,cd} + Q_{C,cata-mem,mas} \quad (3.141)$$

$$Q_{C,cata-C,GDL} = Q_{C,cata-C,GDL,cd} + Q_{C,cata-C,GDL,mas} \quad (3.142)$$

La dinámica de la temperatura se obtiene del balance de energía en los sitios del catalizador del cátodo:

$$\rho_{cata} V_{cata} C_{p,cata} \frac{dT_{C,cata}}{dt} = Q_{C,cata-mem} + Q_{C,cata-C,GDL} + Q_{C,cata,int} \quad (3.143)$$

Por conservación de energía:

$$Q_{C,cata-C,GDL} + Q_{C,GDL-C,cata} = 0 \quad (3.144)$$

$T_{C,cata-mem}$ es la temperatura en la superficie de contacto entre la capa catalítica del cátodo y la membrana. $T_{C,cata-mem}$ es obtenido a partir de la Ecuación (3.155) y se expresa como:

$$T_{C,cata-mem} = \frac{2\lambda_{cata} A_{cata} \delta_{mem} T_{C,cata} + 2\lambda_{mem} A_{mem} \delta_{cata} T_{mem} + \sum_i (q_i C_{p,i}) \delta_{mem} \delta_{cata} T_{C,cata} + \sum_i (-q_{C,ii,mem} C_{p,i}) \delta_{cata} \delta_{mem} T_{mem}}{2\lambda_{cata} A_{cata} \delta_{mem} + 2\lambda_{mem} A_{mem} \delta_{cata} + \sum_i (q_i C_{p,i}) \delta_{mem} \delta_{cata} + \sum_i (-q_{C,ii,mem} C_{p,i}) \delta_{cata} \delta_{mem}} \quad (3.145)$$

Donde $i \in \{H^+, (H_2O, net)\}$, $ii \in \{H^+, H_2O\}$

3.4.6. Modelo en dominio térmico - Membrana

Entradas del modelo de la membrana

- I_{cell} : Corriente de carga en la celda de combustible (A).

3.4. Modelo en el dominio térmico

- q_{H^+} : Flujo de protones de hidrógeno ($\frac{kg}{s}$).
- $q_{H_2O,net}$: Flujo másico de agua en la membrana ($\frac{kg}{s}$).
- R_{mem} : Resistencia de la membrana (Ω).
- $T_{A,cata}$: Temperatura en la capa catalítica del ánodo (K).
- $T_{C,cata}$: Temperatura en la capa catalítica del cátodo (K).

Ecuaciones del modelo de la membrana

Los flujos de calor por conducción se escriben de acuerdo con la ley de Fourier:

$$Q_{mem-C,cata,cd} = \frac{2\lambda_{mem}A_{mem}}{\delta_{mem}}(T_{C,cata-mem} - T_{mem}) \quad (3.146)$$

$$Q_{mem-C,cata,cd} = \frac{2\lambda_{mem}A_{mem}}{\delta_{mem}}(T_{mem-A,cata} - T_{mem}) \quad (3.147)$$

Los flujos de calor debidos al transporte de masa por convección desde las capas adyacentes durante la operación de la celda de combustible se escriben como:

$$Q_{mem-C,cata,mass} = (q_{H^+}C_{p,H^+} + q_{H_2O,net}C_{p,H_2O})(T_{C,cata-mem} - T_{mem}) \quad (3.148)$$

$$Q_{mem-A,cata,mass} = (q_{H^+}C_{p,H^+} + q_{H_2O,net}C_{p,H_2O})(T_{mem-A,cata} - T_{mem}) \quad (3.149)$$

Además, el calor disipado en la membrana debido al efecto Joule se obtiene a partir de la ley de Joule en términos de la resistencia de la membrana:

$$Q_{mem,int} = I_{cell}^2 R_{mem} \quad (3.150)$$

El intercambio de calor total entre la membrana y las capas adyacentes obedece las relaciones:

$$Q_{mem-C,cata} = Q_{mem-C,cata,cd} + Q_{mem-C,cata,mass} \quad (3.151)$$

$$Q_{mem-A,cata} = Q_{mem-A,cata,cd} + Q_{mem-A,cata,mass} \quad (3.152)$$

La dinámica de la temperatura se puede obtener del balance de energía de la membrana:

$$\left(\sum_{i=fluid,mem} \rho_i V_i C_{p,i} \right) \frac{dT_{mem}}{dt} = Q_{mem-C,cata} + Q_{mem-A,cata} + Q_{mem,int} \quad (3.153)$$

$$\sum_{i=fluid,mem} \rho_i V_i C_{p,i} = (\rho_{fluid} V_{fluid} C_{p,fluid} + \rho_{mem} V_{mem} C_{p,mem}) \quad (3.154)$$

Por conservación de energía:

$$Q_{mem-C,cata} + Q_{C,cata-mem} = 0 \quad (3.155)$$

$T_{mem-A,cata}$ es la temperatura en la superficie de contacto entre la membrana y la capa catalítica del ánodo. $T_{mem-A,cata}$ es obtenido a partir de la Ecuación (3.164) y se expresa como:

$$T_{mem-A,cata} = \frac{2\lambda_{mem}A_{mem}\delta_{cata}T_{mem} + 2\lambda_{cata}A_{cata}\delta_{mem}T_{A,cata} + \sum_i (q_{A,i}C_{p,i})\delta_{cata}\delta_{mem}T_{mem} + (q_{A,H^+}C_{p,H^+} - q_{A,H_2O}C_{p,H_2O})\delta_{cata}\delta_{mem}T_{A,cata}}{2\lambda_{mem}A_{mem}\delta_{cata} + 2\lambda_{cata}A_{cata}\delta_{mem} + \sum_i (q_{A,i}C_{p,i})\delta_{cata}\delta_{mem} + (q_{A,H^+}C_{p,H^+} - q_{A,H_2O}C_{p,H_2O})\delta_{cata}\delta_{mem}} \quad (3.156)$$

Donde $i \in \{H^+, (H_2O, net)\}$

3.4.7. Modelo en dominio térmico - Capa catalítica en el ánodo

Entradas del modelo de capa catalítica en el ánodo

- q_{A,H^+} : Flujo másico de protones de hidrógeno ($\frac{kg}{s}$).
- q_{A,H_2O} : Flujo másico de agua en el ánodo ($\frac{kg}{s}$).
- $T_{A,GDL}$: Temperatura en la capa de difusión del ánodo (K).
- T_{mem} : Temperatura en la membrana de la celda de combustible (K).

Ecuaciones del modelo de capa catalítica en el ánodo

Los flujos de calor debidos a la conducción se escriben mediante la ley de Fourier:

$$Q_{A,cata-mem,cd} = \frac{2\lambda_{cata}A_{cata}}{\delta_{cata}}(T_{mem-A,cata} - T_{A,cata}) \quad (3.157)$$

$$Q_{A,cata-A,GDL,cd} = \frac{2\lambda_{cata}A_{cata}}{\delta_{cata}}(T_{A,cata-A,GDL} - T_{A,cata}) \quad (3.158)$$

Los flujos de calor debidos al transporte de masa por convección desde las capas adyacentes se escriben como:

$$Q_{A,cata-mem,mass} = [q_{A,H^+}C_{p,H^+} + (-q_{A,H_2O}C_{p,H_2O})](T_{mem-A,cata} - T_{A,cata}) \quad (3.159)$$

$$Q_{A,cata-A,GDL,mass} = \left(\sum_i q_{A,i}C_{p,i} \right) (T_{A,cata-A,GDL} - T_{A,cata}) \quad (3.160)$$

3.4. Modelo en el dominio térmico

Donde $i \in \{H_2, H_2O\}$

La dinámica de la temperatura se obtiene del balance de energía en los sitios del catalizador en el ánodo:

$$\rho_{cata} V_{cata} C_{p,cata} \frac{dT_{A,cata}}{dt} = Q_{A,cata-mem,cd} + Q_{A,cata-A,cata,cd} + Q_{A,cata-mem,mass} + Q_{A,cata-A,cata,mass} \quad (3.161)$$

Los flujos de calor totales intercambiados con las capas adyacentes son los siguientes:

$$Q_{A,cata-mem} = Q_{A,cata-mem,cd} + Q_{A,cata-mem,mass} \quad (3.162)$$

$$Q_{A,cata-A,cata} = Q_{A,cata-A,cata,cd} + Q_{A,cata-A,cata,mass} \quad (3.163)$$

Por conservación de energía:

$$Q_{A,cata-mem} + Q_{mem-A,cata} = 0 \quad (3.164)$$

$T_{A,cata-A,GDL}$ es la temperatura en la superficie de contacto entre la capa catalítica del ánodo y la capa de difusión del ánodo. $T_{A,cata-A,GDL}$ es obtenido a partir de la Ecuación (3.174) y se expresa como:

$$T_{A,cata-A,GDL} = \frac{2\lambda_{GDL}A_{GDL}\delta_{cata}T_{A,GDL} + 2\lambda_{cata}A_{cata}\delta_{GDL}T_{A,cata} + \sum_i (q_{A,i}C_{p,i})\delta_{cata}\delta_{GDL}T_{A,cata} + \sum_i (-q_{A,i}C_{p,i})\delta_{cata}\delta_{GDL}T_{A,GDL}}{2\lambda_{GDL}A_{GDL}\delta_{cata} + 2\lambda_{cata}A_{cata}\delta_{GDL} + \sum_i (q_{A,i}C_{p,i})\delta_{cata}\delta_{GDL} + \sum_i (-q_{A,i}C_{p,i})\delta_{cata}\delta_{GDL}} \quad (3.165)$$

Donde $i \in \{H_2, H_2O\}$

3.4.8. Modelo en dominio térmico - Capa de difusión en el ánodo

Entradas del modelo de capa de difusión en el cátodo

- q_{A,H_2} : Flujo másico de hidrógeno en el ánodo ($\frac{kg}{s}$).
- q_{A,H_2O} : Flujo másico de agua en el ánodo ($\frac{kg}{s}$).
- $T_{A,cata}$: Temperatura en la capa catalítica del ánodo (K).
- $T_{A,ch,fluid}$: Temperatura en el fluido de los canales del ánodo (K).
- $T_{A,ch,solid}$: Temperatura en los canales del ánodo (K).

Ecuaciones del modelo de capa de difusión en el cátodo

Los flujos de calor por conducción se escriben de acuerdo con la ley de Fourier:

$$Q_{A,GDL-A,cata,cd} = \frac{2\lambda_{GDL}A_{GDL}}{\delta_{GDL}}(T_{A,cata-A,GDL} - T_{A,GDL}) \quad (3.166)$$

$$Q_{A,GDL-A,ch,cd} = \frac{2\lambda_{GDL}A_{GDL}}{\delta_{GDL}}(T_{A,GDL-A,ch} - T_{A,GDL}) \quad (3.167)$$

Los flujos de calor debidos al transporte de masa por convección desde las capas adyacentes se escriben como:

$$Q_{A,GDL-A,cata,mass} = \sum_i (-q_{A,i}C_{p,i})(T_{A,cata-A,GDL} - T_{A,GDL}) \quad (3.168)$$

Donde $i \in \{H_2, H_2O\}$

$$Q_{A,GDL-A,ch,mass} = \sum_i (q_{A,i}C_{p,i})(T_{A,GDL-A,ch} - T_{A,GDL}) \quad (3.169)$$

Donde $i \in \{H_2, H_2O\}$

El intercambio de calor entre la GDL y las capas obedece las siguientes relaciones:

$$Q_{A,GDL-A,cata} = Q_{A,GDL-A,cata,cd} + Q_{A,GDL-A,cata,mass} \quad (3.170)$$

$$Q_{A,GDL-A,ch} = Q_{A,GDL-A,ch,cd} + Q_{A,GDL-A,ch,mass} \quad (3.171)$$

La dinámica de la temperatura se obtiene a partir del balance de energía en la capa de difusión del ánodo:

$$\left(\sum_{i=fluid,solid} \rho_i V_i C_{p,i} \right) \frac{dT_{A,GDL}}{dt} = Q_{A,GDL-A,cata} + Q_{A,GDL-A,ch} \quad (3.172)$$

Con:

$$\sum_{i=fluid,solid} \rho_i V_i C_{p,i} = (\rho_{A,fluid,GDL} V_{fluid,GDL} C_{p,fluid,GDL} + \rho_{A,solid,GDL} V_{solid,GDL} C_{p,solid,GDL}) \quad (3.173)$$

Por conservación de energía:

$$Q_{A,GDL-A,cata} + Q_{A,cata-A,GDL} = 0 \quad (3.174)$$

$T_{A,GDL-A,ch}$ es la temperatura en la superficie de contacto entre la capa de difusión del ánodo y los canales del ánodo. $T_{A,GDL-A,ch}$ es obtenido a partir de la Ecuación (3.190):

$$T_{A,GDL-A,ch} = \frac{2\lambda_{plate}A_{A,ch,solid}\delta_{GDL}T_{A,ch,solid} + \sum_i(q_{A,i}C_{p,i})\delta_{A,ch}\delta_{GDL}(T_{A,GDL} - T_{A,ch,fluid}) + h_{fc,A,ch}A_{A,ch,fluid}\delta_{A,ch}\delta_{GDL}T_{A,ch,fluid} + 2\lambda_{GDL}A_{GDL}\delta_{A,ch}T_{A,GDL}}{2\lambda_{plate}A_{A,ch,solid}\delta_{GDL}f_{c,A,ch}A_{A,ch,fluid}\delta_{A,ch}\delta_{GDL} + 2\lambda_{GDL}A_{GDL}\delta_{A,ch}} \quad (3.175)$$

Donde $i \in \{H_2, H_2O\}$

3.4.9. Modelo en dominio térmico - Canales de gas en el ánodo

Entradas del modelo de canales de gas en el ánodo

- q_{A,H_2} : Flujo másico de hidrógeno en el ánodo ($\frac{kg}{s}$).
- q_{A,H_2O} : Flujo másico de agua en el ánodo ($\frac{kg}{s}$).
- T_{amb} : Temperatura ambiente (K).
- $T_{A,ch,in}$: Temperatura de entrada del fluido en los canales del ánodo (K).
- $T_{A,GDL}$: Temperatura en la capa de difusión del ánodo (K).
- $T_{A,supp}$: Temperatura en el soporte sólido del ánodo (K).

Ecuaciones del modelo de canales de gas en el ánodo

Fluido en los canales del ánodo:

El calor por convección forzada se escribe como:

$$Q_{A,ch-A,GDL,fc} = h_{fc,A,ch}A_{A,ch,fluid}(T_{A,GDL-A,ch} - T_{A,ch,fluid}) \quad (3.176)$$

$$Q_{A,ch-A,supp,fc} = h_{fc,A,ch}A_{A,ch,fluid}(T_{A,ch-A,supp} - T_{A,ch,fluid}) \quad (3.177)$$

$$Q_{A,ch,lateral} = h_{fc,A,ch}A_{A,ch,lateral}(T_{A,ch,solid} - T_{A,ch,fluid}) \quad (3.178)$$

El transporte de calor debido al flujo de materia por convección se calcula como:

$$Q_{A,ch,in} = q_{A,tot,in}C_{p,A,fluid}(T_{A,ch,in} - T_{A,ch,fluid}) \quad (3.179)$$

$$Q_{A,ch,out} = q_{A,tot,out}C_{p,A,fluid}(T_{A,ch,out} - T_{A,ch,fluid}) \quad (3.180)$$

$$Q_{A,ch-A,GDL,mass} = \sum_i(-q_{A,i}C_{p,i})(T_{A,GDL-A,ch} - T_{A,ch,fluid}) \quad (3.181)$$

Donde $i \in \{H_2, H_2O\}$

Sí consideramos un intercambio de calor completo entre el fluido y los canales en el volumen de control:

$$T_{A,ch,out} = T_{A,ch,fluid} \quad (3.182)$$

La dinámica de la temperatura se obtiene aplicando un balance de energía en los canales del ánodo:

$$\begin{aligned} \rho_{A,ch,fluid} V_{A,ch} C_{p,A,fluid} \frac{dT_{A,fluid}}{dt} = & Q_{A,ch-A,GDL,fc} + Q_{A,ch-A,supp,fc} + Q_{A,ch,in} \\ & + Q_{A,ch,out} + Q_{A,ch-A,GDL,mass} + Q_{A,ch,lateral} \end{aligned} \quad (3.183)$$

Parte sólida de los canales en el ánodo

El calor debido a la conducción se escribe como:

$$Q_{A,ch-A,GDL,cd} = \frac{2\lambda_{plate} A_{A,ch,solid}}{\delta_{A,ch}} (T_{A,GDL-A,ch} - T_{A,ch,solid}) \quad (3.184)$$

$$Q_{A,ch-A,supp,cd} = \frac{2\lambda_{plate} A_{A,ch,solid}}{\delta_{A,ch}} (T_{A,ch-A,supp} - T_{A,ch,solid}) \quad (3.185)$$

El flujo de calor debido a la convección natural y la radiación en la superficie externa se obtiene mediante:

$$Q_{A,ch,nc+rd} = h_{A,ch,nc+rd} A_{A,ch,ext} (T_{amb} - T_{A,ch,solid}) \quad (3.186)$$

Por tanto, la dinámica de la temperatura se obtiene a partir del balance de energía en la parte sólida de la capa de los canales del cátodo:

$$\rho_{plate} V_{A,ch,solid} C_{p,plate} \frac{dT_{A,solid}}{dt} = Q_{A,ch-A,supp,cd} + Q_{A,ch-A,GDL,cd} + Q_{A,ch,nc+rd} - Q_{A,ch,lateral} \quad (3.187)$$

Al considerar ambos volúmenes de control (parte sólida y fluido en los canales del ánodo), el intercambio de calor con las capas adyacentes se determina como sigue:

$$Q_{A,ch-A,GDL} = Q_{A,ch-A,GDL,fc} + Q_{A,ch-A,GDL,cd} + Q_{A,ch-A,GDL,mass} \quad (3.188)$$

$$Q_{A,ch-A,supp} = Q_{A,ch-A,supp,fc} + Q_{A,ch-A,supp,cd} \quad (3.189)$$

Por conservación de energía:

$$Q_{A,ch-A,GDL} + Q_{A,GDL-A,ch} = 0 \quad (3.190)$$

3.4. Modelo en el dominio térmico

$T_{A,ch-A,supp}$ es la temperatura en la superficie de contacto entre la capa de los canales del ánodo y el soporte sólido de los canales del ánodo. $T_{A,ch-A,supp}$ es obtenido a partir de la Ecuación (3.196) y se expresa como sigue:

$$T_{A,ch-A,supp} = \frac{2\lambda_{plate}A_{A,supp}\delta_{A,ch}T_{A,supp} + h_{fc,A,ch}A_{A,ch,fluid}\delta_{A,supp}T_{A,ch,fluid} + 2\lambda_{plate}A_{A,ch,solid}\delta_{A,supp}T_{A,ch,solid}}{2\lambda_{plate}A_{A,supp}\delta_{A,ch} + h_{fc,A,ch}A_{A,ch,fluid}\delta_{A,supp} + 2\lambda_{plate}A_{A,ch,solid}\delta_{A,supp}} \quad (3.191)$$

3.4.10. Modelo en dominio térmico - Soporte sólido de los canales del ánodo

El calor por conducción se determina de la siguiente forma:

Entradas del modelo de soporte sólido de los canales del ánodo

- T_{amb} : Temperatura ambiente (K).
- $T_{A,ch,fluid}$: Temperatura en el fluido de los canales del ánodo (K).
- $T_{A,ch,solid}$: Temperatura en los canales del ánodo (K).
- $T_{R,solid}$: Temperatura en los canales de enfriamiento (K).

Ecuaciones del modelo de soporte sólido de los canales del ánodo

$$Q_{A,supp-A,ch} = \frac{2\lambda_{plate}A_{A,supp}}{\delta_{A,supp}}(T_{A,ch-A,supp} - T_{A,supp}) \quad (3.192)$$

$$Q_{A,supp-R} = \frac{2\lambda_{plate}A_{A,supp}}{\delta_{A,supp}}(T_{A,supp-R} - T_{A,supp}) \quad (3.193)$$

Los flujos de calor debidos a la convección natural y la radiación se pueden obtener de:

$$Q_{A,supp,nc+rd} = h_{A,supp,nc+rd}A_{A,supp,ext}(T_{amb} - T_{A,supp}) \quad (3.194)$$

La dinámica de la temperatura se obtiene a partir del balance de energía aplicado en el soporte sólido de los canales del ánodo:

$$\rho_{plate}V_{A,supp}C_{p,plate}\frac{dT_{A,supp}}{dt} = Q_{A,supp-A,ch} + Q_{A,supp-R} + Q_{A,supp,nc+rd} \quad (3.195)$$

Admitiendo la conservación de energía, se cumple que:

$$Q_{A,supp-A,ch} + Q_{A,ch-A,supp} = 0 \quad (3.196)$$

$$Q_{R-A,supp} + Q_{A,supp-R} = 0 \quad (3.197)$$

CAPÍTULO 3. MODELO DINÁMICO DE CELDA DE COMBUSTIBLE TIPO PEM

En la Tabla 3.2 se muestran los valores de constantes físicas y parámetros del modelo de la celda de combustible.

Tabla 3.2: **Parámetros del modelo de celda de combustible [1, 3, 4].**

Simbolo	Descripción	Valor
R	Constante de gases ideales	$8,314 \frac{J}{molK}$
F	Constante de Faraday	$96485 \frac{C}{mol}$
E_{O_2}	Energía de activación de oxígeno en platino	$66000 \frac{J}{mol}$
β	Factor de presión	1.9
n	Electrones intercambiados en la reacción electroquímica.	2
$V_{C,ch}$	Volumen de los canales del cátodo	$5,319287088 \times 10^{-3} m^3$
δ_{GDL}	Grosor de la capa de difusión de gases	$4 \times 10^{-4} m$
M_{O_2}	Masa molar del oxígeno	$32 \times 10^{-3} \left(\frac{kg}{mol}\right)$
M_{N_2}	Masa molar del nitrógeno	$28 \times 10^{-3} \left(\frac{kg}{mol}\right)$
M_{H_2O}	Masa molar del agua	$18 \times 10^{-3} \left(\frac{kg}{mol}\right)$
C_{p,O_2}	Capacidad térmica del oxígeno	$922 \left(\frac{J}{kgK}\right)$
C_{p,N_2}	Capacidad térmica del nitrógeno	$1040 \left(\frac{J}{kgK}\right)$
C_{p,H_2O}	Capacidad térmica del agua	$2186 \left(\frac{J}{kgK}\right)$
A_{mem}	Área de la capa de la membrana	$1,4758 \times 10^{-2} m^2$
η_{sat}	Coefficiente electro-osmótico a máxima hidratación.	2.5
M_{H_2O}	Masa molar del agua	$0,018 \frac{kg}{mol}$
$\rho_{dry,mem}$	Densidad de membrana seca	$1970 \left(\frac{kg}{m^3}\right)$
M_{mem}	Masa equivalente de la membrana	$1 \frac{kg}{mol}$
$V_{A,ch}$	Volumen de los canales del ánodo	$1,4758 \times 10^{-3} m^3$
M_{H_2}	Masa molar del hidrógeno	$2 \times 10^{-3} \frac{kg}{mol}$

3.5. Validación del modelo en dominio eléctrico

El modelo multifísico de celda de combustible, descrito anteriormente, debe ser simulado para demostrar que el conjunto de ecuaciones es capaz de representar el comportamiento de una celda tipo PEM. Esta validación se realiza comparando la respuesta del modelo simulado con datos reportados en la literatura científica que han sido obtenidos experimentalmente.

Los datos más relevantes con los que es posible comparar el modelo multifísico son correspondientes a la respuesta eléctrica. Entre estos se destacan las curvas de polarización Corriente (A) - Voltaje (V), que proporcionan información general sobre el desempeño de la celda de combustible en estado estable y bajo condiciones de operación constantes. A continuación se presenta la validación del modelo en dominio eléctrico considerando tres sistemas correspondientes a celdas de combustible tipo PEM de diferentes potencias.

3.5.1. Validación de modelo eléctrico para una monocelda tipo PEM

El modelo en dominio eléctrico es parametrizado para representar el desempeño de una monocelda Nexa con membrana de Nafion 117. Los parámetros de esta celda se muestran en la Tabla 3.3. Estos datos son correspondientes a una celda que conforma el apilamiento Ballard Nexa de 1.2 kW. Las condiciones de operación consideradas para llevar a cabo la simulación están dadas en la Tabla 3.4. Como resultado, se obtuvo una curva de polarización Densidad de corriente ($\frac{A}{cm^2}$) - Voltaje (V) que se comparó con datos experimentales reportados por Ronald F. et al. [5], obtenidas bajo las mismas condiciones de operación.

En la Figura 3.5 se muestra la comparación entre el desempeño experimental de la PEMFC [5] y la curva de polarización obtenida por simulación del modelo en dominio eléctrico, descrito en la sección 3.2 del presente trabajo. Como resultado se obtuvo un ajuste correcto entre la predicción del modelo eléctrico y los datos experimentales.

Tabla 3.3: **Parámetros de celda de combustible Nexa con membrana Nafion 117 [1, 5].**

Símbolo	Descripción	Valor
η_{sat}	Coefficiente electro-osmótico a máxima hidratación.	2.5
A_{layer}	Área de la capa	$1,4758 \times 10^{-2} m^2$
C_{dl}	Capacidad de doble capa	$150 \frac{F}{m^2}$
α	Factor de simetría	0.5
$\rho_{dry,mem}$	Densidad de membrana seca	$1970 (\frac{kg}{m^3})$
M_{mem}	Masa equivalente de la membrana	$1 \frac{kg}{mol}$

Tabla 3.4: Condiciones de operación para la simulación del modelo eléctrico [1, 5].

Parámetros de simulación	Valor
Presión parcial del oxígeno en cátodo	63834.75 (Pa)
Presión parcial del hidrógeno en el ánodo	303975 (Pa)
Contenido de agua en el cátodo	14
Contenido de agua en el ánodo	10
Voltaje de corrección (V_{corr})	0.15 (V)
Temperatura de la celda	70 (C)

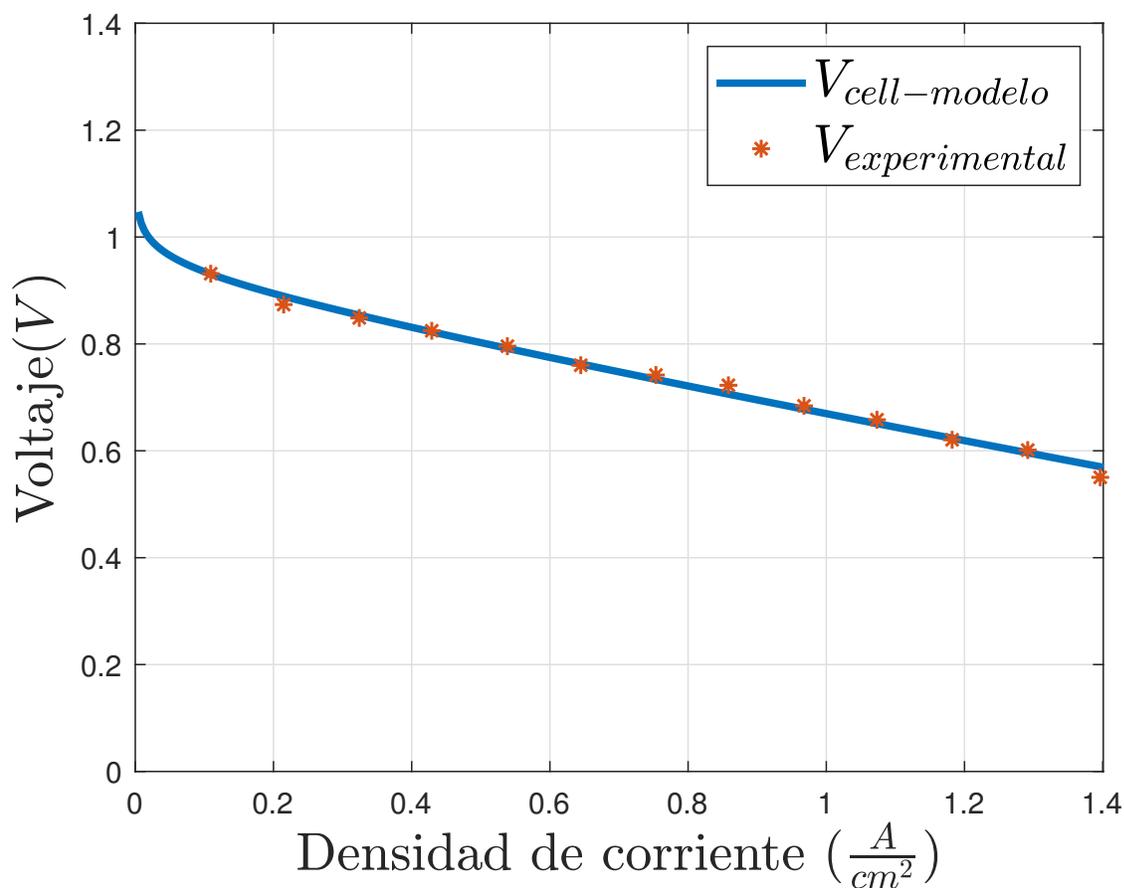


Figura 3.5: Curvas de polarización Densidad de corriente-Voltaje a 70°C.

3.5.2. Validación de modelo eléctrico para apilamiento Nexa de 1.2 kW

Ballard Nexa 1.2-kW es un módulo de PEMFC con un apilamiento de 47 celdas de combustible con membrana polimérica de intercambio de protones Nafion 117 [1, 3]. Para obtener el comportamiento eléctrico, primero se llevó a cabo la simulación de una monocelda usando los parámetros de la Tabla 3.3. Después, la respuesta eléctrica del apilamiento se obtuvo multiplicando el voltaje de salida de la monocelda V_{cell} por el número de celdas que conforman el apilamiento $N_{cell} = 47$.

$$V_{stack} = V_{cell} \times N_{cell} \quad (3.198)$$

Para validar el modelo se consideran las condiciones de temperatura y presión de los gases reactantes en la celda que reportó Soltani [3]. Se realizó la simulación considerando que se alimenta aire como oxidante, por lo tanto, con una composición de oxígeno en el aire de alimentación del cátodo de aproximadamente 21 %.

Se consideró que la cantidad de agua en el cátodo y ánodo es congruente con los rangos que presenta Gao en sus pruebas experimentales. La cantidad de agua afecta mayormente a cargas elevadas. Se asumió un aproximado de la cantidad de agua que se tendría a 50 A. El voltaje de corrección se propuso de tal forma que la curva resultante se ajustara a la respuesta experimental.

La Figura 3.6 muestra una correcta aproximación entre las curvas de polarización experimentales de Soltani [3] y las curvas de polarización obtenidas con el modelo eléctrico descrito en la sección 3.2, . Estas curvas exponen la relación Corriente (A) - Voltaje (V) del apilamiento de celdas de combustible Nexa de 1.2 kW de 47 celdas a temperatura constante.

En la Figura 3.7 se muestra la comparación de la respuesta del modelo en dominio eléctrico del módulo Ballard Nexa de 1.2 kW a diferentes temperaturas.

Tabla 3.5: Valores de parámetros para la simulación del modelo eléctrico.

Parámetros de simulación	Valor
Presión parcial del oxígeno en cátodo	15000 (Pa)
Presión parcial del hidrógeno en el ánodo	34500 (Pa)
Contenido de agua en el cátodo	6.5
Contenido de agua en el ánodo	4
Voltaje de corrección (V_{corr})	0.15 (V)

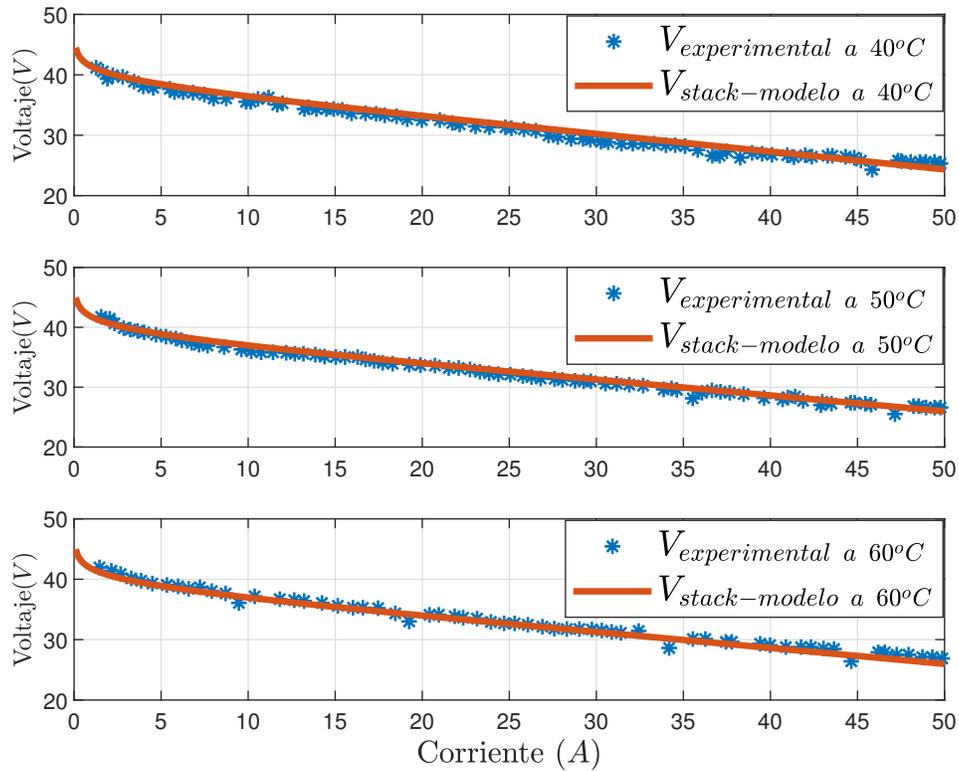


Figura 3.6: Curvas de polarización Corriente-Voltaje a temperatura constante.

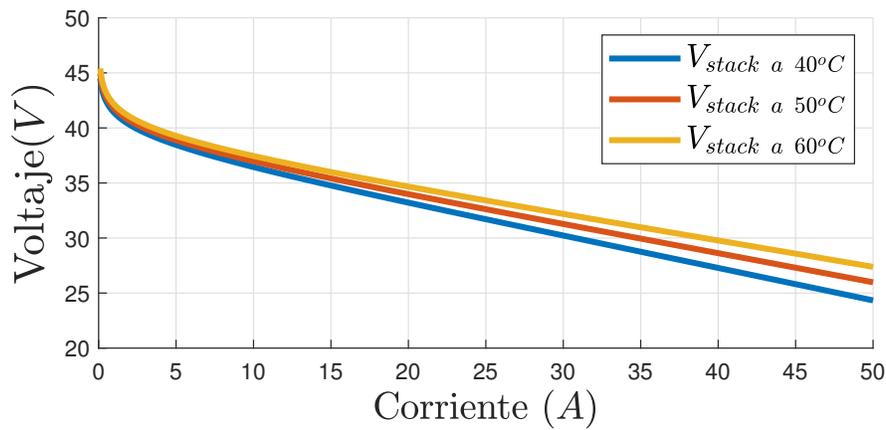


Figura 3.7: Curvas de polarización Corriente-Voltaje a temperatura constante.

3.5.3. Validación de modelo eléctrico para apilamiento Ballard Mark V de 5 kW

En una tercera etapa, el modelo eléctrico se validó con datos de un apilamiento de celdas de combustible de 5 kW de potencia. En la Tabla 3.6 se proporcionan los parámetros del modelo que caracterizan a un sistema experimental Ballard Mark V. La respuesta eléctrica del apilamiento se obtiene multiplicando la respuesta eléctrica de una monocelda por el número de celdas, que en este caso son 35 [6].

Tabla 3.6: Parámetros de una celda de combustible Ballard Mark V de 5 kW [6].

Símbolo	Descripción	Valor
η_{sat}	Coefficiente electro-osmótico a máxima hidratación.	2.5
A_{layer}	Área de la capa	$2,32 \times 10^{-2} m^2$
C_{dl}	Capacidad de doble capa	$150 \frac{F}{m^2}$
α	Factor de simetría	0.5
$\rho_{dry,mem}$	Densidad de membrana seca	$2000 (\frac{kg}{m^3})$
M_{mem}	Masa equivalente de la membrana	$1,1 \frac{kg}{mol}$

Validación del modelo eléctrico dimensionado a 5 kW en estado estable

Se obtuvo la curva de polarización del apilamiento Ballard Mark V en las condiciones de operación que se muestran en la Tabla 3.7. En la Figura 3.8 se comparan las curvas de polarización Corriente (A) - Voltaje (V) del modelo multifísico en dominio eléctrico, presentado en este documento, y el modelo presentado por Lee et al. [6].

En la Figura 3.9 se muestran las curvas de polarización para los casos de alimentación de aire y de oxígeno puro.

En las Figuras 3.10 y 3.11 se muestran las curvas de polarización obtenidas con el modelo eléctrico a diferentes temperaturas y presiones.

Tabla 3.7: Condiciones de operación del sistema Ballard Mark V [6].

Parámetros de simulación	Valor
Presión parcial del oxígeno en cátodo	63834.75 (Pa)
Presión parcial del hidrógeno en el ánodo	303975 (Pa)
Contenido de agua en el cátodo	6.5
Contenido de agua en el ánodo	6
Voltaje de corrección (V_{corr})	0.15 (V)

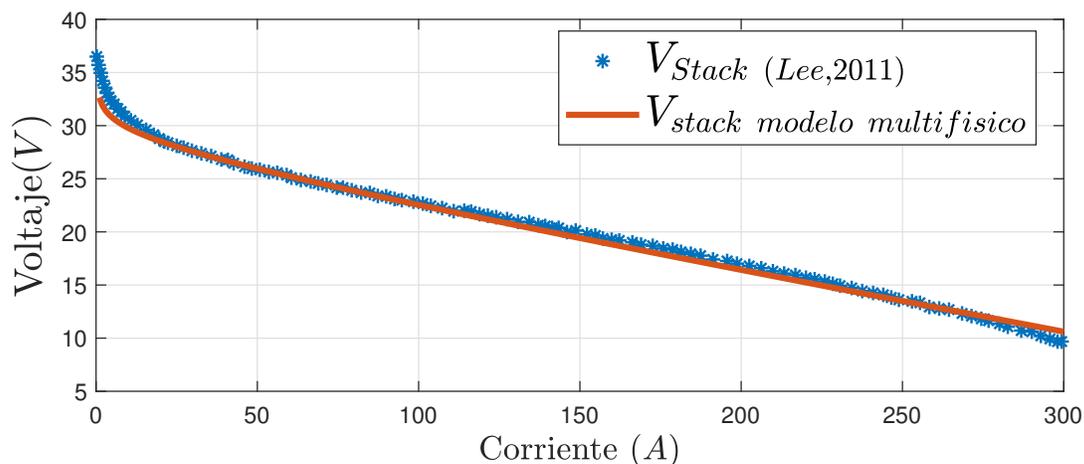


Figura 3.8: Comparación de curvas de polarización Voltaje (V) - corriente (A) de la PEMFC Ballard Mark V a $70^{\circ}C$.

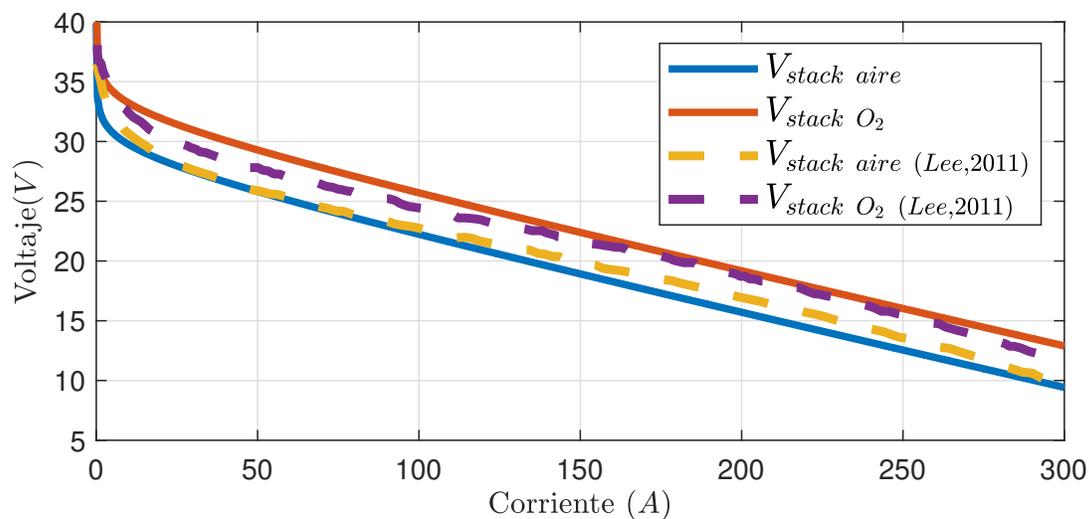


Figura 3.9: Comparación de curvas de polarización Voltaje (V) - corriente (A) de la PEMFC Ballard Mark V a $70^{\circ}C$, alimentando aire u oxígeno.

3.5. Validación del modelo en dominio eléctrico

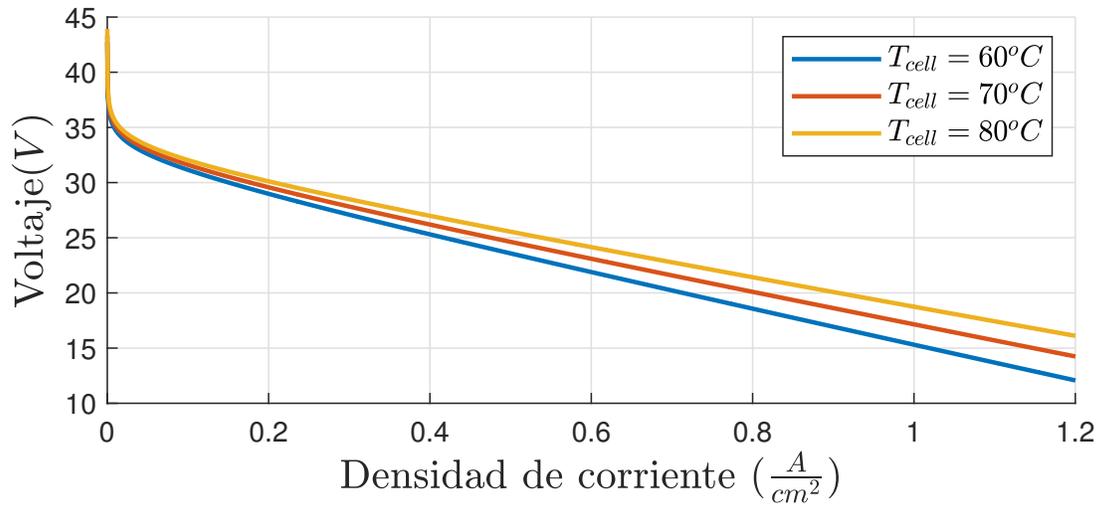


Figura 3.10: Efecto de temperatura en el desempeño estático de la PEMFC. Curvas de polarización Voltaje (V) - Densidad de corriente ($\frac{A}{cm^2}$) a P_{O_2} y $P_{H_2} = 303975$ (Pa).

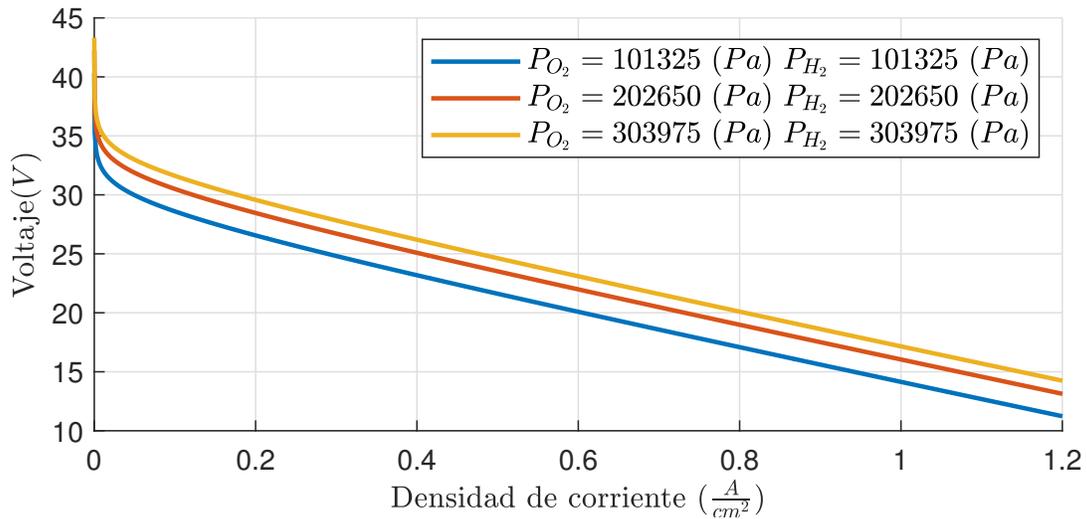


Figura 3.11: Efecto de la presión en el desempeño estático de la PEMFC. Curvas de polarización Voltaje (V) - Densidad de corriente ($\frac{A}{cm^2}$) a $70^\circ C$.

Validación del modelo eléctrico dimensionado a 5 kW en estado transitorio

Se realizó la simulación numérica de la dinámica del modelo eléctrico correspondiente al apilamiento Ballard Mark V en las condiciones de operación indicadas en la Tabla 3.8 y bajo el perfil de cargas de la Figura 3.12.

En la Figura 3.13 se compara la respuesta eléctrica obtenida por el modelo multifísico (línea verde punteada) y la respuesta obtenida por Karthink et al. [7] (línea azul).

Karthink [7] menciona que su simulación se realiza implementado estrategias de control que buscan mantener las condiciones de operación en los valores de la Tabla 3.8. En la Figura 3.13 es notable que los valores de su simulación no se mantienen estables como se esperaría con condiciones a valores constantes. Para aproximar la respuesta del modelo multifísico en dominio eléctrico a la respuesta del modelo de Karthink [7], se propone modificar el valor de la temperatura de la celda en las condiciones de operación. La temperatura de la celda no es constante durante la prueba y sigue una dinámica aproximada por la Ecuación (3.199). Considerando esta variación en la temperatura se obtiene la respuesta expresada por la línea roja en la Figura 3.13, que se aproxima bastante a los resultados de Karthink [7].

$$T_{cell}(t) = 54 + 2t \quad (3.199)$$

Tabla 3.8: Condiciones de operación del apilamiento Ballard Mark V [7]

Parámetros de simulación	Valor
Presión parcial del oxígeno en cátodo	63834.75 (Pa)
Presión parcial del hidrógeno en el ánodo	303975 (Pa)
Contenido de agua en el cátodo	14
Contenido de agua en el ánodo	10
Voltaje de corrección (V_{corr})	0.15 (V)
Temperatura de la celda	70°C

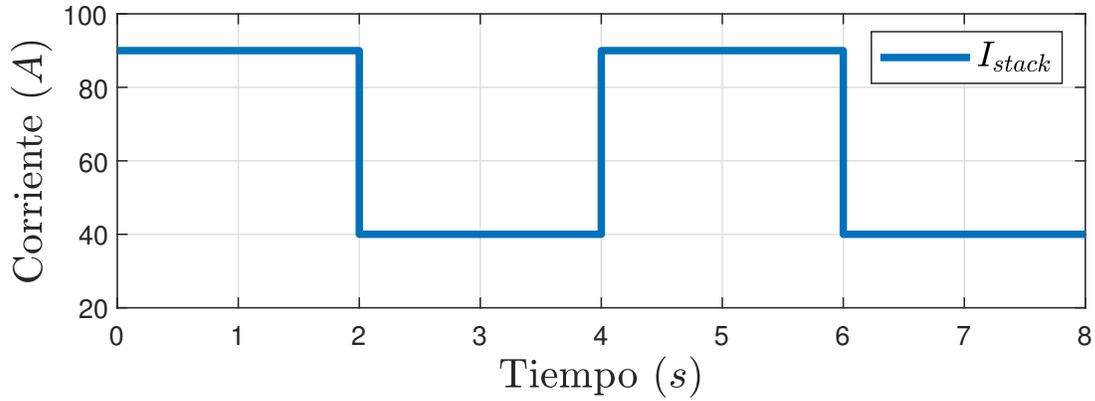


Figura 3.12: Perfil de carga aplicado al modelo del módulo de PEMFC Ballard Mark V .

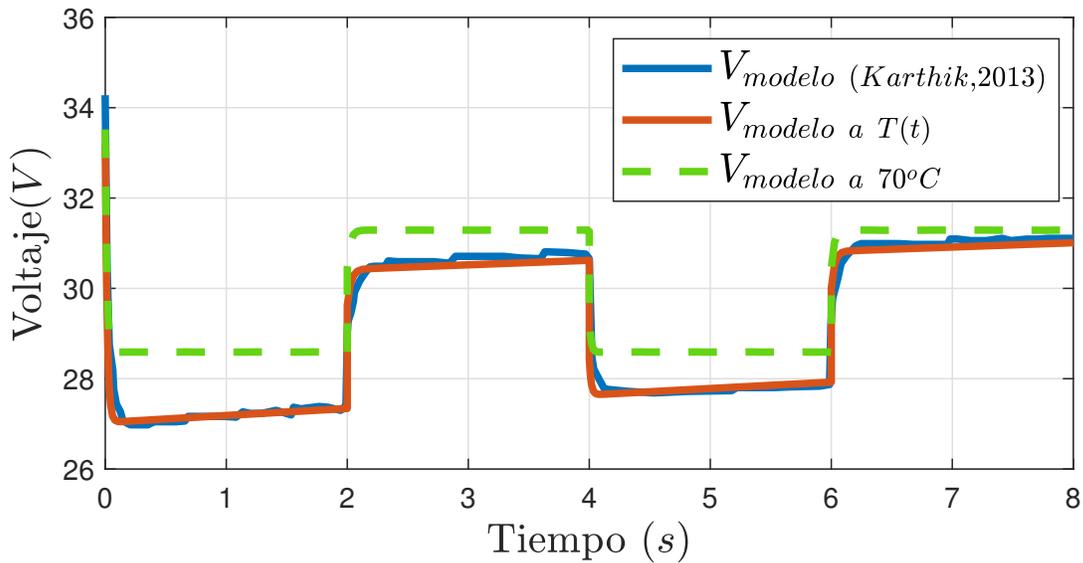


Figura 3.13: Respuesta dinámica del modelo del apilamiento de PEMFC Ballard Mark V.

3.6. Simulación y validación de modelo multifísico

El modelo multifísico se parametrizó para representar el comportamiento de un apilamiento Ballard Nexa 1.2-kW. En la Tabla 3.9 se muestran los parámetros de la PEMFC correspondientes a dicho módulo. Para validar la correspondencia del modelo al sistema físico se comparó la respuesta simulada con datos experimentales reportados por Gao [1] et al. para un módulo de generación de energía eléctrica Ballard Nexa de 1.2 kW.

Tabla 3.9: **Parámetros de Ballard Nexa 1.2 kW [1].**

Parámetro	Valor	Unidad
Número de celdas en el apilamiento N_{cell}	47	
Densidad de la placa bipolar ρ_{plate}	$1,8336 \times 10^3$	$\frac{kg}{m^3}$
Capacidad térmica de la placa bipolares $C_{p,plate}$	8.79×10^2	$\frac{kgK}{W}$
Conductividad térmica de la placa bipolar λ_{plate}	52	$\frac{W}{mK}$
Emisividad de placa bipolar θ	0.8	
GDL densidad $\rho_{solid,GDL}$	2×10^3	$\frac{kg}{m^3}$
GDL Capacidad térmica $C_{P,solid,GDL}$	$8,4 \times 10^2$	$\frac{kgK}{W}$
GDL Conductividad térmica λ_{GDL}	65	$\frac{W}{mK}$
GDL Porosidad φ_{GDL}	0.4	
GDL Tortuosidad ξ_{GDL}	1.5	
Densidad de sitios de catalizadores ρ_{cata}	$3,87 \times 10^2$	$\frac{kg}{m^3}$
Capacidad térmica de catalizador $C_{p,cata}$	$7,7 \times 10^2$	$\frac{kgK}{W}$
Conductividad térmica de catalizador λ_{cata}	0,2	$\frac{W}{mK}$
Corriente de intercambio de referencia $i_{0,ref}$	2,416	$\frac{A}{m^2}$
Capacitancia de doble capa C_{dl}	1.5×10^2	$\frac{F}{m^2}$
Densidad de membrana seca $\rho_{dry,mem}$	$1,97 \times 10^2$	$\frac{kg}{m^3}$
Masa equivalente de membrana M_{mem}	1,0	$\frac{kg}{m^2}$
Capacidad térmica de la membrana $C_{p,mem}$	$1,1 \times 10^3$	$\frac{kgK}{W}$
Conductividad térmica de la membrana λ_{mem}	0,21	$\frac{W}{mK}$
Sección transversal de la capa del stack A_{layer}	$1,4758 \times 10^{-2}$	m^2
Perímetro externo del stack U_{ext}	$5,024 \times 10^{-1}$	m
Área lateral interna de los canales $A_{R,lateral}$	7.7872×10^{-4}	m^2
Área de sección de la parte sólida $A_{R,solid}$	5.285248×10^{-3}	m^2
Área de sección de la parte de canales $A_{R,fluid}$	9.472752×10^{-3}	m^2
Espesor de la capa de enfriamiento δ_R	3.1×10^{-3}	m
Longitud de los canales L_R	1.256×10^{-1}	m
Número de canales de enfriamiento	18	
Área lateral interna de los canales $A_{C,ch,lateral}$	6.0775×10^{-4}	m^2
Área de sección de la parte sólida $A_{C,ch,solid}$	8.71816×10^{-3}	m^2
Área de sección de la parte de canales $\delta_{C,supp}$	6.03984×10^{-3}	m^2

Sigue en la página siguiente.

3.6. Simulación y validación de modelo multifísico

Espesor de la capa de soporte sólido $\delta_{C,supp}$	5.642×10^{-4}	m^2
Espesor de la capa de canales $\delta_{C,ch}$	6.858×10^{-4}	m
Longitud de los canales $L_{C,ch}$	8.807×10^{-4}	m
Número de canales en el cátodo	6	
Área lateral interna de los canales $A_{A,ch,lateral}$	6.0775×10^{-4}	m^2
Área de sección de la parte sólida $A_{A,ch,solid}$	9.5825×10^{-3}	m^2
Área de sección de la parte de canales $A_{A,ch,fluid}$	5.1755×10^{-3}	m^2
Espesor de la capa de soporte sólido $\delta_{A,supp}$	8.182×10^{-4}	m
Espesor de la capa de canales $\delta_{A,ch}$	4.318×10^{-4}	m
Longitud de los canales $L_{A,ch}$	2.264	m
Número de canales en el ánodo	2	
Espesor de la capa de difusión δ_{GDL}	4×10^{-4}	m
Espesor de la capa catalítica δ_{cata}	$6,5 \times 10^{-5}$	m
Espesor de la membrana δ_{mem}	1.78×10^{-2}	m
Constante de gases ideales R	8.314	$\frac{J}{molK}$
Constante de Faraday F	96485	$\frac{mol}{C}$
Variación de entropía en la reacción electroquímica ΔS	-164	$\frac{J}{molK}$

Los valores de coeficientes de convección y coeficientes combinados de convección y radiación se muestran en la Tabla 3.10. Gao [1] presenta una estimación de los coeficientes con la medición de datos de la celda. Los valores para las pruebas experimentales permanecen de 35.5 a 38.5 para la convección y de 9.2 a 10.95 para el coeficiente combinado de radiación y convección. Para las pruebas de simulación del Modelo multifísico estos son propuestos tomando en cuenta el rango de los valores experimentales y considerados invariantes en el tiempo.

El modelo multifísico, que abarca el dominio térmico, dominio eléctrico y dominio fluídico, se simuló considerando los parámetros y condiciones de operación de las Tablas 3.9, 3.10 y 3.11.

La simulación del modelo se realizó para una monocelda. Para obtener el voltaje total del apilamiento, el voltaje producido por la monocelda es multiplicado por el número de celdas (47 celdas) que constituyen al apilamiento Ballard Mark Nexa de 1.2 kW.

Tabla 3.10: **Coefficientes de convección y radiación [1].**

Coefficientes de convección y radiación	Valor
$h_{fc,R}$	38
$h_{fc,C,ch}$	38
$h_{fc,A,ch}$	38
$h_{R,nc,rd}$	10
$h_{C,supp,nc+rd}$	10
$h_{A,supp,nc+rd}$	10
$h_{C,ch,nc+rd}$	10
$h_{A,ch,nc+rd}$	10

Tabla 3.11: **Condiciones de operación de la PEMFC [1].**

Parámetros de simulación	Valor
Presión parcial del oxígeno en cátodo	105000 (Pa)
Presión parcial del hidrógeno en el ánodo	102000 (Pa)
Temperatura ambiente T_{amb}	278.15 $^{\circ}K$
Voltaje de corrección (V_{corr})	0.14 (V)

3.6.1. Simulación 1: Corriente de carga tipo escalón de larga duración

La primera simulación dinámica de la PEMFC se realizó aplicando como entrada el perfil de corriente que se muestra en la Figura 3.14. La señal es un cambio tipo escalón en la corriente solicitada a la celda de combustible. La demanda de corriente cambia de 1 hasta 28,6 (A) en $t = 73$ (s) y se mantiene en este valor hasta $t = 825$ (s), después, la corriente se mantiene en 1 (A). Con este perfil de corriente la simulación se realizó durante el tiempo necesario para que el voltaje de salida de la celda de combustible alcanzara el nuevo punto de equilibrio y se estableciera en ese valor.

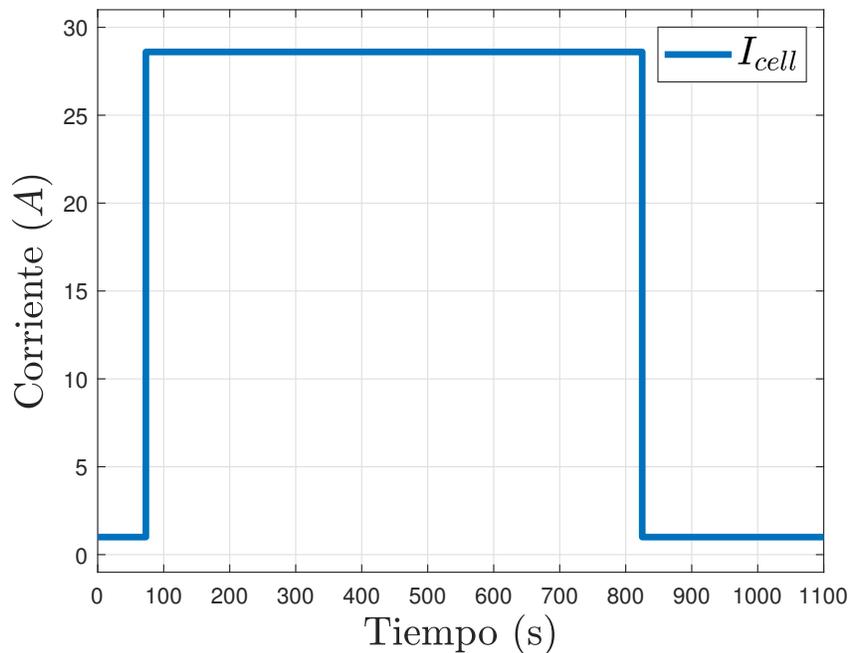


Figura 3.14: Perfil de corriente demandada a la celda de combustible.

En la Figura 3.15 se presenta la evolución temporal del voltaje generado por una monocelda. La respuesta del modelo multifísico ante el perfil de corriente de la Figura 3.14, se mantiene cercano a la respuesta que reporta Gao [1] para la simulación ante la misma entrada.

La dinámica del voltaje generado por el apilamiento completo se muestra en la Figura 3.16. En esta se comparan la dinámica reportada por Gao [1] y la respuesta obtenida por el simulador desarrollado en este trabajo. Aunque se observa una desviación de la respuesta simulada con respecto al voltaje medido, en general la aproximación en el tiempo de simulación es suficientemente buena y en particular, en régimen estacionario el error es menor.

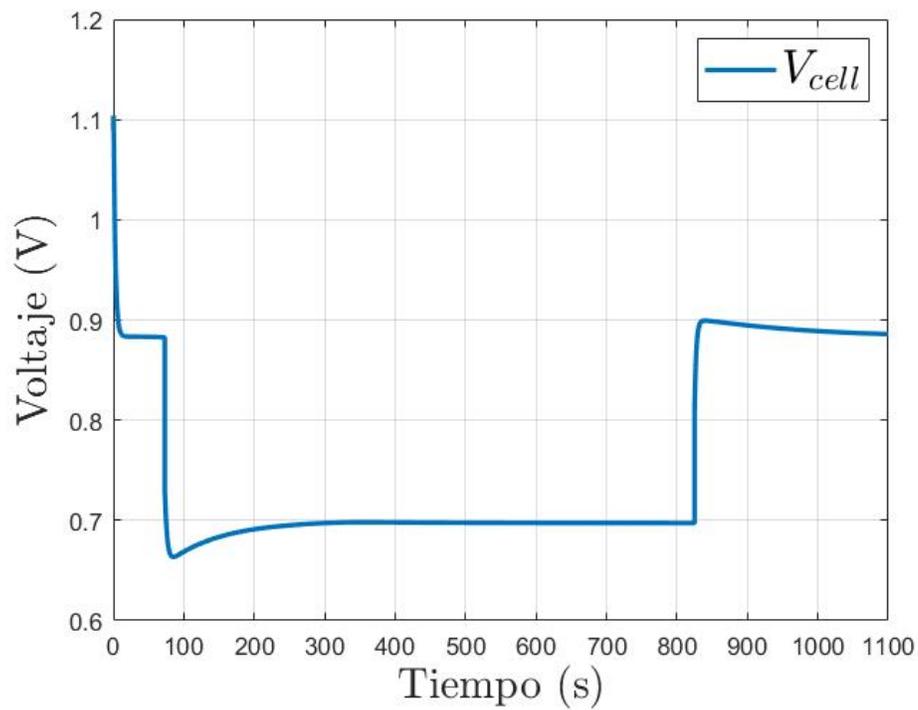


Figura 3.15: Voltaje de monocelda simulada con modelo multifísico.

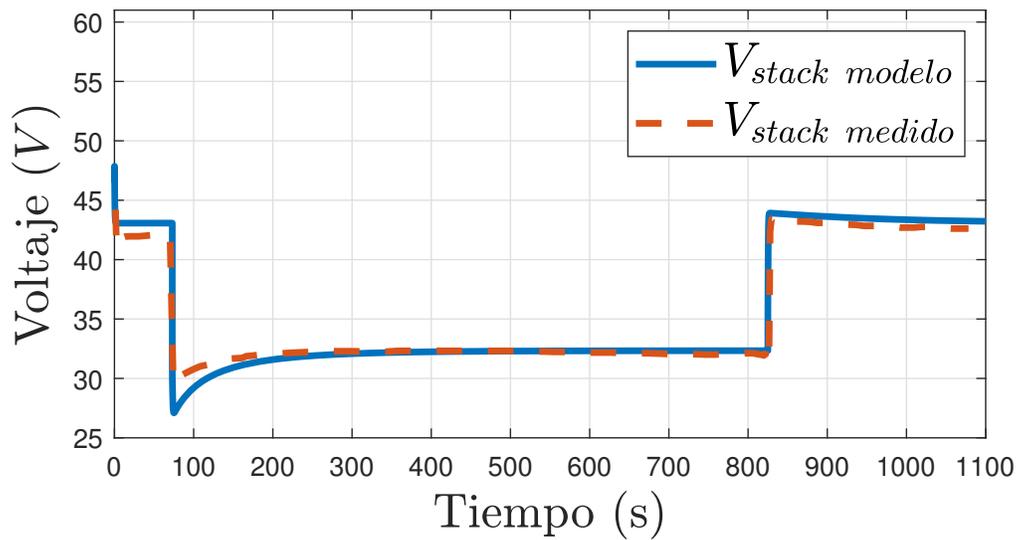


Figura 3.16: Voltaje en las terminales del apilamiento de PEMFC Respuesta del modelo simulado.

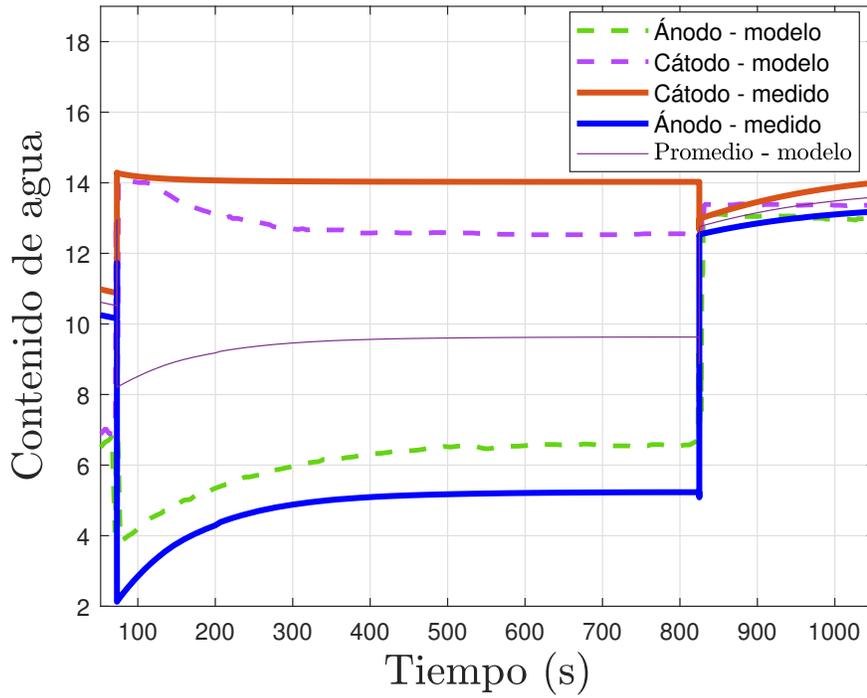


Figura 3.17: Contenido de agua en la membrana de la celda modelo y experimental [1].

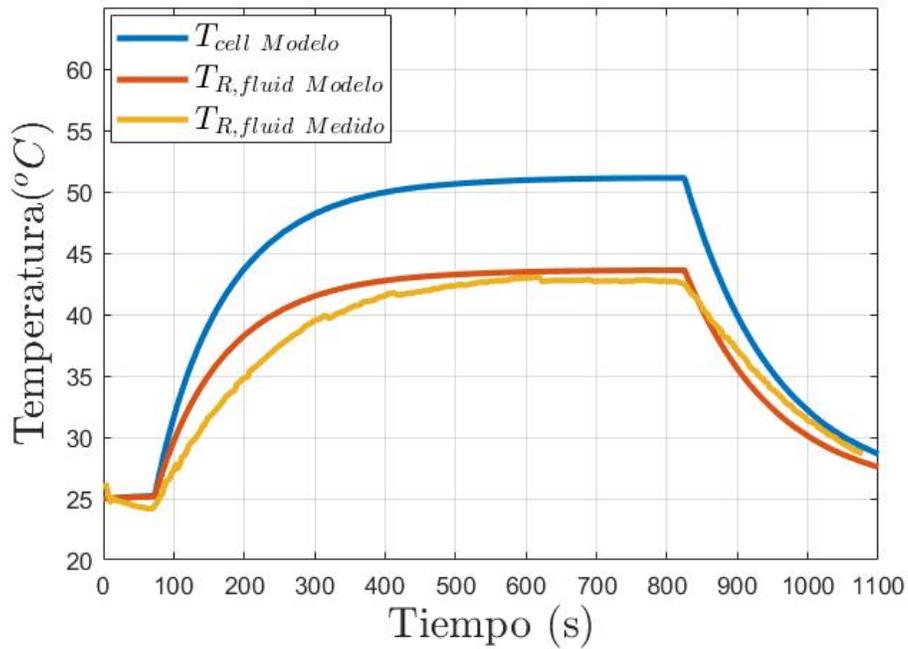


Figura 3.18: Temperatura en la celda de combustible simulada.

Con relación a la predicción del contenido de agua en la membrana de una celda de combustible, en la Figura 3.17 se observa un error de la predicción del modelo con respecto a la respuesta reportada por Gao et al. [1], en especial en el ánodo. Esta desviación puede explicarse debido a que no se conocen con certeza los parámetros de operación referentes a las presiones de los gases de entrada ni la humedad relativa. Para la simulación se usaron como guía algunos valores registrados en pruebas de operación de celdas de combustible y se variaron hasta aproximarse a los resultados deseados.

Como respuesta del modelado térmico del sistema, la Figura 3.18 muestra la dinámica térmica de las celdas de combustible en la membrana y del fluido de enfriamiento medido [1], que también se aproxima bastante a la temperatura obtenida en la simulación.

3.6.2. Simulación 2: Perfil de carga dinámica

La segunda simulación se realizó aplicando a la celda de combustible el perfil de corriente de carga dinámica que se muestra en la Figura 3.19. Con este perfil la celda no es capaz de llegar al estado estable.

El voltaje total del apilamiento de celdas de combustible Ballard Nexa 1.2 kW se muestra en las Figura y 3.20. En comparación con la primera simulación, en esta ocasión se observa una mayor diferencia entre los valores de los voltajes, especialmente cuando la corriente es baja.

En la Figura 3.21 se muestran los contenidos de agua en la celda de combustible. En esta ocasión también se puede apreciar una diferencia en tanto a los valores y las dinámicas que siguen.

En la Figura 3.22 se muestran las temperaturas de la membrana y del fluido de enfriamiento que sale de la celda. Los valores obtenidos indican que la temperatura de la celda simulada sigue correctamente la dinámica mostrada en la Figura 3.23, que son datos reportados por Gao et al. [1].

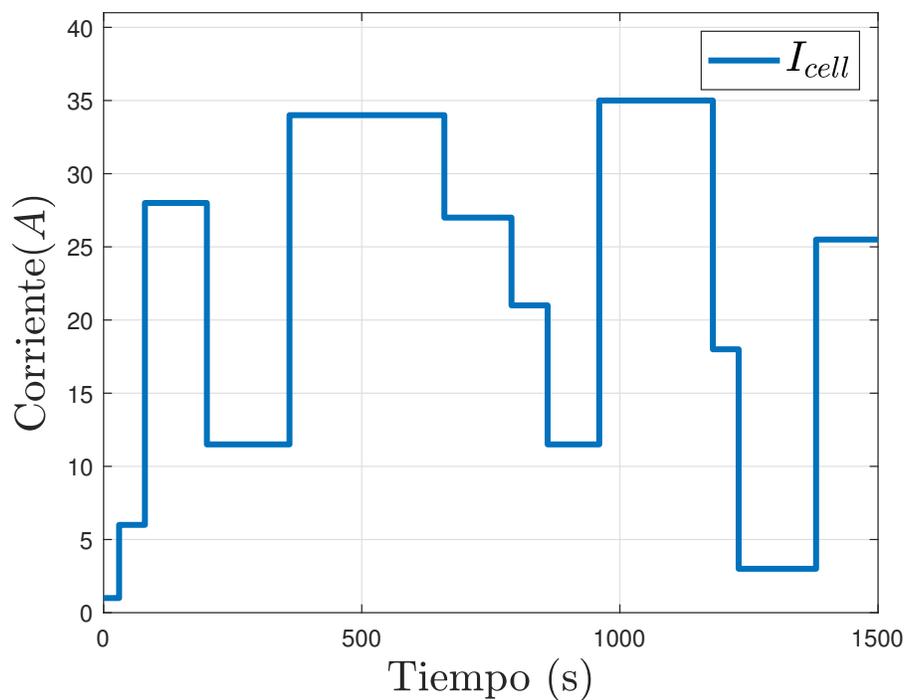


Figura 3.19: Perfil de corriente aplicado a la celda de combustible.

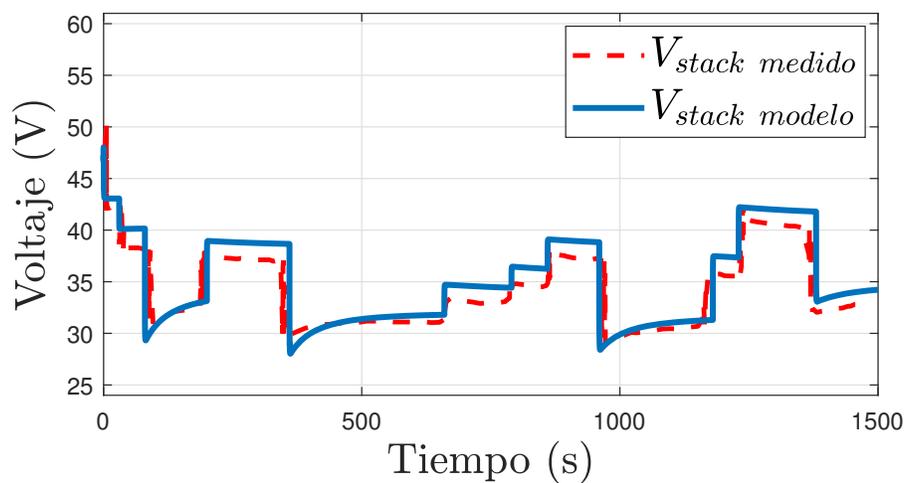


Figura 3.20: Voltaje de modelo simulado y experimental de la celda de combustible.

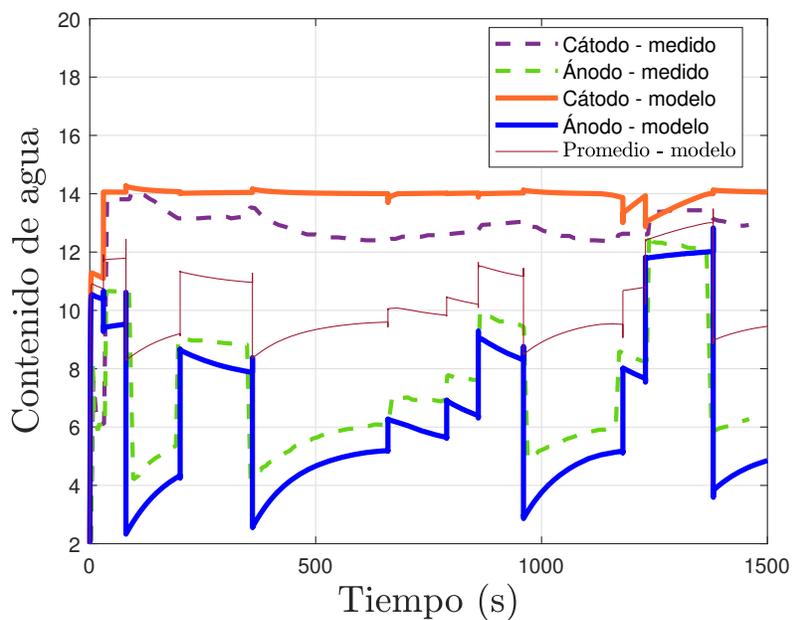


Figura 3.21: Contenido de agua en la membrana de la celda modelo y experimental.

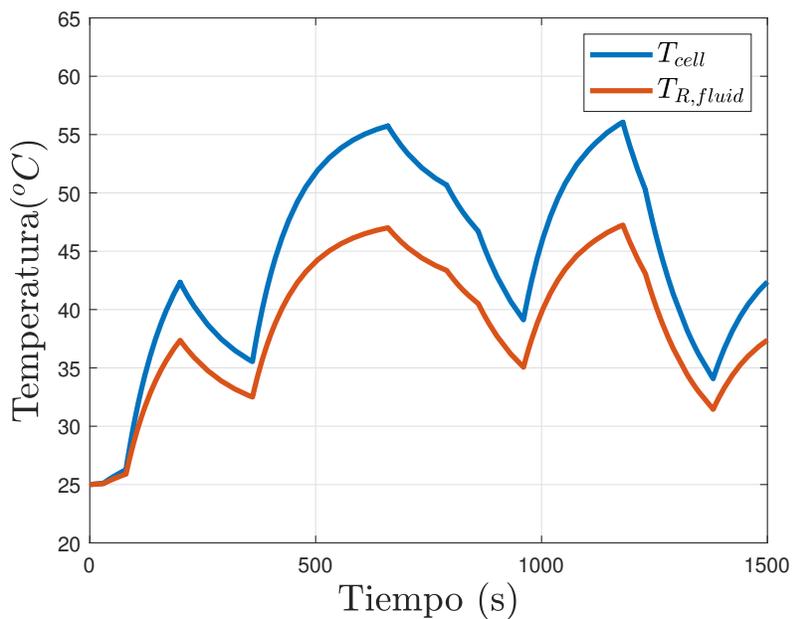


Figura 3.22: Temperatura en la celda de combustible simulada.

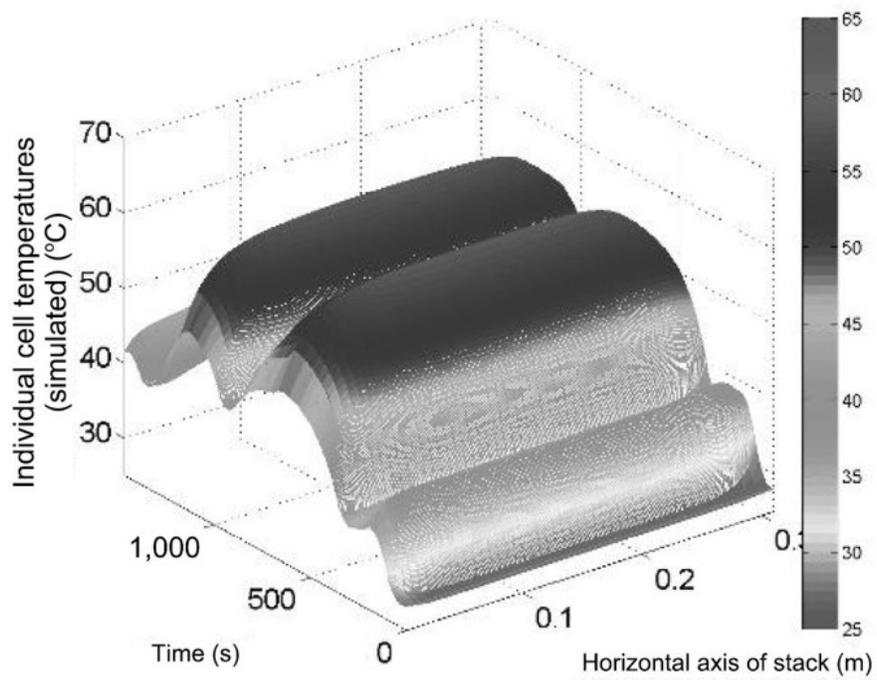


Figura 3.23: Temperatura medida en prueba experimental, reportada por Gao et al. [1]

Capítulo 4

Sistema de generación de energía basado en PEMFC

Se procede a construir, en simulación, un sistema básico de generación de energía con el módulo Ballard Nexa 1.2-kW donde se integran el modelo multifísico del capítulo 3, equipos auxiliares y lazos de control para mantener a la celda en condiciones deseadas. En la Figura 4.1 se muestra el diagrama del sistema de celdas de combustible.

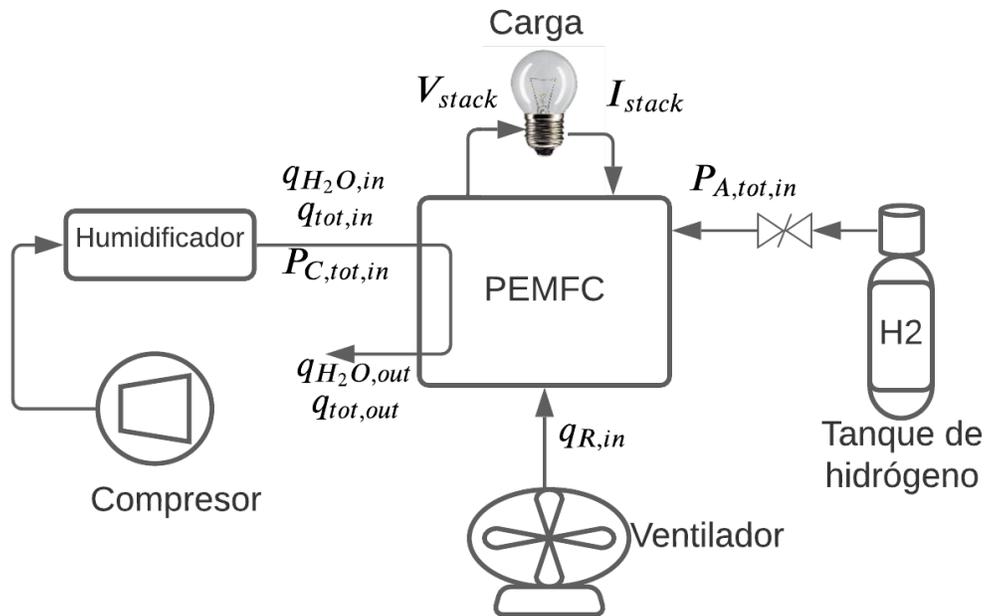


Figura 4.1: Sistema de una celda de combustible con componentes auxiliares.

El módulo Ballard Nexa 1.2-kW es un sistema de generación de energía con celdas de combustible que integra componentes básicos para su funcionamiento, estos son:

- Apilamiento de celdas de combustible de 1.2 kW de potencia (47 celdas).
- Compresor controlado por driver.
- Humidificador
- Ventilador

Como se menciona en el la sección 2.2, es necesario construir subsistemas que se encarguen de gestionar ciertas variables para un correcto funcionamiento de la celda. A continuación se describen los subsistemas que conforman el sistema simulado de celdas de combustible:

- **Subsistema de gestión de hidrógeno:** Los principales elementos de este subsistema son el tanque de hidrógeno y la válvula de regulación de presión. Estos se encargan de suministrar el oxígeno a la entrada de los canales del ánodo. En este caso se ha asumido un control de presión ideal en la válvula, por lo que se considera una presión constante en la entrada de los canales del ánodo.
- **Subsistema de gestión de agua:** El principal elemento de este subsistema es el humidificador. Este se encarga de humedecer los gases para mantener hidratada la membrana polimérica. Para la simulación del sistema de celdas de combustible se ha asumido un control ideal en el humidificador, se asume que la humedad en los gases de entrada es constante.
- **Subsistema de gestión de aire:** El principal elemento de este subsistema es el compresor de aire, que se encarga de suministrar oxígeno a la celda. En este capítulo se describe el diseño de un control RST y un control por modelo interno para el exceso de alimentación de oxígeno.
- **Subsistema de gestión térmica:** El elemento considerado para construir un sistema de enfriamiento será un ventilador de corriente directa. El ventilador brinda un flujo de aire que ingresa a la celda para regular la temperatura. En este capítulo se presenta el diseño de un controlador PI para la la temperatura de la celda como parte del subsistema de gestión térmica.

4.1. Subsistema de gestión de aire

4.1.1. Exceso de alimentación de oxígeno

El exceso de alimentación de oxígeno λ_{O_2} es la relación entre el flujo másico de oxígeno que entra en el cátodo de la celda $q_{C,O_2,in}$ y el flujo másico de oxígeno que debería ser consumido $q_{O_2,rxn}$, de acuerdo con la estequiometría mostrada en la Ecuación (2.2).

$$\lambda_{O_2} = \frac{q_{O_2}}{q_{O_2,rxn}} \quad (4.1)$$

Un exceso de alimentación de oxígeno en el cátodo por debajo de la requerida, según la relación estequiométrica de la Ecuación (2.2), puede provocar un bajo rendimiento de producción de energía de la celda, la degradación de la membrana polimérica y en consecuencia una reducción de la vida útil de la PEMFC, [48]. Siempre que la celda este en operación el exceso de oxígeno debe mantenerse $\lambda_{O_2} \geq 1$. Para ello se puede mantener una presión alta en la entrada de los canales del cátodo $P_{C,tot,in}$ o integrar un sistema de control que asegure un exceso de oxígeno adecuado para la operación de la celda de combustible.

Se ha propuesto añadir al subsistema fluídico un controlador capaz de regular λ_{O_2} . Debido a la aplicación de las celdas de combustible, es común que las condiciones de operación no sean constantes. Por ello se busca que los controladores sean capaces de rechazar perturbaciones provocadas por estas variaciones.

4.1.2. Modelo de compresor

Ramos et al. [49] presentan un modelo descriptivo del compresor conectado al apilamiento Ballard Nexa 1.2 kW. El modelo se obtuvo usando técnicas de identificación, realizando mediciones en el compresor del módulo PEMFC. La ecuación para calcular la relación entre la señal de entrada del compresor y el flujo volumétrico de aire que ingresa al apilamiento de celdas contempla los efectos de la presión en los canales del cátodo de la PEMFC. El modelo obtenido es:

$$W_{cp} = G_{cm}(s)V_{cp} - 45 \quad (4.2)$$

$$G_{cm}(s) = \frac{B(s)}{A(s)} = \frac{0,1437s^2 + 2,217s + 8,544}{s^3 + 3,45s^2 + 7,324s + 5,745} \quad (4.3)$$

Donde V_{cp} es la señal de control en forma de resolución con un rango de 0% – 100%, que ingresa al driver para accionar el compresor y W_{cp} es el flujo volumétrico de aire (*SLPM*) que entra a los canales del cátodo.

El compresor se alimenta con la energía que produce celda de combustible, por lo que la corriente total en el apilamiento I_{stack} es la suma de la corriente del compresor I_{cm} con la

corriente de carga I_{net} . Ramos et al. [49] también presentan una relación entre la corriente I_{cm} del compresor y el flujo que provee W_{cp} .

$$I_{stack} = I_{cm} + I_{net} \quad (4.4)$$

$$I_{cm} = -323,1 \times 10^{-5} W_{cp}^2 + 0,018W_{cp} + 0,616 \quad (4.5)$$

W_{cp} está expresada en SLPM (litros estándar por minutos), por lo que es necesario convertir a unidades de flujo másico ($\frac{kg}{s}$) para que coincida con las unidades del modelo multifísico del capítulo 3.

El flujo másico en la entrada del cátodo de la celda $q_{C,in}$ es calculado con la Ecuación (4.6) [49].

$$q_{C,in} = \frac{W_{cp}}{22,4 \times 60} M_{am} \quad (4.6)$$

$$M_{am} = (1 - x_v)M_{air} + x_v M_{H_2O} \quad (4.7)$$

$$x_v = \frac{\phi_{ca,in} P_{sat}(T_{st})}{1 - \phi_{ca,in} P_{sat}(T_{st})} \quad (4.8)$$

Donde $M_{H_2O} = 18 \times 10^{-3}$ y $M_{air} = 28,8 \times 10^{-3}$ son las masas molares del agua y aire ($\frac{kg}{mol}$), respectivamente, $\phi_{ca,in}$ es la humedad relativa del aire en la entrada del cátodo y $P_{sat}(T_{st})$ es la presión de saturación del vapor de agua (*bar*) que es una función de la temperatura [49]:

$$\begin{aligned} \log_{10}(P_{sat}) = & (-1,69 \times 10^{-10})T^4 + (3,85 \times 10^{-7})T^3 \\ & + (-3,39 \times 10^{-4})T^2 + 0,143T - 20,92 \end{aligned} \quad (4.9)$$

4.1.3. Diseño de control CMI para el exceso de alimentación de oxígeno

El modelo del compresor, Ecuación (4.2), posee la parte dinámica expresada mediante una función de transferencia $G_{cm}(S)$ y un término constante que no es afectado por la variable manipulada V_{cp} . En la Figura 4.2 se muestra que el término restado en (4.2) se puede interpretar como una perturbación interna del sistema, por lo tanto es posible omitirlo para el diseño del CMI. El modelo dinámico del compresor es expresado únicamente por la función de transferencia:

$$\hat{G}_{cm}(S) = \frac{W_{cp}(s)}{V_{cp}(s)} = \frac{0,1437s^2 + 2,217s + 8,544}{s^3 + 3,45s^2 + 7,324s + 5,745} \quad (4.10)$$

En el control por modelo interno, la función del controlador $G_c(s)$ se puede obtener al invertir la función de transferencia de la planta .

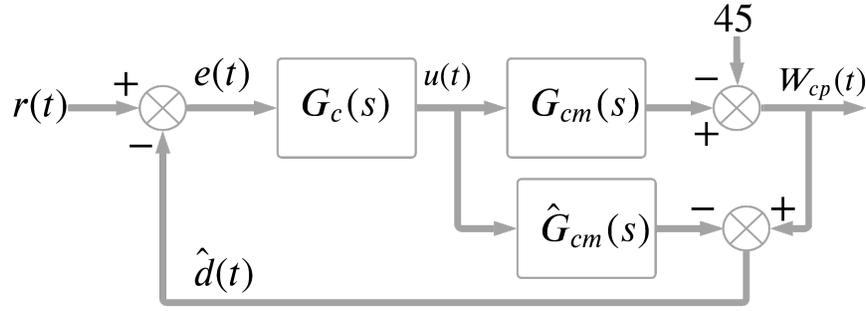


Figura 4.2: Estructura de control CMI para el modelo de compresor.

$$\hat{G}_{cm}(s)^{-1} = \frac{s^3 + 3,45s^2 + 7,324s + 5,745}{0,1437s^2 + 2,217s + 8,544} \quad (4.11)$$

El modelo inverso resulta en una función de transferencia impropia, por ello es necesario agregar un filtro para obtener una función de controlador propia. La estructura del filtro agregado es:

$$f(s) = \frac{n\lambda s + 1}{(\lambda s + 1)^n} \quad (4.12)$$

Donde $n \geq 2$ y λ es un parámetro a sintonizar para establecer la dinámica del sistema en lazo cerrado. Los valores pequeños de λ resultan en una dinámica rápida, mientras que los grandes proporcionan una respuesta lenta. En la Figura 4.3 se muestra el comportamiento del sistema en lazo cerrado con el CMI considerando $n = 3$ y tres valores diferentes para λ .

Considerando las dinámicas del sistema en la Figura 4.3, se ha optado por el valor de $\lambda = 1,4$. Por lo tanto, la función del del controlador $G_c(s)$ resulta finalmente como:

$$G_c(s) = f(s)\hat{G}_{cm}(s)^{-1} \quad (4.13)$$

$$G_c(s) = \frac{4,2s^4 + 15,49s^3 + 34,208s^2 + 24,129s + 5,745}{0,3943s^5 + 6,9284s^4 + 36,9118s^3 + 59,6938s^2 + 38,1018s + 8,544} \quad (4.14)$$

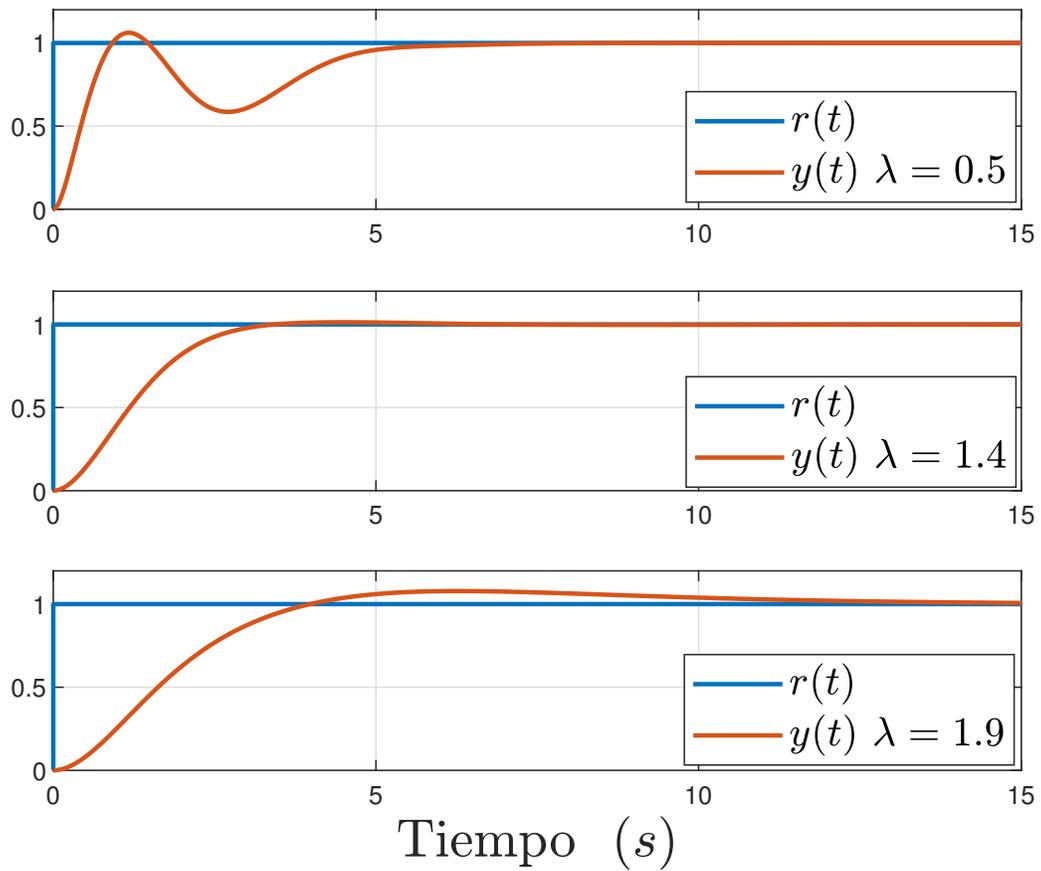


Figura 4.3: Respuesta del CMI ante diferentes valores de λ .

4.1.4. Diseño de control RST para el exceso de alimentación

Se diseñó un controlador RST para el exceso de alimentación oxígeno λ_{O_2} . Se ha añadido un integrador al polinomio $S(s)$ para asegurar el rechazo a perturbaciones y estabilización en la referencia deseada. Se han propuesto las siguientes formas para los polinomios:

$$T(s) = t_0 \quad (4.15)$$

$$S(s) = (s + c_1s + c_0)(s) = s^3 + c_1s^2 + c_0s \quad (4.16)$$

$$R(s) = r_3s^3 + r_2s^2 + r_1s + r_0 \quad (4.17)$$

Se considera el modelo dinámico del compresor, Ecuación (4.3). Al igual que en el diseño del control por modelo interno, el término restado en (4.2) es tomado como una perturbación del sistema. La estructura del controlador RST con el modelo de compresor se muestra en la Figura 4.4.

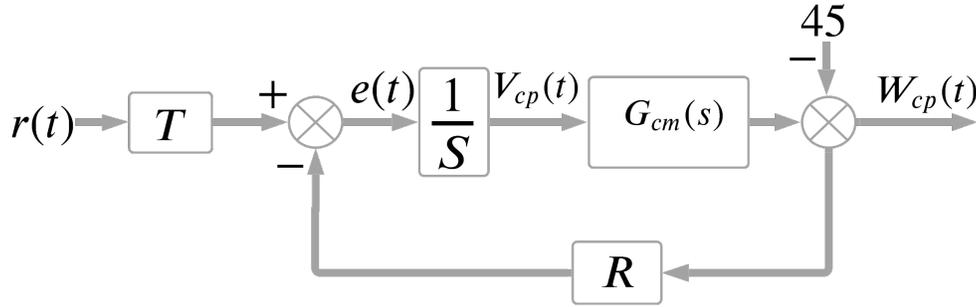


Figura 4.4: Estructura de control RST para el modelo de compresor.

Los polos del modelo de compresor (4.3) son: $s = -1,2581$, $s = -1,0959 - 1,8345i$ y $s = -1,0959 + 1,8345i$. Los polos propuestos para el sistema en lazo cerrado (2.17) son: $s = -5$, $s = -10$, $s = -15$, $s = -1,0959 + 1,8345i$, $s = -1,0959 - 1,8345i$ y $s = -1,2581$. El polinomio característico propuesto P_c es:

$$P_c = s^6 + 33,5s^5 + 385,8s^4 + 1924,2s^3 + 4774s^2 + 7072,9s + 4308,7 \quad (4.18)$$

Los coeficientes de los polinomios propuestos: c_0 , r_2 , r_1 y r_0 , se obtienen mediante la ecuación de Bézout (4.19).

$$P_c = A(s)S(s) + B(s)R(s) \quad (4.19)$$

En (4.20) se muestra, en forma matricial, el sistema de ecuaciones a resolver.

$$\begin{matrix} s^6 \\ s^5 \\ s^4 \\ s^3 \\ s^2 \\ s^1 \\ s^0 \end{matrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 33,5 \\ 385,8 \\ 1924,2 \\ 4774 \\ 7072,9 \\ 4308,7 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0,1437 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3,45 \\ 3,45 & 1 & 2,217 & 0,1437 & 0 & 0 & 0 & 7,324 \\ 7,324 & 3,45 & 8,544 & 2,217 & 0,1437 & 0 & 0 & 5,745 \\ 5,745 & 7,324 & 0 & 8,544 & 2,217 & 0,1437 & 0 & 0 \\ 0 & 5,745 & 0 & 0 & 8,544 & 2,217 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 8,544 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_0 \\ r_3 \\ r_2 \\ r_1 \\ r_0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (4.20)$$

Los polinomios $R(s)$ y $S(s)$ resultan como:

$$S(s) = s^3 + 17,433s^2 + 80,1421s \quad (4.21)$$

$$R(s) = 87,7988s^3 + 302,9861s^2 + 643,0783s + 504,2954 \quad (4.22)$$

Los polos del sistema de suministro de oxígeno en lazo cerrado, con el controlador RST, resultan como: $s = -5$, $s = -10$, $s = -15$, $s = -1,0959 + 1,8345i$, $s = -1,0959 - 1,8345i$ y $s = -1,2581$, que fueron los propuestos para el polinomio característico (4.19).

El polinomio $T(s)$ actúa como una ganancia que permite llegar a la referencia deseada $r(t)$ en un tiempo finito. El valor del coeficiente t_0 se determinó a partir del teorema de valor final, ante una entrada de tipo escalón unitario, en la función de transferencia del sistema en lazo cerrado.

$$1 = \lim_{s \rightarrow 0} s \frac{T(s)B(s)}{A(s)S(s) + B(s)R(s)} \frac{1}{s} \quad (4.23)$$

$$T(s) = 504,4134 \quad (4.24)$$

4.1.5. Implementación de control de exceso de oxígeno en sistema de generación de energía basado en celdas de combustible

Los controladores anteriormente diseñados se implementaron en un sistema de celdas de combustible simulado en el entorno de Matlab-Simscape. Este está compuesto por un apilamiento Ballard Nexa de 1.2 kW, un ventilador para enfriamiento, un humidificador y un compresor, como se muestra en la Figura 4.1.

La simulación incluye el modelo multifíscico de celda de combustible presentado en el capítulo 3. Las condiciones de operación se muestran en la Tabla 4.1.

El exceso de alimentación de oxígeno λ_{O_2} es la referencia del controlador, ésta inicia en $\lambda_{O_2} = 6$, en el segundo $t = 800$ s cambia a $\lambda = 2$. La Figura 4.5 muestra la corriente de carga I_{net} y la corriente total I_{st} en el apilamiento. La Figura 4.9 muestra la señal de resolución V_{cp} que ingresa al driver del compresor para mantener el exceso de oxígeno deseado.

En la Figura 4.7 se muestra que ambos controladores alcanzan la referencia adecuadamente. Se realizan cambios en la corriente de carga (Figura 4.5) durante la simulación, que para los controladores representan perturbaciones y en consecuencia realizan una acciones correctivas para regresar nuevamente al valor de referencia. En la Figura 4.7 se observa que las variaciones de carga en la celda producen perturbaciones mas grandes cuando trabaja en corrientes bajas.

La Figura 4.6 muestra el flujo másico de oxígeno que se requiere para mantener la relación de exceso de alimentación de oxígeno λ_{O_2} y el flujo másico de oxígeno que ingresa a la PEMFC

En la Figura 4.8 se observa que el voltaje total que brinda apilamiento es mayor cuando λ_{O_2} es más grande. La celda tiene un mejor rendimiento cuando se tiene un exceso de alimentación de oxígeno alto.

tablefootnote

Tabla 4.1: **Condiciones de operación de la PEMFC.**

Parámetro	Valor	Unidades
Temperatura ambiente	298.15	K
Presión en la entrada del ánodo	$1,5 \times 10^5$	Pa
Humedad relativa en la entrada del cátodo ¹	1	
Humedad relativa en la entrada del ánodo	0	
Flujo másico en canal de enfriamiento	4×10^{-4}	$\frac{kg}{s}$
Temperatura de gas de enfriamiento	298.15	K
Voltaje de corrección	0.125	V

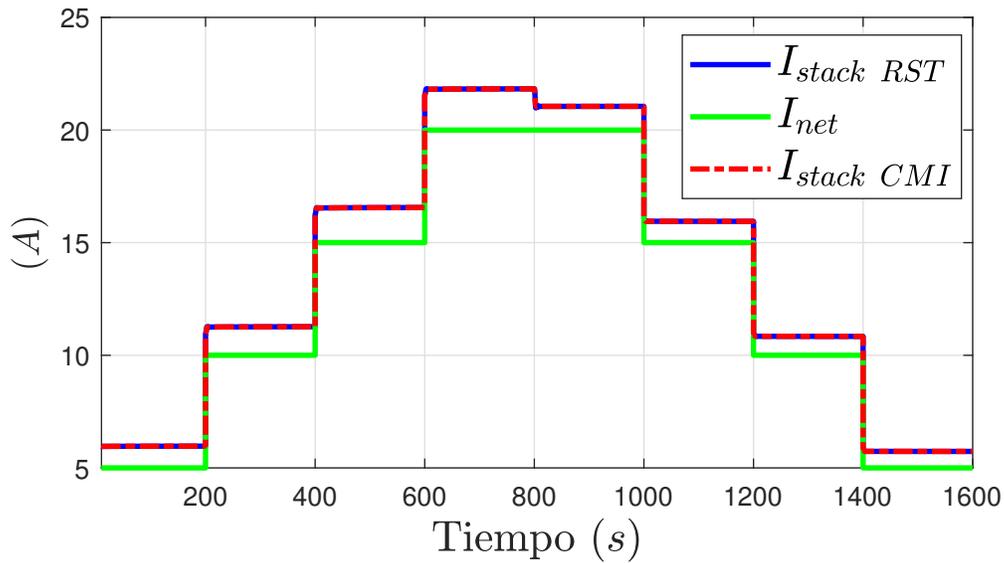


Figura 4.5: Corriente de carga y corriente total en el apilamiento.

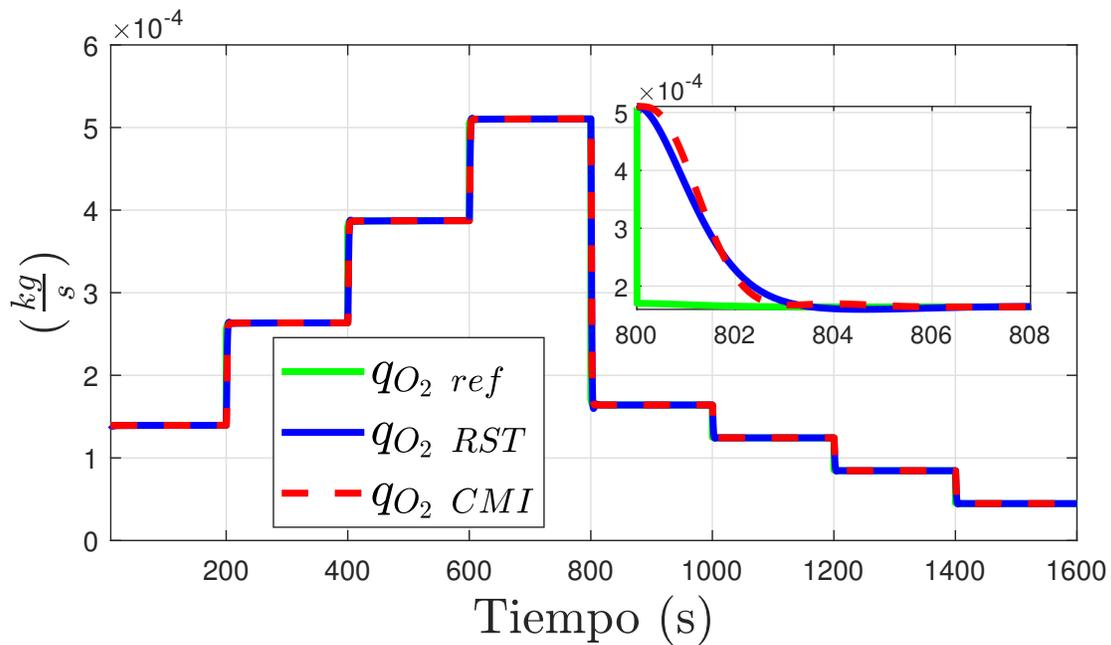


Figura 4.6: Flujo másico de oxígeno que ingresa a la PEMFC.

¹Humedad relativa ϕ es la relación entre la presión parcial de vapor de agua y la presión de saturación del vapor a una temperatura determinada: $\phi = P_{H_2O}/P_{H_2O}^{sat}$.

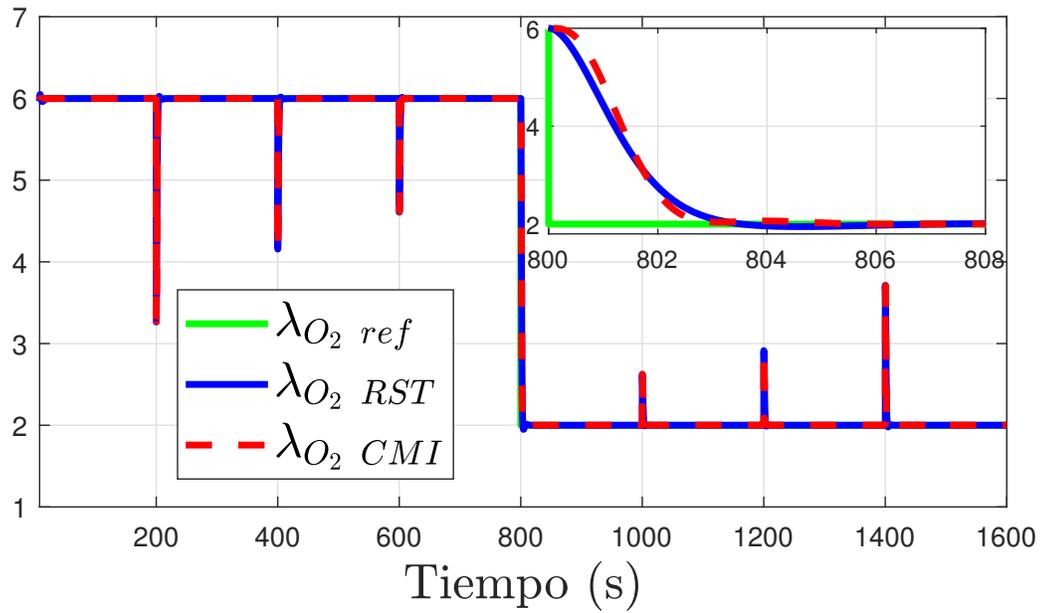


Figura 4.7: Exceso de alimentación de oxígeno en la PEMFC.

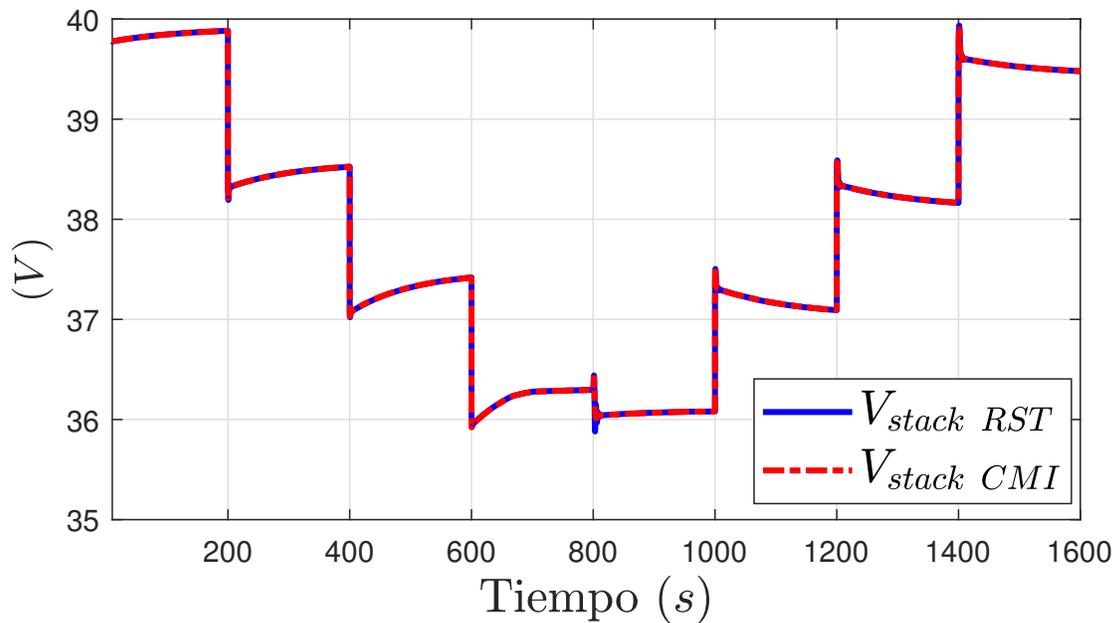


Figura 4.8: Voltaje de salida del apilamiento.

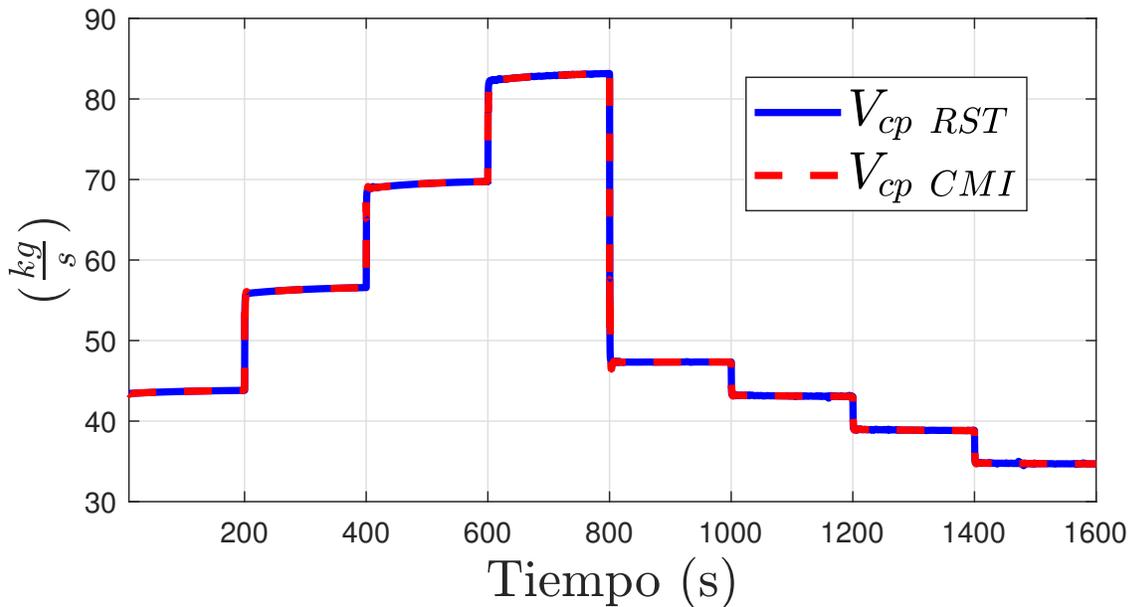


Figura 4.9: Señal de control de compresor.

4.1.6. Índices de desempeño de controladores de alimentación de oxígeno

Los controladores se evaluaron usando índices de desempeño; Los resultados se muestran en la Tabla 4.2. El controlador CMI obtuvo valores mas pequeños en todos los índices.

La evaluación mediante los índices IAE, ITAE e ISE indican que el Control por modelo interno tuvo mejor desempeño en las pruebas previamente realizadas. Esta ley de control presenta un tiempo de estabilización aproximado de 4 segundos y un sobrepaso máximo de 1,25 %.

Tabla 4.2: Índices de desempeño

Controlador	IAE	ITAE	ISE
RST	19.84	13560	35.03
CMI	18.71	12530	29.75

4.2. Subsistema de gestión térmica

La reacción electroquímica producidas dentro de la celda de combustible es exotérmica, es decir, libera energía en forma de calor. El subsistema térmico se encarga de mantener a la PEMFC en un rango de temperatura adecuado para la operación. Es necesario integrar un sistema de enfriamiento a base de convección, natural o forzada, o mediante un radiador de calor para evitar daños a los componentes de la celda.

4.2.1. Celda sin control de temperatura

Se realizó una prueba en simulación del sistema de celda de combustible con el ventilador totalmente apagado para conocer la temperatura que alcanza el apilamiento cuando no se aplica un flujo de enfriamiento. En la Figura 4.10 se muestra la temperatura de la membrana y los canales del cátodo considerando una corriente de carga que parte desde los 20 y aumenta 5A cada 500 segundos hasta llegar a 50A.

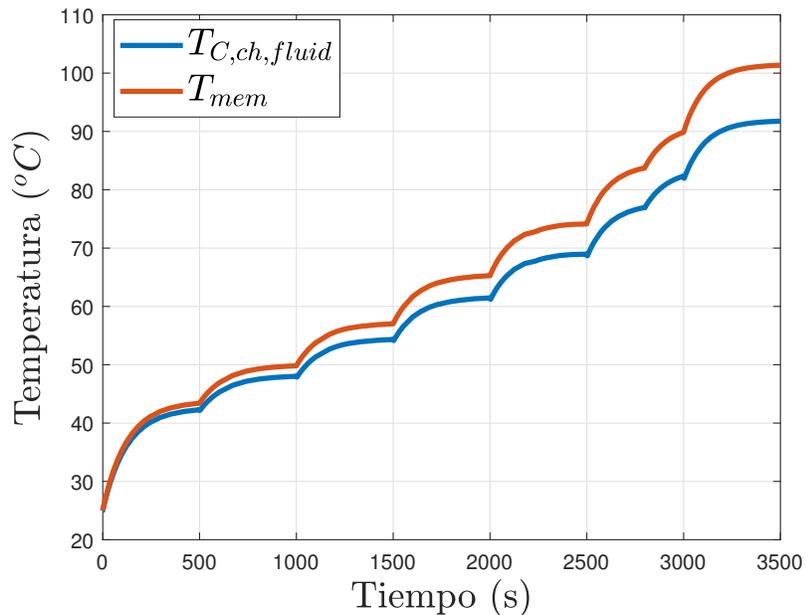


Figura 4.10: Temperatura de la celda sin sistema de enfriamiento.

El apilamiento Ballard Nexa 1.2-kW genera poco calor en comparación de las celdas de mayor potencia. Este módulo está diseñado para enfriarse mediante un flujo de aire que circule por sus canales de enfriamiento.

Se ha integrado un ventilador al sistema de generación de energía eléctrica para regular la temperatura de la celda mediante un flujo másico de aire.

Ventilador

Se ha considerado el modelo de ventilador de la librería de Matlab-Sinscape. Este se ha dimensionado de tal forma que logre brindar un flujo másico suficiente para regular la temperatura de la celda a $40^{\circ}C$ en una corriente máxima de operación de $50A$ y una temperatura ambiente de $25^{\circ}C$.

Las pruebas realizadas en el modelo de la celda muestran que $q_{R,in} = 0,0246 \frac{kg}{s}$ logra regular la temperatura de los canales del cátodo de la celda hasta aproximadamente $40^{\circ}C$. Por lo que este valor se establece como el flujo máximo del ventilador. También se establece que el voltaje máximo de alimentación del ventilador es $20V$.

En la Figura 4.11 se muestra la relación de flujo másico ($\frac{kg}{s}$) con el voltaje de alimentación del ventilador.

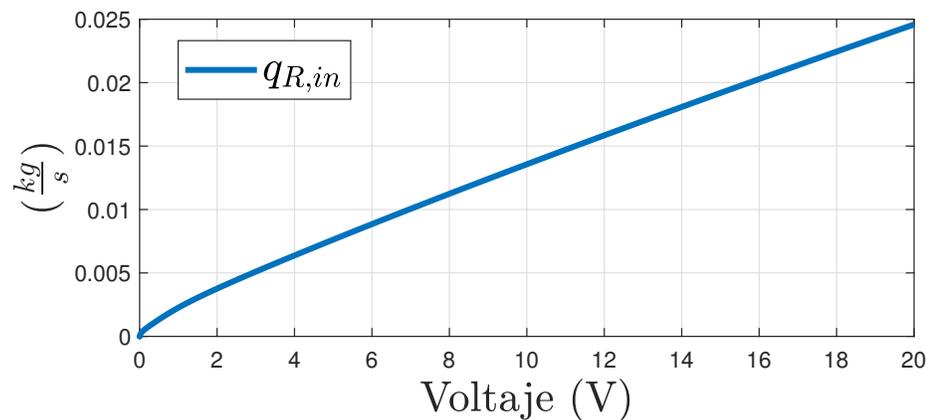


Figura 4.11: Curva voltaje-flujo másico de ventilador con aire a $25^{\circ}C$.

4.2.2. Diseño de control PI para regulación de temperatura de la celda

El sistema donde se busca implementar el controlador está expresado por un modelo no lineal de múltiples entradas y múltiples salidas (MIMO). Dado que la linealización del sistema es una tarea extensa, se ha optado por diseñar un control PI mediante el método de sintonización de Ziegler - Nichols.

Respuesta en lazo abierto

Se considera al sistema en estado estable en una corriente de carga de $I_{net} = 25A$ y una alimentación en el ventilador de $V_{vent} = 0V$.

Siguiendo el método 1 de sintonización (lazo abierto), se aplica un cambio de escalón unitario a la variable controlada (V_{vent}) para obtener la respuesta del sistema, mostrada en la Figura 4.12.

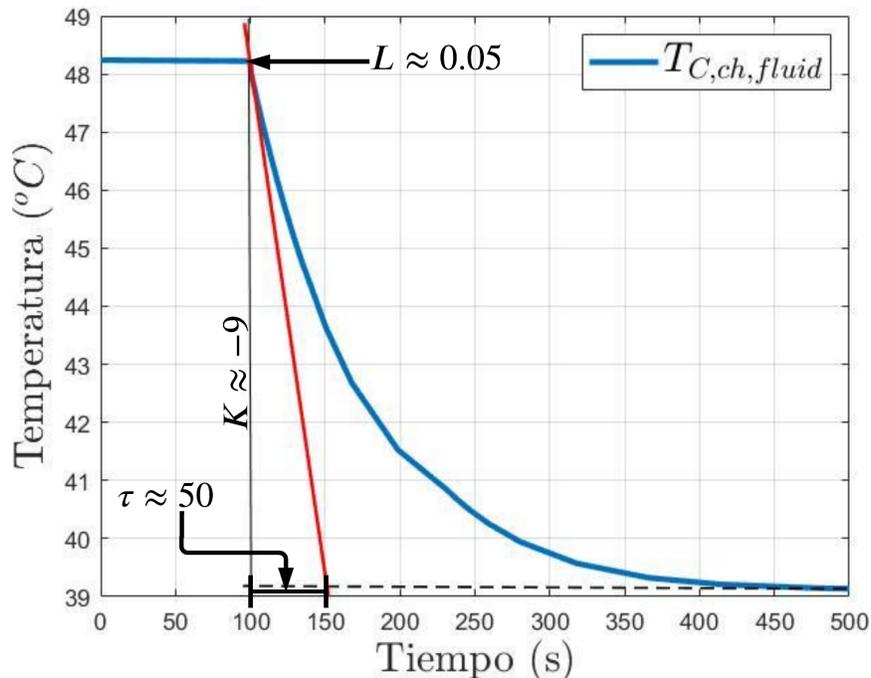


Figura 4.12: Respuesta al escalón.

Ganancias de controlador PI

Con apoyo de la Figura 4.12 se determinan los valores $L = 0,05$, $K = -9$ y $\tau = 50$ que se usan para obtener las ganancias del controlador PI.

$$K_p = 0,9 \frac{\tau}{KL} = 0,9 \frac{50}{(-9)(0,05)} = -100 \quad (4.25)$$

$$T_i = \frac{L}{0,3} = \left(\frac{0,05}{0,3} \right) = 0,166667 \quad (4.26)$$

$$K_i = K_p \frac{1}{T_i} = -600 \quad (4.27)$$

Se realizó una prueba del controlador con las ganancias encontradas y una variación en la ganancia K_i para comparar las respuestas del sistema y determinar las ganancias finales del controlador PI.

En la Figura 4.13 se muestra la respuesta ante perturbación del controlador PI con diferentes valores de K_i . La ganancia integral $K_i = -60$ brinda un tiempo de estabilización considerablemente menor a $k_i = -6$ y a $k_i = -600$.

La Figura 4.14 muestra la respuesta del sistema ante un cambio de referencia. El controlador con la ganancia integral $k_i = -60$ es quien estabiliza más rápidamente la temperatura en el valor deseado.

Así mismo se realizó una comparación de los controladores mediante índices de desempeño. Los resultados de estos índices se muestran en las Tablas 4.3 y 4.4 para la prueba ante perturbación y cambio de referencia respectivamente. Dadas las comparaciones de los controladores PI sintonizados, se determinó que las ganancias finales del controlador a implementar serían $k_p = -100$ y $K_i = -60$.

Tabla 4.3: **Índices de desempeño del controlador para rechazo a perturbaciones.**

Ki	IAE	ITAE	ISE
-600	0.09557	80.3	0.0006857
-60	0.6782	646.6	0.01967
-6	6.495	6473	0.3568

Tabla 4.4: **Índices de desempeño del controlador para cambio de referencia.**

Ki	IAE	ITAE	ISE
-600	417.9	$8,634 \times 10^4$	968.1
-60	348.1	$7,003 \times 10^4$	867.6
-6	309.1	$6,79 \times 10^4$	715.8

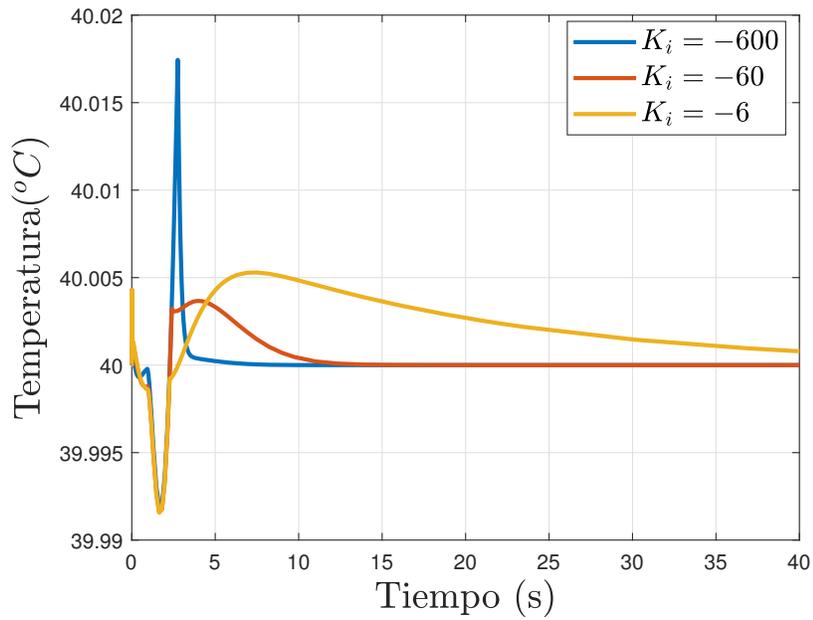


Figura 4.13: Respuesta del sistema con diferentes valores de k_i ante una perturbación.

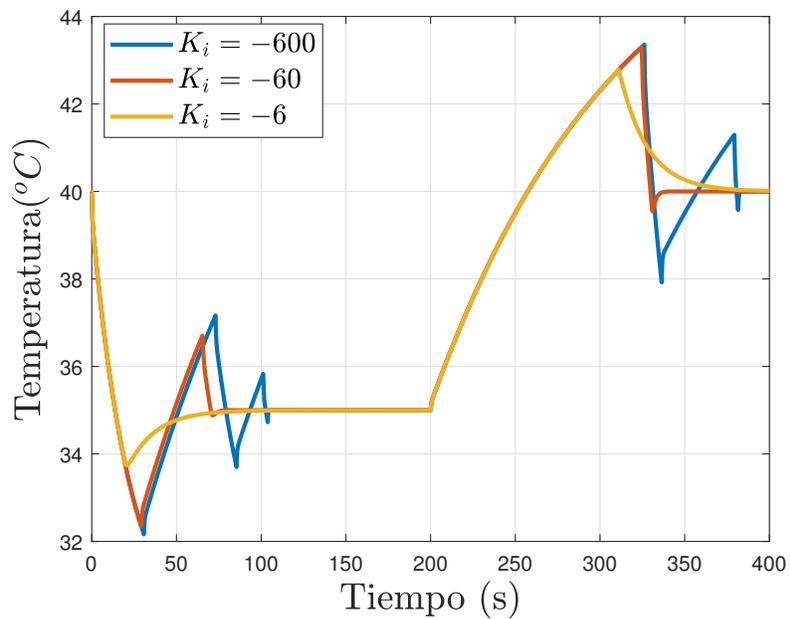


Figura 4.14: Respuesta del sistema con diferentes valores de k_i ante cambio de referencia tipo escalón.

4.2.3. Implementación del controlador PI para la regulación de temperatura de la celda en sistema PEMFC para generación de energía eléctrica

Perturbaciones por variación de corriente de carga

Se realizó la simulación del sistema con el control PI de temperatura. La referencia de temperatura se estableció en 45°C y se aplicó el perfil de corriente de carga I_{net} de la Figura 4.15.

En la Figura 4.16 se muestra la temperatura de los canales del cátodo y la membrana. El controlador PI logra mantener la temperatura en la referencia planteada y al mismo tiempo rechaza las perturbaciones provocadas por la variación de corriente.

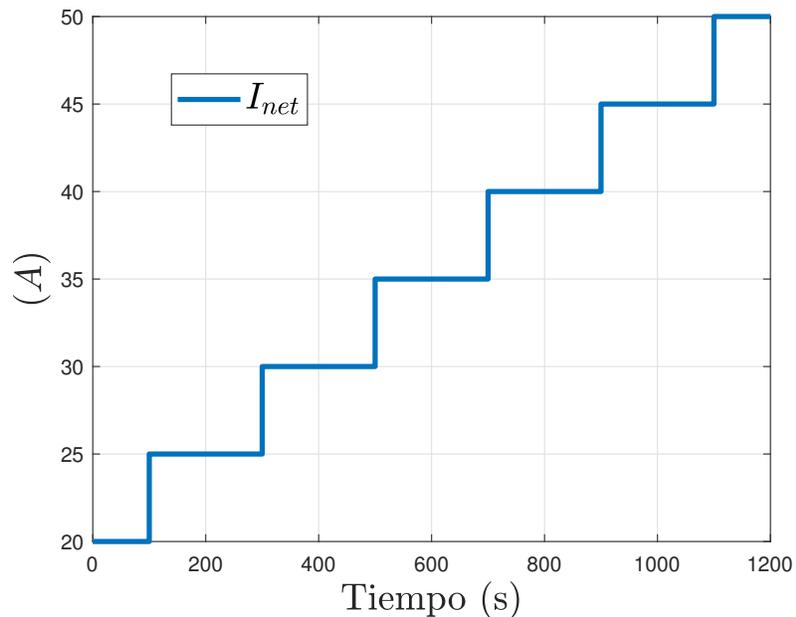


Figura 4.15: Perfil de corriente de carga en la celda de combustible.

En las Figuras 4.17 y 4.18 se muestra el voltaje de alimentación y el flujo másico del ventilador respectivamente.

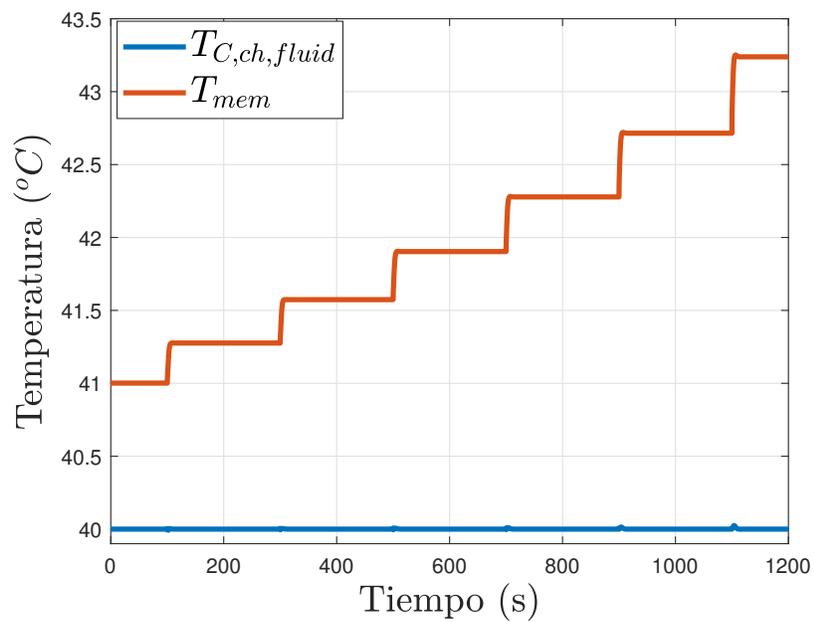


Figura 4.16: Temperatura de los canales del cátodo y la membrana de la celda.

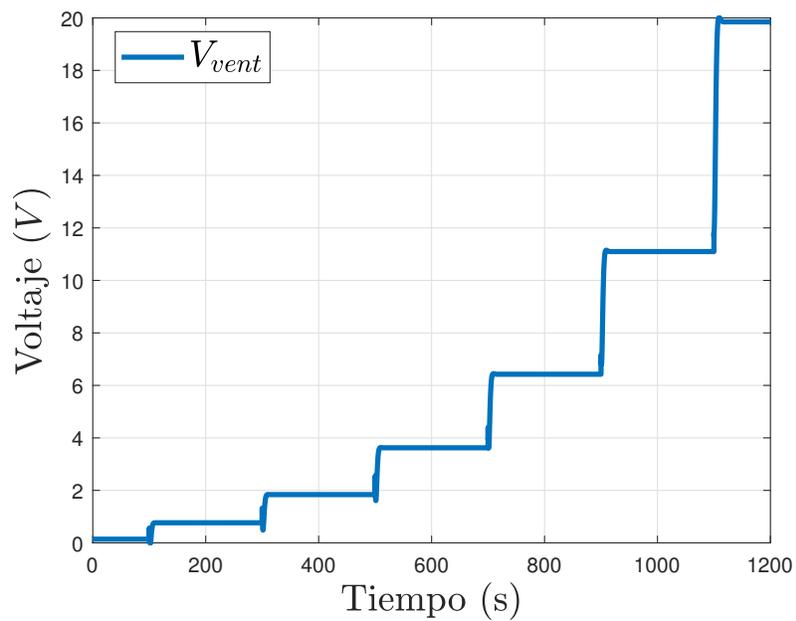


Figura 4.17: Voltaje de alimentación del ventilador.

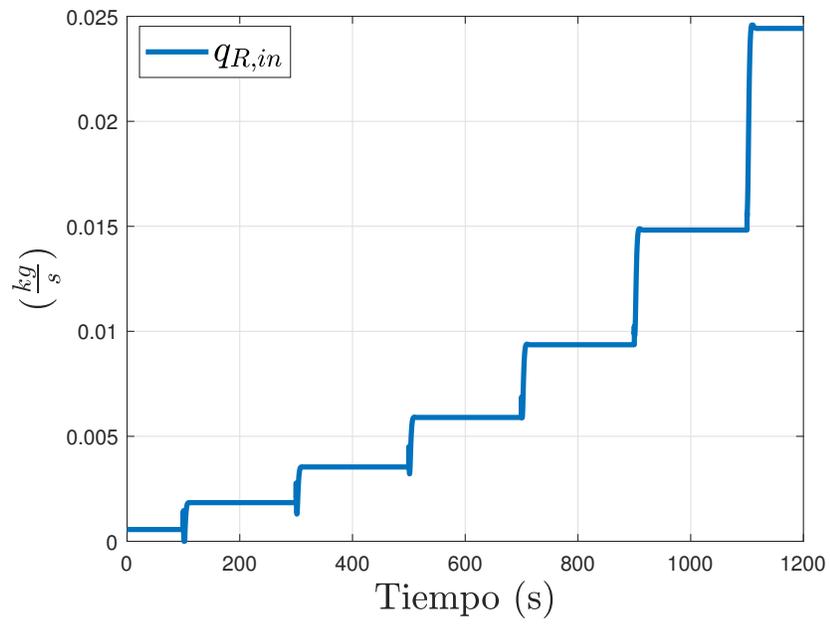


Figura 4.18: Flujo másico de aire que ingresa a los canales de enfriamiento.

Cambio de referencia

Se realizó una prueba del sistema con el controlador de temperatura donde se aplica un cambio de referencia.

El sistema se encuentra en estado estable con la referencia del control de temperatura $T_{C,ch,fluid} = 40^{\circ}C$ y una corriente de carga $I_{net} = 25 A$. En $t = 50 s$ la referencia cambia de $40^{\circ}C$ a $35^{\circ}C$ y en el segundo 250 la referencia regresa a $40^{\circ}C$.

En la Figura 4.19 se muestra la temperatura de los canales del cátodo y la membrana, Se observa que el controlador logra llegar a la referencia de $35^{\circ}C$ en aproximadamente 70 segundos, mientras que para regresar a $40^{\circ}C$ demoró aproximadamente 130 segundos. En ambos casos el sobrepaso máximo fue de aproximadamente un 60 %.

En las Figuras 4.20 y 4.21 se muestra el voltaje de alimentación y el flujo másico del ventilador, respectivamente.

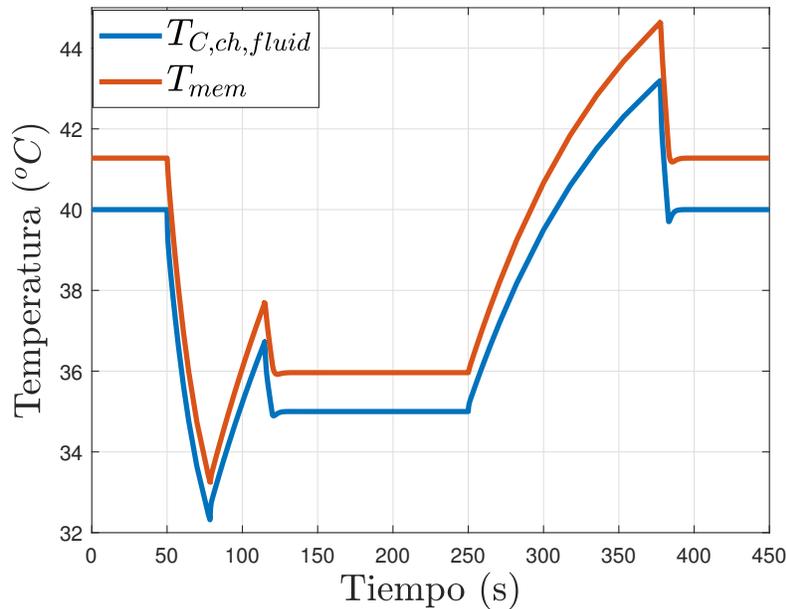


Figura 4.19: Temperatura de los canales del cátodo y la membrana de la celda.

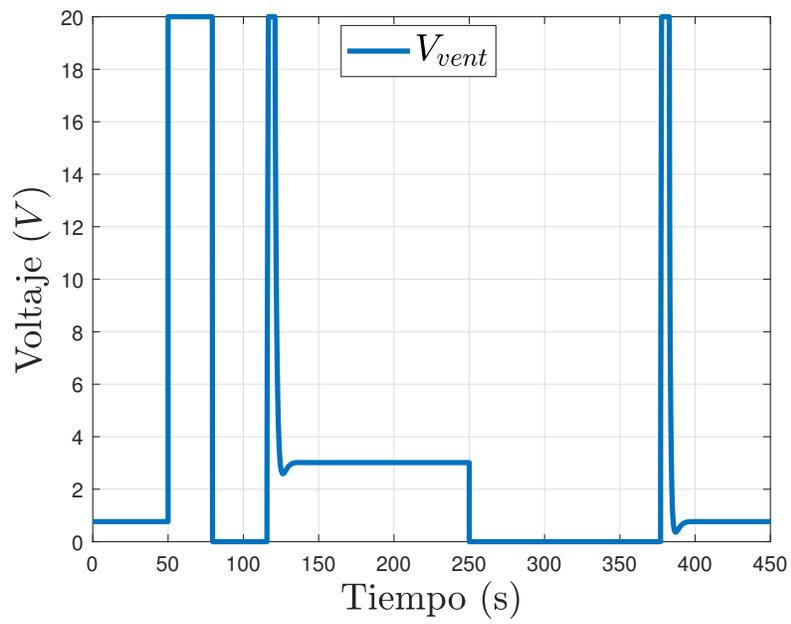


Figura 4.20: Voltaje de alimentación del ventilador.

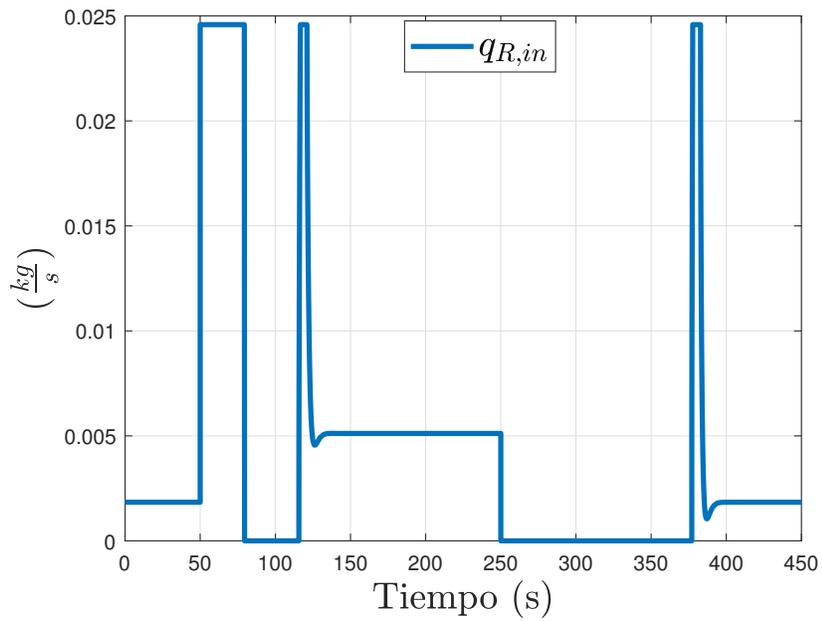


Figura 4.21: Flujo másico de aire que ingresa a los canales de enfriamiento.

Capítulo 5

Librería especializada en celdas de combustible

EL modelo multifísico de la celda de combustible y el modelo dinámico del compresor fueron programados en Matlab-Simulink. A estos se les añadieron máscaras que permiten guardar y personalizar un subsistema como bloque y agregar un cuadro de diálogo que ofrece una breve descripción de las variables disponibles que se muestra en la Figura 5.1.

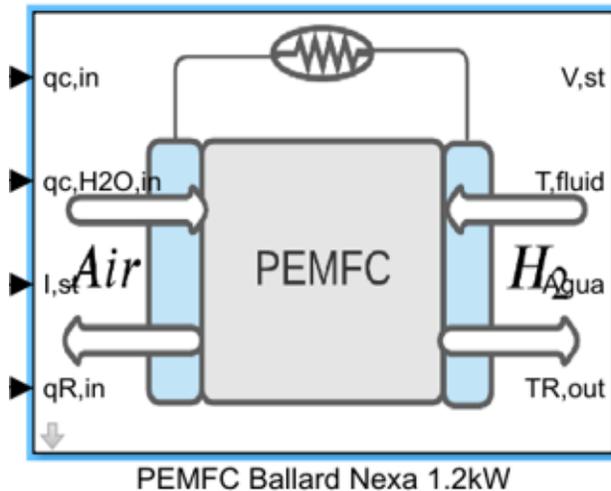


Figura 5.1: Bloque de modelo de PEMFC Ballard Nexa 1.2-kW

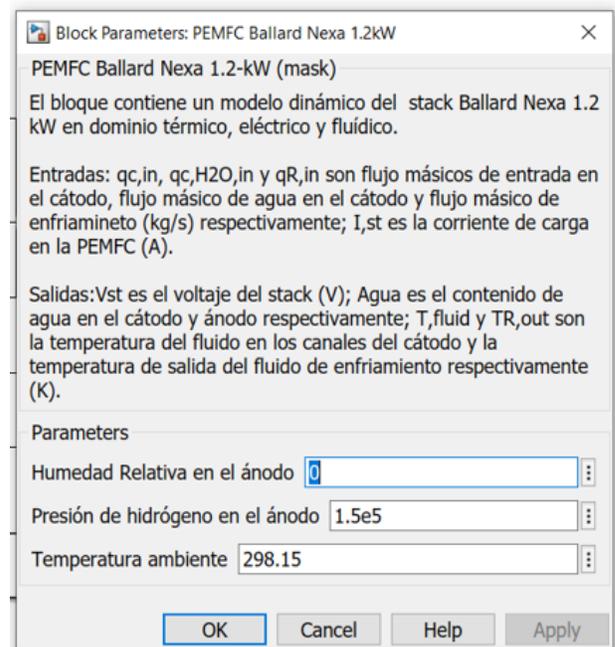


Figura 5.2: Cuadro de diálogo de bloque de PEMFC Ballard Nexa 1.2-kW

Se creó una librería especializada en celdas de combustible que contiene los modelos programados, los subsistemas de gestión térmica y de suministro de aire. La librería incluye los controladores previamente diseñados, así como componentes de otras librerías de Simulink que pueden ser útiles para formar sistemas de generación de energía mediante celdas de combustible.

En la Figura 5.1 se muestra el bloque que contiene el modelo multifísico de la celda de combustible parametrizado para un apilamiento Ballard Nexa 1.2-kW. En la Figura 5.2 se muestra el cuadro de dialogo que contiene una breve descripción de las entradas y salidas del modelo. Finalmente en la Figura 5.3 se muestra la librería creada e implementada en Simulink.

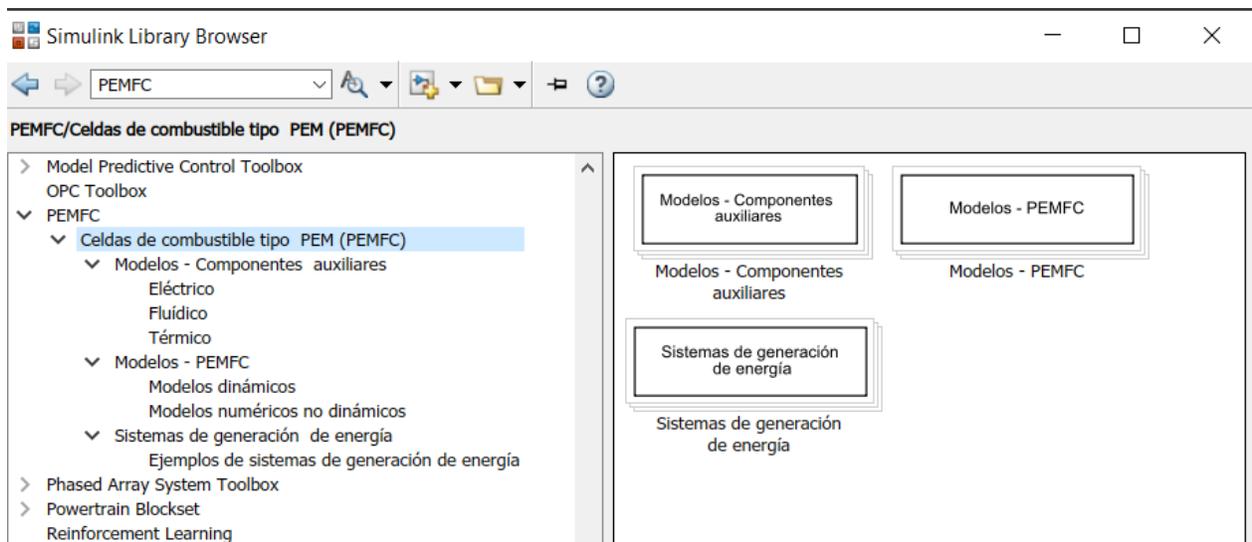


Figura 5.3: Librería de celdas de combustible en entorno Matlab-Simulink.

5.1. Elementos de librería especializada en celdas de combustible

En la Figura 5.4 se muestran los grupos propuestos para la organización de los elementos de la librería. A continuación se describen los grupos y elementos que conforman la librería especializada en celdas de combustible que se ha creado para el entorno de programación de Matlab-Simulink.

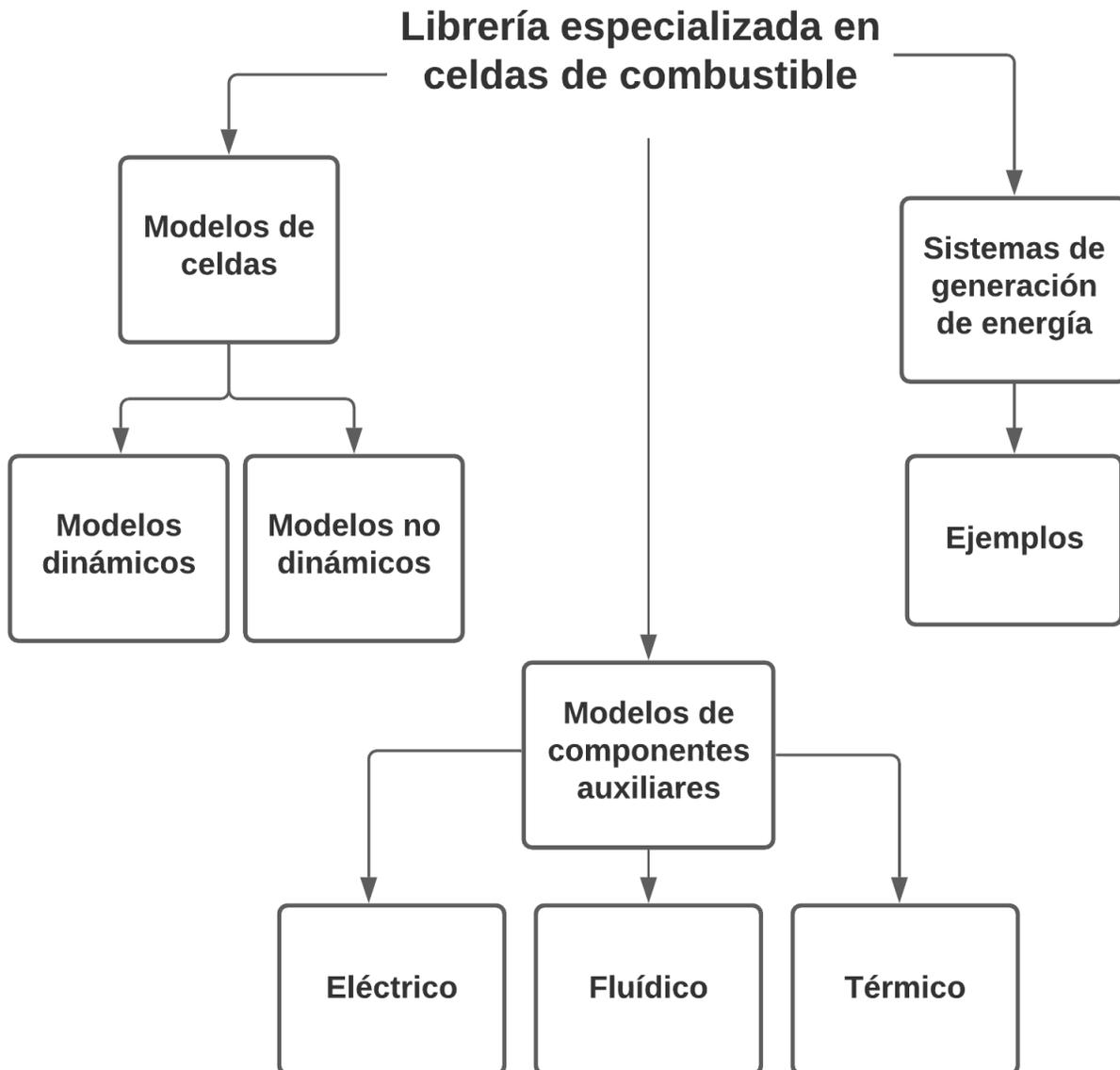


Figura 5.4: Diagrama de organización de la librería especializada en celdas de combustible.

5.1.1. Modelos de celdas de combustible

En este apartado se agrupan los modelos de celda de combustible dinámicos y numéricos. Estos corresponden a apilamientos variados que brindan la oportunidad de trabajar con sistemas de diferentes potencias.

Los modelos numéricos fueron formulados en el desarrollo de este tema de tesis para obtener las curvas de polarización corriente (A) - Voltaje (V) de la sección 3.5. Este grupo contiene el modelo multifísico de celda de combustible desarrollado en el capítulo 3, caracterizado para un apilamiento Ballard Nexa 1.2 k-W. Además de un modelo de celda existente en la librería de Matlab-Simscape.

Modelos numéricos (sin dinámica en el tiempo):

- Modelo en dominio eléctrico de monocelda de combustible tipo PEM.
- Modelo en dominio eléctrico de apilamiento Ballard Nexa 1.2 k-W.
- Modelo en dominio eléctrico de apilamiento Ballard Mark V de 5 kW.

Modelos dinámicos:

- Modelo multifísico de Ballard Nexa 1.2 k-W.
- Modelo semi-analítico de Ballard Nexa 1.2 k-W [3].
- Modelo "Fuel cell stack" de Simscape.

5.1.2. Modelos de equipos auxiliares

Este grupo contiene modelos de equipos útiles para la construcción de sistemas de energía con celdas de combustible. Estos se organizan de acuerdo al dominio con el que interactúan los subsistemas en los que se implementan.

Modelos pertenecientes al dominio eléctrico:

- Fuente de voltaje controlada - Simscape.
- Convertidor rotacional electromecánico -Simscape.
- Batería - Simscape.

Modelos pertenecientes al dominio fluídico:

- Modelo de compresor de módulo Ballard Nexa 1.2-kW [49].
- Ventilador - Simscape.
- Tubería de gas - Simscape.

Modelos pertenecientes al dominio térmico:

- Intercambiador de calor de gas - Simscape.
- Intercambiador de calor gas-gas - Simscape.
- Intercambiador de calor de líquidos térmicos - Simscape.

5.1.3. Sistemas de generación de energía

Esta sección se propuso con el fin de compartir, en un futuro, sistemas de generación de energía básicos que sirvan como ejemplos académicos. Esto con el fin de facilitar la comprensión y análisis de los subsistemas, componentes auxiliares y funcionamiento general de las celdas de combustible.

Se han añadido en este apartado a los subsistemas de gestión de aire y gestión de temperatura expuestos en el capítulo 4. Estos también contienen los sistemas de control diseñados en este documento.

Ejemplos de subsistemas de celdas de combustible:

- Subsistema de gestión de aire.
- Subsistema de gestión térmica.

Capítulo 6

Conclusiones

6.1. Conclusiones generales

El modelo matemático de celda de combustible tipo PEM, expuesto en el capítulo 3, describe el comportamiento de una celda en dominio fluídico, térmico y eléctrico a nivel de capas, éste ha sido formulado considerando los parámetros a los que se tiene acceso y la posibilidad de conexión con modelos de componentes en Matlab-Simscape que permitan construir sistemas de generación de energía.

El modelo en dominio eléctrico ha sido validado comparando curvas de polarización Corriente (A) - Voltaje (V) obtenidas al simular el modelo con las curvas de desempeño reportadas en la literatura científica [3,5-7] que proporciona información de pruebas experimentales. Esta validación se divide en tres etapas que corresponden a diferentes niveles de potencia. En la primera etapa la comparación se realizó con el desempeño de una monocelda de combustible de membrana de intercambio protónico de Nafion 117. La segunda etapa se realizó parametrizando el modelo eléctrico con un apilamiento Ballard Nexa 1.2-kW. En la tercera etapa se parametrizó el modelo eléctrico con un apilamiento Ballard Mark V de 5-kW.

En las tres etapas la respuesta del modelo en dominio eléctrico se aproximó satisfactoriamente a los valores experimentales. Estas pruebas indican que el modelo en dominio eléctrico puede ser usado para representar el comportamiento eléctrico de celdas y apilamientos (con membrana de intercambio protónico) de diferentes potencias siempre y cuando se definan adecuadamente los parámetros del sistema.

El modelo multifísico completo ha sido validado comparando valores experimentales de desempeño dinámico, reportados en la literatura científica [1], con la respuesta obtenida al simular el modelo bajo condiciones y escenarios similares. El modelo multifísico se parametrizó como un apilamiento Ballard Nexa 1.2 k-W.

La diferencia más notable entre los datos experimentales y el modelo simulado es el con-

tenido de agua en la membrana. Estos siguen una dinámica similar pero presentan un error de aproximadamente dos unidades en casi todo el tiempo de simulación. Este error puede ser debido a que no se tiene la certeza de todos los valores de las condiciones de operación en las que se realizan las pruebas experimentales.

En las pruebas realizadas, la temperatura de celda y voltaje del apilamiento que ha sido simulado es bastante similar a lo obtenido experimentalmente [1]. La mayor diferencia entre la respuesta eléctrica del modelo y los valores reportados en la literatura es menor a 1.7 voltios en el estado estacionario.

De forma general, el modelo multifísico ha logrado simular satisfactoriamente el comportamiento de monoceldas de combustible tipo PEM y el apilamiento Ballard Nexa 1.2 k-W.

Se diseñaron dos controladores para la regulación del exceso de alimentación de oxígeno λ_{O_2} de una PEMFC Ballard Nexa de 1.2-kW. El control RST y el CMI son capaces de regular λ_{O_2} en los valores de referencia impuestos durante la prueba, además de lograr el rechazo a perturbaciones provocadas por las variaciones de corriente.

Se observó que las variaciones de corriente en la celda, al operar a cargas pequeñas, representan perturbaciones de mayor amplitud para el controlador. Debido a esas grandes variaciones, es necesario que cuando la PEMFC opere en cargas bajas se considere un exceso de alimentación de oxígeno alto, para evitar que se produzcan daños en la celda.

El voltaje producido por la PEMFC logra aumentar cuando se tiene un alto exceso de alimentación de oxígeno. La implementación de un control de exceso de oxígeno permite proteger a la celda de daños provocados por la subalimentación de aire y al mismo tiempo mejorar su desempeño.

Se propuso un sistema de enfriamiento por convección forzada, mediante un ventilador, para el apilamiento Ballard Nexa 1.2 kW. El modelo del ventilador fue tomado de la librería Simscape de Matlab y parametrizado idealmente considerando el flujo necesario para regular la temperatura de la celda en su rango de operación.

Se diseñó un controlador PI para establecer una temperatura máxima de operación de la PEMFC. El controlador logra evitar que la celda de combustible supere la temperatura establecida en la referencia.

El modelo multifísico de la celda de combustible fue programado en una "S-function" de Matlab. El entorno de programación de Matlab-Simulink permitió la conexión del modelo de la celda con modelos de Simscape.

Se creó una librería especializada en celdas de combustible, que contiene elementos y

modelos útiles para el diseño de sistemas de generación de energía basados en PEMFC. Esta librería permite acceder de forma rápida y organizada a sus elementos.

6.2. Trabajos futuros

Modelo multifísico de otros apilamientos:

En la sección 4.1 el modelo en dominio eléctrico se validó para apilamientos de celdas tipo PEM de 1.2 y 5 kW. Se plantea la posibilidad de escalar el modelo multifísico a diferentes potencias, parametrizando con los valores correspondientes al apilamiento de celdas.

La actividad primordial para realizar el escalamiento de potencias radica en obtener los parámetros de la PEMFC que se busca representar y realizar las pruebas necesarias para validar la correspondencia del modelo a la celda o apilamiento de interés.

Diseño de sistemas de generación de energía basados en celdas de combustible:

El modelo multifísico presentado en esta tesis brinda la oportunidad de acceder a múltiples variables de la celda. Esto permiten la integración de diversos modelos de componentes auxiliares para construir sistemas variados de generación de energía con fines académicos.

Diseño de de sistemas de control para celdas de combustible:

El modelo descrito en el capítulo 3 brinda la oportunidad de acceder a diversos estados del sistema que representan una variable física de la celda de combustible. En este trabajo se han diseñado sistemas de control básicos para la operación de la celda, usando arquitecturas de controladores clásicos. Sin embargo, es viable usar este modelo para diseñar o poner a prueba controladores con arquitecturas y/o objetivos de control diferentes a los desarrollados en este tema de tesis.

Ampliación de librería especializada en celdas de combustible:

Integrar nuevos modelos de celdas y componentes auxiliares para incrementar las posibles aplicaciones de la librería. Buscando ser una herramienta atractiva y útil para trabajos enfocados en celdas de combustible.

Simulación en tiempo real:

Se plantea la posibilidad de simular el modelo multifísico considerando entradas de datos medidos en tiempo real. De esta forma se pretende que las pruebas de componentes y sistemas de control dirigidos a celdas de combustible puedan aproximarse a escenarios más realistas.

Desarrollo de un emulador de celdas de combustible:

Un emulador de celda combustible que sea capaz de replicar la respuesta de la PEMFC, de forma física, podría ser un elemento importante en el diseño de componentes y sistemas de control dirigidos a celdas de combustible. Este emulador podría sustituir a la celda en la realización de pruebas experimentales que involucren a variables del dominio térmico y/o eléctrico.

6.3. Aportaciones

El desarrollo de este tema de tesis tiene como producto principal un modelo multifísico de un apilamiento Ballard Nexa 1.2-kW, éste permite la integración de múltiples modelos de equipos auxiliares y acceso a variables que representan una magnitud física.

Otro producto relevante es la librería especializada en celdas de combustible para el entorno de programación Matlab-Simulink. En ella se integran modelos de celdas de combustible y otros componentes útiles para la construcción de sistemas de generación de energía basados en PEMFC. Se espera que esta librería pueda ser de utilidad en futuros trabajos relacionados con celdas de combustible.

Este tema de tesis forma parte de un proyecto, que tiene como objetivo un módulo experimental de emulación de un sistema PEMFC para el laboratorio de Cenidet. Los productos: Modelo multifísico y librería de celdas de combustible, serán implementados para su desarrollo.

En cuanto a divulgación científica, se publicó un artículo en la 6ta Jornada de Ciencia y Tecnología Aplicada (Anexo A). Donde se describe el diseño de los controladores de exeso de alimentación de oxígeno.

Bibliografía

- [1] Fengge Gao, Benjamin Blunier, and Abdellatif Miraoui. *Proton exchange membrane fuel cells modeling*. John Wiley & Sons, 2013.
- [2] Torsten Berning, DM Lu, and N Djilali. Three-dimensional computational analysis of transport phenomena in a pem fuel cell. *Journal of power sources*, 106(1-2):284–294, 2002.
- [3] Mehdi Soltani and S Mohammad Taghi Bathaee. Development of an empirical dynamic model for a nexa pem fuel cell power module. *Energy Conversion and Management*, 51(12):2492–2500, 2010.
- [4] John C Amphlett, Ronald F Mann, Brant A Peppley, Pierre R Roberge, and Aida Rodrigues. A model predicting transient responses of proton exchange membrane fuel cells. *Journal of Power sources*, 61(1-2):183–188, 1996.
- [5] Ronald F Mann, John C Amphlett, Michael AI Hooper, Heidi M Jensen, Brant A Peppley, and Pierre R Roberge. Development and application of a generalised steady-state electrochemical model for a pem fuel cell. *Journal of power sources*, 86(1-2):173–180, 2000.
- [6] Chien-Hsing Lee and Jian-Ting Yang. Modeling of the ballard-mark-v proton exchange membrane fuel cell with power converters for applications in autonomous underwater vehicles. *Journal of Power Sources*, 196(8):3810–3823, 2011.
- [7] Karthik Murugesan and Vijayachitra Senniappan. Investigation of water management dynamics on the performance of a ballard-mark-v proton exchange membrane fuel cell stack system. *International Journal of electrochemical science*, 8(6):7885–7904, 2013.
- [8] SA Dyatlov, NI Didenko, EA Ivanova, EB Soshneva, and SV Kulik. Prospects for alternative energy sources in global energy sector. In *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*, volume 434, page 012014. IOP Publishing, 2020.
- [9] IEA International Energy Agency Hydrogen. *Hydrogen posture plan*. United States Department of Energy, 2006.
- [10] The International Partnership for the Hydrogen and IPHE Fuel Cells in the Economy. Terms of reference. 2014.

- [11] Juan F. Anchondo. *Detección de Fallas en Celdas de Combustible basado en Modelos Bond Graph*. Tesis de Maestría CENIDET, 2017.
- [12] M. W. Morales. *Desarrollo de un emulador de celdas de combustible*. Tesis de Maestría, CENIDET, 2005.
- [13] L. A. Zamora E. Escobedo. *Modelado dinámico de celdas de combustible*. Tesis de Maestría, CENIDET, 2006.
- [14] S. Cruz. *Análisis y Modelado de Celdas de Combustible Tipo PEM*. Tesis de Maestría, CENIDET, 2007.
- [15] J. E. Mota. *Simulación y Control de un Sistema de Alimentación Basado en Celdas de Combustible*. Tesis de Maestría, CENIDET, 2010.
- [16] A. Cruz. *Diseño de un Esquema de Control en Aspen Plus para Simular el Balance de Planta de un Sistema de Celdas de Combustible*. Tesis de Maestría, CENIDET, 2013.
- [17] A. Castellanos. *Diseño de controladores para un simulador de un sistema de alimentación basado en celdas de combustible*. Tesis de Maestría, CENIDET, 2010.
- [18] Z Abdin, CJ Webb, and E MacA Gray. Pem fuel cell model and simulation in matlab–simulink based on physical parameters. *Energy*, 116:1131–1144, 2016.
- [19] Tabbi Wilberforce, Zaki El-Hassan, FN Khatib, Ahmed Al Makky, Ahmad Baroutaji, James G Carton, James Thompson, and Abdul G Olabi. Modelling and simulation of proton exchange membrane fuel cell with serpentine bipolar plate using matlab. *international journal of hydrogen energy*, 42(40):25639–25662, 2017.
- [20] Corey R Randall and Steven C DeCaluwe. Physically based modeling of pemfc cathode catalyst layers: Effective microstructure and ionomer structure–property relationship impacts. *Journal of Electrochemical Energy Conversion and Storage*, 17(4), 2020.
- [21] Tian Lan and Kai Strunz. Modeling of multi-physics transients in pem fuel cells using equivalent circuits for consistent representation of electric, pneumatic, and thermal quantities. *International Journal of Electrical Power & Energy Systems*, 119:105803, 2020.
- [22] Daming Zhou, Fei Gao, Ahmed Al-Durra, Elena Breaz, Alexandre Ravey, and Abdellatif Miraoui. Development of a multiphysical 2-d model of a pem fuel cell for real-time control. *IEEE Transactions on Industry Applications*, 54(5):4864–4874, 2018.
- [23] Daming Zhou, Fei Gao, Elena Breaz, Alexandre Ravey, and Abdellatif Miraoui. Tri-diagonal matrix algorithm for real-time simulation of a two-dimensional pem fuel cell model. *IEEE Transactions on Industrial Electronics*, 65(9):7106–7118, 2017.
- [24] Huicui Chen, Susan Jia, Biao Liu, and Tong Zhang. Numerical simulation of the power performance a proton exchange membrane fuel cell under dynamic loading conditions. *IEEE Access*, 6:67992–68000, 2018.

Bibliografia

- [25] Manuel Espinosa-López, Christophe Darras, Philippe Poggi, Raynal Glises, Philippe Baucour, André Rakotondrainibe, Serge Besse, and Pierre Serre-Combe. Modelling and experimental validation of a 46 kw pem high pressure water electrolyzer. *Renewable Energy*, 119:160–173, 2018.
- [26] Dongdong Zhao, Liangcai Xu, Yigeng Huangfu, Manfeng Dou, and Jianxing Liu. Semi-physical modeling and control of a centrifugal compressor for the air feeding of a pem fuel cell. *Energy Conversion and Management*, 154:380–386, 2017.
- [27] Tieqing Zhang, Kai Ou, Seunghun Jung, Byungchul Choi, and Young-Bae Kim. Dynamic analysis of a pem fuel cell hybrid system with an on-board dimethyl ether (dme) steam reformer (sr). *International Journal of Hydrogen Energy*, 43(29):13521–13531, 2018.
- [28] Sara Sigfridsson, Lixiang Li, Håkan Runvik, Jesse Gohl, Antonin Joly, and Kristian Soltész. Modeling of fuel cell hybrid vehicle in modelica: Architecture and drive cycle simulation. (148):91–98, 2019.
- [29] Sara Sigfridsson, Lixiang Li, Håkan Runvik, Jesse Gohl, Antonin Joly, and Kristian Soltész. Modeling of fuel cell hybrid vehicle in modelica: Architecture and drive cycle simulation. (148):91–98, 2019.
- [30] Raees BK Parambu, Mike Dempsey, and Alessandro Picarelli. Modelling & analysis of a fuel cell hybrid electric vehicle using real-world & standard driving conditions. (148):99–108, 2019.
- [31] Berna Sezgin, Dilara Gulcin Caglayan, Yilser Devrim, Thomas Steenberg, and Inci Eroglu. Modeling and sensitivity analysis of high temperature pem fuel cells by using comsol multiphysics. *International journal of hydrogen energy*, 41(23):10001–10009, 2016.
- [32] Kai Ou, Wei-Wei Yuan, Mihwa Choi, Seugran Yang, and Young-Bae Kim. Performance increase for an open-cathode pem fuel cell with humidity and temperature control. *International Journal of Hydrogen Energy*, 42(50):29852–29862, 2017.
- [33] Wan Ramli Wan Daud, RE Rosli, EH Majlan, SAA Hamid, Ramizi Mohamed, and Teuku Husaini. Pem fuel cell system control: A review. *Renewable Energy*, 113:620–638, 2017.
- [34] Carole Lebreton, Michel Benne, Cédric Damour, Nadia Yousfi-Steiner, Brigitte Grondin-Perez, Daniel Hissel, and Jean-Pierre Chabriat. Fault tolerant control strategy applied to pemfc water management. *International Journal of Hydrogen Energy*, 40(33):10636–10646, 2015.
- [35] Srinivasan Raman, Sathish Swaminathan, Sundaram Bhardwaj, Hemanth Kumar Tanneru, Brian Bullocks, and Raghunathan Rengaswamy. Rapid humidity regulation by mixing of dry and humid gases with feedback control for pem fuel cells. *International Journal of Hydrogen Energy*, 44(1):389–407, 2019.

- [36] Yasemin Saygili, Inci Eroglu, and Serkan Kincal. Model based temperature controller development for water cooled pem fuel cell systems. *International Journal of Hydrogen Energy*, 40(1):615–622, 2015.
- [37] Jianxing Liu, Yabin Gao, Xiaojie Su, Maxime Wack, and Ligang Wu. Disturbance-observer-based control for air management of pem fuel cell systems via sliding mode technique. *IEEE Transactions on Control Systems Technology*, 27(3):1129–1138, 2018.
- [38] Jaeyoung Han, Sangseok Yu, and Sun Yi. Adaptive control for robust air flow management in an automotive fuel cell system. *Applied energy*, 190:73–83, 2017.
- [39] Jian Chen, Zhiyang Liu, Fan Wang, Quan Ouyang, and Hongye Su. Optimal oxygen excess ratio control for pem fuel cells. *IEEE Transactions on Control Systems Technology*, 26(5):1711–1721, 2017.
- [40] Alireza Abbaspour, Kang K Yen, Parisa Forouzannezhad, and Arman Sargolzaei. Active adaptive fault-tolerant control design for pem fuel cells. pages 3616–3622, 2018.
- [41] Katsuhiko Ogata. *Ingeniería de control moderna*. Pearson Educación, 2003.
- [42] Eng Herbert Campos Gonçalves Teixeira et al. *Controles típicos de equipamentos e processos industriais*. Editora Blucher, 2010.
- [43] Andrés Morocho-Caiza, Williams Villalba-Castillo, and Iván Sinaluisa-Lozano. Desempeño entre los reguladores de control por modelo interno y pi-incremental en una planta de segundo orden. *Revista Ibérica de Sistemas e Tecnologías de Informação*, (E19):161–171, 2019.
- [44] Jorge Andrés Puerto Acosta, Liz Katherine Rincón Ardila, Edwar Jacinto Gómez, et al. Control robusto por modelo interno aplicado como laboratorio virtual a un péndulo motorizado. *Visión electrónica*, 5(1):77–88, 2011.
- [45] Bekhada Hamane, Mamadou Lamine Doumbia, Hicham Chaoui, Mohamed Bouhamida, Ahmed Chériti, Mustapha Benghanem, et al. Pi and rst control design and comparison for matrix converters using venturini modulation strategy. *Journal of Power and Energy Engineering*, 3(08):36, 2015.
- [46] Alfredo Iranzo and Pierre Boillat. Liquid water distribution patterns featuring back-diffusion transport in a pem fuel cell with neutron imaging. *International journal of hydrogen energy*, 39(30):17240–17245, 2014.
- [47] Cheng Bao, Minggao Ouyang, and Baolian Yi. Modeling and control of air stream and hydrogen flow with recirculation in a pem fuel cell system—i. control-oriented modeling. *International journal of hydrogen energy*, 31(13):1879–1896, 2006.
- [48] Carlos Bordons, Alicia Arce, and AJ Del Real. Constrained predictive control strategies for pem fuel cells. In *2006 American Control Conference*, pages 6–pp. IEEE, 2006.

Bibliografía

- [49] Carlos Andrés Ramos-Paja, Roberto Giral, Luis Martínez-Salamero, Jenny Romano, Alfonso Romero, and Giovanni Spagnuolo. A pem fuel-cell model featuring oxygen-excess-ratio estimation and power-electronics interaction. *IEEE Transactions on Industrial Electronics*, 57(6):1914–1924, 2009.

Anexo A: Artículo publicado en la 6ta Jornada de Ciencia y Tecnología Aplicada

Control por Modelo Interno del Suministro de Oxígeno de una Celda de Combustible Tipo PEM Ballard Nexa 1.2-kW

Gerardo Reyes Barragan, Guadalupe López López,
Victor M. Alvarado

*TecNM, CENIDET, Interior Internado Palmira S/N, Col. Palmim,
62490 Cuernavaca, Morelos, Mexico*

Resumen: En este artículo se presenta el diseño de un controlador por modelo interno y un controlador RST para regular el exceso de alimentación de oxígeno de una celda de combustible de membrana de intercambio protónico. El desempeño de los controladores es comparado mediante pruebas simuladas en el entorno de Matlab-Simscap. El simulador integra un sistema de generación de energía de celda de combustible con modelos de equipos auxiliares. El modelo de la celda de combustible es multifísico y describe el comportamiento del sistema en los dominios térmico, fluido y eléctrico. Este modelo permite acceder a múltiples variables y analizar el desempeño de la celda de combustible y de su interacción con equipos auxiliares.

Palabras clave: PEMFC, control por modelo interno, control RST, compresor, Ballard Nexa 1.2-kW, suministro de oxígeno.

1. INTRODUCCIÓN

La celda de combustible de membrana de intercambio protónico (PEMFC por sus siglas en inglés) es un dispositivo electroquímico que genera corriente eléctrica a partir de reacciones químicas en su interior. La PEMFC es una fuente de energía limpia, puesto que usa oxígeno e hidrógeno como gases reactivos y tiene como principales residuos, vapor de agua y calor.

Existen diversos modelos propuestos en la literatura para representar la dinámica de las celdas de combustible tipo PEM. Abidin et al. (2016) presentaron un modelo en circuito eléctrico equivalente que integra balances de materia. Wilberforce et al. (2017) desarrollaron un modelo que describe los dominios eléctrico, fluido y térmico, validado posteriormente con datos experimentales. En este mismo trabajo se obtuvieron curvas de polarización que fueron interpretadas para explicar la relación específica de algunos parámetros con la dinámica de la celda. En los artículos de Abidin et al. (2016); Wilberforce et al. (2017) se sugiere que es posible identificar las variables que afectan o mejoran el rendimiento de una PEMFC a partir de la dinámica que predicen sus modelos, de tal forma que este análisis hace posible optimizar el diseño de las celdas de combustible. Randall and DeCaluwe (2020) presentaron un modelo de PEMFC que incorpora datos de la estructura del ionómero de Nafion junto con propiedades de la capa de catalizador del cátodo. Las curvas de polarización que predice el modelo coinciden estrecha-

mente con datos experimentales. Además, los resultados sugieren que incrementar el grosor del ionómero que rodea la superficie aumenta el rendimiento de la celda de combustible debido a que resulta en una conductividad iónica mejorada. Lan and Strunz (2020) desarrollaron un modelo para reproducir los transitorios de una PEMFC debidos a procesos multifísicos que son causados por variaciones de los flujos de corriente eléctrica y gases. La respuesta transitoria del sistema se obtuvo mediante un modelo de circuito eléctrico equivalente formado por elementos eléctricos análogos a los procesos físicos del sistema, los cuales permiten mostrar la interacción entre las variables.

En resumen, Gao et al. (2012) indican que el modelado de celdas de combustible necesita la descripción de fenómenos y procesos que ocurren en los dominios físicos según las variables de interés y estudio. Estos son: dominio eléctrico, dominio fluido, y dominio térmico.

De igual forma, otros estudios sobre celdas de combustible se han centrado en la aplicación de estrategias de control para estos sistemas. Zhao et al. (2017) propusieron un controlador dinámico, con manipulación del par de carga para variar el flujo de masa de aire, y a su vez, eliminar las perturbaciones que provocan los transitorios en el compresor. Liu et al. (2018); Han et al. (2017); Chen et al. (2017); Abbaspour et al. (2018) diseñaron un control del flujo de aire o hidrógeno. Considerando los anteriores trabajos y una revisión de la literatura que fue reportada por Daud et al. (2017) se puede remarcar que el control de flujo de los gases reactivos es determinante para el

Anexo B: Programa de modelo multifísico de celda de combustible en Matlab

```

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%% Modelo dinámico multifísico de una celda de combustible tipo PEM %%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

%% PEMFC: Ballard Nexa 1.2-kW

%% Programa para "s-funtion" de Matlab-Simulink

function [sys,x0,str,ts] = celdaPEMFC(t,x,u,flag,x0)
switch flag,
    %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
    %% Initialization %%
    %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
    case 0
        s=simsizes;
        s.NumContStates=19;
        s.NumDiscStates=0;
        s.NumOutputs=8;
        s.NumInputs=8;
        s.DirFeedthrough= 1;
        s.NumSampleTimes=1;
        sys=simsizes(s);

        str=[];
        ts=[0];
        %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
        %% Derivatives %%
        %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
    case 1,
    %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
    %% Estados del modelo %%
    %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
    Tc_supp=x(1); % Temperatura de soporte sólido de canales del cátodo
    Tc_ch_fluid=x(2); % Temperatura del fluido en canales del cátodo
    Tc_ch_solid=x(3); % Temperatura de los canales en el cátodo
    Tc_GDL=x(4); % Temperatura de capa de difusión en el cátodo
    Tc_cata=x(5); % Temperatura de capa catalítica del cátodo
    T_mem=x(6); % Temperatura de la membrana de la celda
    Ta_cata=x(7); % Temperatura de capa catalítica del ánodo
    Ta_GDL=x(8); % Temperatura de capa de difusión en el ánodo
    Ta_ch_solid=x(9); % Temperatura de los canales en el ánodo
    Ta_ch_fluid=x(10); % Temperatura del fluido en canales del ánodo
    Ta_supp=x(11); % Temperatura de soporte sólido de canales del ánodo
    TR_fluid=x(12); % Temperatura del fluido de enfriamiento a la salida
    TR_solid=x(13); % Temperatura de los canales de enfriamiento
    Pc_O2_ch=x(14); % Presión parcial de oxígeno en los canales del cátodo
    Pc_N2_ch=x(15); % Presión parcial de nitrógeno en los canales del cátodo
    mc_H2O_ch=x(16); % masa de agua en los canales del cátodo
    Pa_H2_ch=x(17); % Presión parcial de hidrógeno en los canales del ánodo
    ma_H2O_ch=x(18); % masa de agua en los canales del ánodo
    Vc_act=x(19); % Sobrepotencial de activación en el cátodo

    %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
    %% Entradas %%
    %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
    Tamb=u(1); % Temperatura ambiente
    qc_tot_in=u(2); % Flujo másico que entra del lado del cátodo

```

```

qc_H2O_in=u(3); % Flujo másico de agua entra del lado del cátodo
Pa_H2_in=u(4); % Presión parcial de hidrógeno en entrada del ánodo
Pa_H2O_in=u(5); % Presión parcial de agua en entrada del ánodo
i_cell=u(6); % Corriente en la celda de combustible
qc_tot_in1=u(7); % Flujo másico que entra a canales de enfriamiento
TR=u(8); % Temperatura del fluido de enfriamiento

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%% Parámetros %%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
Va_ch=2.0172e-06;
Vc_ch=4.1489e-06;
xcN2_in=0.79;
xcO2_in=0.21;
xaH2_in=1;
rho_dry_mem=1.97e3;
A_mem=1.4758e-2;
M_mem=1;
eta_sat=2.5;
phi_GDL=0.4;
eps_GDL=1.4;
Vc_supp=4.9188e-06;
Ac_supp_exp=2.8345e-04;
Tc_ch_out=Tc_ch_fluid;
Tc_ch_in=Tamb;
deltaC_supp=5.642e-4;
V_fluid_GDL=2.3613e-06;
Cp_fluid_GDL=1000;
Rho_solid_GDL=2e3;
V_solid_GDL=3.5419e-06;
Cp_solid_GDL=8.4e2;
MN2=14e-3;
Ac_ch_solid=8.71816e-3;
DeltaS=-164;
qc_N2=0;
Cp_N2=1040;
Cp_O2=918;
Cp_mem=1.1e3;
Rho_mem=1.97e3;
V_mem=2.700714e-6;
MO2=32e-3;
CpH_mas=14300;
F=96485;
qH_mas=(MO2*i_cell)/(8*F);
Rho_fluid=1.2;
V_fluid=0.001;
Cp_fluid=1000;
Lamda_mem=0.21;
delta_mem=1.83e-4;
deltaa_supp=8.182e-4;
Aa_ch_solid=8.71816e-3;
R=8.314;
Lamda_cata=0.2;
delta_cata=6.5e-5;
A_cata=1.4758e-2;
Cp_H2O=4182;
Lambda_GDL=65;
A_GDL=1.4758e-2;

```

Anexo B

```

    delta_GDL=4e-4;
    MH2O=18e-3;
    MH2=2e-3;
    Cp_H2=14267;
    Lambda_plate=52;
    Ac_supp=1.4758e-2;
    Rho_plate=1.8336e3;
    Cp_plate=8.79e2;
    VR_solid=2.9366e-05;
    AR_ext=0.27;
    AR_solid=5.285248e-3;
    AR_fluid=9.472752e-3*47;
    AR_lateral=7.7872e-4*47;
    delta_R=3.1e-3;
    hfc_R=36;
    hR_nc_rd=10.2;
    hc_supp_nc_rd=10.2;
    hfc_c_ch=36;
    ha_supp_nc_rd=10.2;
    hc_ch_nc_rd=10.2;
    hfc_a_ch=36;
    A=1.4758e-2;
    delta=1.83e-4;
    Rho_dry_mem=1.97e3;

    %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
    %% Ecuaciones del modelo%%
    %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

    %% Canales de gas: Cátodo y ánodo
    Psat_H2Oc_ch=(10^((-1.69e-10)*(Tc_ch_fluid^4)+(3.85e-7)*(Tc_ch_fluid^3)-(3.39e-4)*
    (Tc_ch_fluid^2)+0.143*(Tc_ch_fluid)-20.92))*1e3;
    ac=(mc_H2O_ch*R*Tc_ch_fluid)/(Vc_ch*MH2O);
    if (ac<=Psat_H2Oc_ch)
        Pc_H2O_ch=ac;
    else
        Pc_H2O_ch=Psat_H2Oc_ch;
    end

    Pa_tot_in=Pa_H2_in+Pa_H2O_in;
    Psat_H2O=(10^((-1.69e-10)*(Ta_ch_fluid^4)+(3.85e-7)*(Ta_ch_fluid^3)-(3.39e-4)*
    (Ta_ch_fluid^2)+0.143*(Ta_ch_fluid)-20.92))*1e3;
    aa=(ma_H2O_ch*R*Ta_ch_fluid)/(Va_ch*MH2O);

    if (aa<=Psat_H2O)
        Pa_H2O_ch=aa;
    else
        Pa_H2O_ch=Psat_H2O;
    end

    %% GDL Cátodo
    Pc_tot_ch=Pc_H2O_ch+Pc_O2_ch+Pc_N2_ch;
    Pc_out=101325 ;
    %% Ecuaciones
    qc_O2=(MO2*i_cell)/(4*F);
    DO2_H2O=(2.82e-5)*(Pc_tot_ch/101325)*((Tc_ch_fluid/308.5)^(3/2))*(phi_GDL^eps_GDL);
    Pc_O2_cata=Pc_O2_ch-(((i_cell)/(4*F))*R*T_mem)/(DO2_H2O*A_GDL)*delta_GDL;
    Pc_GDL_O2=Pc_O2_cata;

```

```

Pc_N2_cata=Pc_N2_ch;
Pc_H2O_cata=Pc_tot_ch-Pc_O2_cata-Pc_N2_cata;

%% GDL Ánodo
Pa_tot_ch=Pa_H2O_ch+Pa_H2_ch;
qa_H2=(MH2*i_cell)/(2*F);
DH2_H2O=(9.15e-5)*(Pa_tot_ch/101325)*((Ta_ch_fluid/307.1)^(3/2))*(phi_GDL^eps_GDL);
Pa_H2_cata=Pa_H2_ch-(((i_cell)/(2*F))*R*T_mem)/(DH2_H2O*A_GDL)*delta_GDL;
Pa_GDL_H2=Pa_H2_cata;
Pa_H2O_cata=Pa_H2O_ch;

%% Membrana
%% Contenido de agua cátodo
Pcsat_H2O_cata=(10^((-1.69e-10)*(Tc_cata^4)+(3.85e-7)*(Tc_cata^3)-(3.39e-4)*(Tc_cata^2)+0.143*(Tc_cata)-20.92))*1e3;
caw=Pc_H2O_cata/Pcsat_H2O_cata;
if (caw <= 1) && (caw > 0)
    Lambda_delta=0.043+17.81*caw-39.85*(caw^2)+36*(caw^3);
elseif (caw <= 3) && (caw > 1)
    Lambda_delta=14+1.4*(caw-1);
else
    Lambda_delta=14+1.4*(caw-1);
end
%% Contenido de agua ánodo
Pasat_H2O_cata=(10^((-1.69e-10)*(Ta_cata^4)+(3.85e-7)*(Ta_cata^3)-(3.39e-4)*(Ta_cata^2)+0.143*(Ta_cata)-20.92))*1e3;
aaw=Pa_H2O_cata/Pasat_H2O_cata;
if (aaw <= 1) && (aaw > 0)
    Lambda_w=0.043+17.81*aaw-39.85*(aaw^2)+36*(aaw^3);
elseif (aaw <= 3) && (aaw > 1)
    Lambda_w=14+1.4*(aaw-1);
else
    Lambda_w=14+1.4*(aaw-1);
end
%% q_net
Lamda_bar=(Lambda_delta+Lambda_w)/2;

if (Lamda_bar < 2)
    CDlamda_w=1e-6;
elseif (Lamda_bar <= 3) && (Lamda_bar >= 2)
    CDlamda_w=(1e-6)*(1+2*(Lamda_bar-2));
elseif (Lamda_bar < 4.5) && (Lamda_bar > 3)
    CDlamda_w=(1e-6)*(3-1.67*(Lamda_bar-3));
elseif (Lamda_bar >= 4.5)
    CDlamda_w=1.25e-6;
else
    CDlamda_w=1.25e-6;
end

Dlamda_w=(1e-4)*exp(2416*((1/303)-(1/T_mem)))*CDlamda_w;
k_A=(eta_sat*MH2O*i_cell)/(22*F);
k_B=(rho_dry_mem*A_mem*Dlamda_w*MH2O)/M_mem;
if (i_cell == 0)
    qH2O_net=((k_B*(Lambda_w-Lambda_delta))/delta_mem);
else
    qH2O_net=(k_A/(exp((k_A*delta_mem)/k_B)-1))*(Lambda_w*exp((k_A*delta_mem)/k_B)-
Lambda_delta);
end

```

Anexo B

```

qc_H2O_mem=qH2O_net;
qa_H2O=qH2O_net;

%% Capa catalítica del cátodo
qc_H2O_prod=(MH2O*i_cell)/(2*F);
qc_H2O=-qc_H2O_prod-qc_H2O_mem;

qc_in=qc_tot_in-qc_H2O_in;
Ccin=xcO2_in*MO2+xcN2_in*MN2;
qc_O2_in=(qc_in*xcO2_in*MO2)/Ccin;
qc_N2_in=(qc_in*xcN2_in*MN2)/Ccin;

Pc_ch=Pc_O2_ch+Pc_N2_ch+Pc_H2O_ch;
qc_tot_out=1.4319e-08*(Pc_out-Pc_ch);

Ccout=Pc_O2_ch*MO2+Pc_N2_ch*MN2+Pc_H2O_ch*MH2O;
qc_O2_out=(qc_tot_out*Pc_O2_ch*MO2)/Ccout;
qc_N2_out=(qc_tot_out*Pc_N2_ch*MN2)/Ccout;
qc_H2O_out=(qc_tot_out*Pc_H2O_ch*MH2O)/Ccout;
dPc_O2_ch=((qc_O2_in+qc_O2_out-qc_O2)*(R*Tc_ch_fluid))/(Vc_ch*MO2);
dPc_N2_ch=((qc_N2_in+qc_N2_out-qc_N2)*(R*Tc_ch_fluid))/(Vc_ch*MN2);
dmc_H2O_ch=qc_H2O_in+qc_H2O_out-qc_H2O;

%% Capa de canales en el ánodo
qa_tot_out=0;
qa_tot_in=1.4319e-08*(Pa_tot_in-Pa_tot_ch);

Cain=xaH2_in*(Pa_tot_in-Pa_H2O_in)*MH2+Pa_H2O_in*MH2O;
Caout=Pa_H2_ch*MH2+Pa_H2O_ch*MH2O;
qa_H2_in=(qa_tot_in*xaH2_in*(Pa_tot_in-Pa_H2O_in)*MH2)/Cain;
qa_H2O_in=(qa_tot_in*Pa_H2O_in*MH2O)/Cain;
qa_H2_out=(qa_tot_out*Pa_H2_ch*MH2)/Caout;
qa_H2O_out=(qa_tot_out*Pa_H2O_ch*MH2O)/Caout;

dPa_H2_ch=((qa_H2_in+qa_H2_out-qa_H2)*R*Ta_ch_fluid)/(Va_ch*MH2);
dma_H2O_ch=(qa_H2O_in+qa_H2O_out-qa_H2O);

Lamda_barw=(Lambda_w+Lambda_delta)/2;
if (Lamda_barw<2)
    Cd_Lamda_w=1e-6;
elseif (Lamda_barw<=3) && (2<=Lamda_barw)
    Cd_Lamda_w=(1e-6)*(1+2*(Lamda_barw-2));
elseif (Lamda_barw<=4.5) && (3<=Lamda_barw)
    Cd_Lamda_w=(1e-6)*(3-1.67*(Lamda_barw-3));
elseif (Lamda_barw>=4.5)
    Cd_Lamda_w=1.25e-6;
else
    Cd_Lamda_w=1e-6;
end

Dlambda_w=1e-4*exp(2416*((1/303)-(1/T_mem)))*Cd_Lamda_w;

k_A=(eta_sat*MH2O*i_cell)/(22*F);
k_B=(Rho_dry_mem*A*Dlambda_w*MH2O)/M_mem;
alpha1=0.5193*((Lambda_w*exp((k_A*delta)/k_B)-Lambda_delta)/(exp((k_A*delta)/k_B)-1))-0.326;
alpha2=0.5193*((Lambda_delta-Lambda_w)/(exp((k_A*delta)/k_B)-1));

```

```

alpha3=exp(1268*((1/T_mem)-(1/303)));
alpha4=0.5193*Lambda_w-0.326;
alpha5=0.5193*((Lambda_delta-Lambda_w)/delta);

if (i_cell == 0)
    z_crit=(1-Lambda_w*delta)/(Lambda_delta-Lambda_w);
else
    z_crit=(k_B/k_A) * log(((1-Lambda_w)*exp((k_A*delta)/k_B)) - (1-
Lambda_delta)) / (Lambda_delta-Lambda_w));
end

    if (Lambda_w > 1) && (Lambda_delta > 1)
        Bn1=0;
        Bn2=delta;
        Delta_zdry=0;
    elseif (Lambda_w > 1) && (Lambda_delta <= 1)
        Bn1=0;
        Bn2=z_crit;
        Delta_zdry=delta-z_crit;
    elseif (Lambda_w <= 1) && (Lambda_delta > 1)
        Bn1=z_crit;
        Bn2=delta;
        Delta_zdry=z_crit;
    elseif (Lambda_w <= 1) && (Lambda_delta <= 1)
        Bn1=0;
        Bn2=0;
        Delta_zdry=delta;
    else
        Bn1=0;
        Bn2=delta;
        Delta_zdry=0;
    end

    if (i_cell == 0)
R_mem=(1/A)*(alpha3/alpha5)*(log((alpha4+alpha5*Bn2)/(alpha4+alpha5*Bn1)))+
((alpha3*Delta_zdry)/(0.1933*A));
    else
R_mem=((k_B*alpha3)/(A*k_A*alpha1))*((k_A/k_B)*(Bn2-Bn1)-log((alpha1+alpha2*exp
((k_A*Bn2)/k_B))/(alpha1+alpha2*exp((k_A*Bn1)/k_B))))+(alpha3*Delta_zdry)/(0.1933
*A));
    end

    Eo2=66000;
    beta=1.9;
    io_ref=2.416;
    Cdl=(1.5e2)*(1.4758e-2);
    n=2;
    alpha=0.5;
    R=8.314;
    F=96485;
    A=1.4758e-2;
    io=io_ref*((Pc_O2_cata/101325)^beta)*exp((-Eo2/(R*Tc_cata))*(1-(Tc_cata/298.
15)));
    etacact=((R*Tc_cata)/(alpha*n*F))*log(i_cell/(io*A));
    dotVcact=(i_cell/Cdl)*(1-(1/etacact)*Vc_act);

    %% Modelo termico
    %% Soporte del cátodo

```

Anexo B

```

%Ecuaciones
TR_out=TR_fluid;
TR_in=TR+273.15;
VR_ch=2.9366e-05;
rhoR_fluid=1.19;
Cp_R_fluid=1012;
qc_tot_out1=-qc_tot_in1;

TR_C_supp=(2*Lambda_plate*Ac_supp*delta_R*Tc_supp +
2*Lambda_plate*AR_solid*deltaC_supp*TR_solid +
hfc_R*AR_fluid*deltaC_supp*delta_R*TR_fluid)/(2*Lambda_plate*Ac_supp*delta_R +
2*Lambda_plate*AR_solid*deltaC_supp + hfc_R*AR_fluid*deltaC_supp*delta_R);
TR_A_supp=(2*Lambda_plate*Ac_supp*delta_R*Ta_supp +
2*Lambda_plate*AR_solid*deltaa_supp*TR_solid +
hfc_R*AR_fluid*delta_R*deltaa_supp*TR_fluid)/(2*Lambda_plate*Ac_supp*delta_R +
2*Lambda_plate*AR_solid*deltaa_supp + hfc_R*AR_fluid*delta_R*deltaa_supp);
QR_A_supp_fc=hfc_R*AR_fluid*(TR_A_supp-TR_fluid);
QR_C_supp_fc=hfc_R*AR_fluid*(TR_C_supp-TR_fluid);
QR_lateral=hfc_R*AR_lateral*(TR_solid-TR_fluid);
QR_in=qc_tot_in1*Cp_R_fluid*(TR_in-TR_fluid);
QR_out=qc_tot_out1*Cp_R_fluid*(TR_out-TR_fluid);
dTR_fluid=(QR_A_supp_fc+QR_C_supp_fc+QR_lateral+QR_in+QR_out)/
(rhoR_fluid*VR_ch*Cp_R_fluid);

QR_A_supp_cd=((2*Lambda_plate*AR_solid)/delta_R)*(TR_A_supp-TR_solid);
QR_C_supp_cd=((2*Lambda_plate*AR_solid)/delta_R)*(TR_C_supp-TR_solid);
QR_nc_rd=hR_nc_rd*AR_ext*(Tamb-TR_solid);
dTR_solid=(QR_A_supp_cd+QR_C_supp_cd+QR_lateral+QR_nc_rd)/
(Rho_plate*VR_solid*Cp_plate);

deltac_ch=6.858e-4;
Ac_ch_fluid=6.03984e-3;
Tc_supp_c_ch=(2*Lambda_plate*Ac_supp*deltac_ch*Tc_supp +
hfc_c_ch*Ac_ch_fluid*deltac_ch*deltaC_supp*Tc_ch_fluid +
2*Lambda_plate*Ac_ch_solid*deltaC_supp*Tc_ch_solid)/
(2*Lambda_plate*Ac_supp*deltac_ch + hfc_c_ch*Ac_ch_fluid*deltac_ch*deltaC_supp +
2*Lambda_plate*Ac_ch_solid*deltaC_supp);
Qc_supp_R=(2*Lambda_plate*Ac_supp*(TR_C_supp-Tc_supp))/deltaC_supp;
Qc_supp_c_ch=(2*Lambda_plate*Ac_supp*(Tc_supp_c_ch-Tc_supp))/deltaC_supp;
Qc_supp_nc_rd=hc_supp_nc_rd*Ac_supp_exp*(Tamb-Tc_supp);

dTc_supp=(Qc_supp_R+Qc_supp_c_ch+Qc_supp_nc_rd)/(Rho_plate*Vc_supp*Cp_plate);
Tc_ch_c_GDL=(2*Lambda_plate*Ac_ch_solid*delta_GDL*Tc_ch_solid + ((-qc_O2)*Cp_O2-
qc_H2O*Cp_H2O)*delta_GDL*deltac_ch*Tc_ch_fluid +
hfc_c_ch*Ac_ch_fluid*delta_GDL*deltac_ch*Tc_ch_fluid +
2*Lambda_GDL*A_GDL*deltac_ch*Tc_GDL + (qc_O2*Cp_O2+qc_H2O*Cp_H2O)
*delta_GDL*deltac_ch*Tc_GDL)/(2*Lambda_plate*Ac_ch_solid*delta_GDL + ((-qc_O2)
*Cp_O2-qc_H2O*Cp_H2O)*delta_GDL*deltac_ch +
hfc_c_ch*Ac_ch_fluid*delta_GDL*deltac_ch + 2*Lambda_GDL*A_GDL*deltac_ch +
(qc_O2*Cp_O2+qc_H2O*Cp_H2O)*delta_GDL*deltac_ch);

%% Canales de gas en el cátodo parte 1

Rho_ch_fluid=(MO2*Pc_O2_ch+MN2*Pc_N2_ch+MH2O*Pc_H2O_ch)/(R*Tc_ch_solid);
Vc_ch=4.1489e-06;
Cp_c_fluid=1000;
Ac_ch_lateral=6.0775e-4;

```

```

Qc_ch_c_supp_fc=hfc_c_ch*Ac_ch_fluid*(Tc_supp_c_ch-Tc_ch_fluid);
Qc_ch_c_GDL_fc=hfc_c_ch*Ac_ch_fluid*(Tc_ch_c_GDL-Tc_ch_fluid);
Qc_ch_lateral=hfc_c_ch*Ac_ch_lateral*(Tc_ch_solid-Tc_ch_fluid);
Qc_ch_in=qc_tot_in*Cp_c_fluid*(Tc_ch_in-Tc_ch_fluid);
Qc_ch_out=qc_tot_out*Cp_c_fluid*(Tc_ch_out-Tc_ch_fluid);
Qc_ch_c_GDL_mass=(-qc_O2*Cp_O2)+(-qc_N2*Cp_O2)+(-qc_H2O*Cp_H2O)*(Tc_ch_c_GDL-
Tc_ch_fluid);

dTc_fluid=
(Qc_ch_c_supp_fc+Qc_ch_c_GDL_fc+Qc_ch_lateral+Qc_ch_in+Qc_ch_out+Qc_ch_c_GDL_mass)/
(Rho_ch_fluid*Vc_ch*Cp_c_fluid);

%% Canales de gas en el cátodo parte 1
Vc_ch_solid=5.9721e-06;
Ac_ch_lateral=6.0775e-4;
Qc_ch_lateral=hfc_c_ch*Ac_ch_lateral*(Tc_ch_solid-Tc_ch_fluid);

%% Parte sólida de los canales parte 2
Ac_ch_ext=3.4455e-04;

Qc_ch_c_supp_cd=(2*Lambda_plate*Ac_ch_solid*(Tc_supp_c_ch-Tc_ch_solid))/deltac_ch;
Qc_ch_c_GDL_cd=(2*Lambda_plate*Ac_ch_solid*(Tc_ch_c_GDL-Tc_ch_solid))/deltac_ch;
Qc_ch_nc_rd=hc_ch_nc_rd*Ac_ch_ext*(Tamb-Tc_ch_solid);

dTc_solid=(Qc_ch_c_supp_cd+Qc_ch_c_GDL_cd+Qc_ch_nc_rd-Qc_ch_lateral)/
(Rho_plate*Vc_ch_solid*Cp_plate);

%% Capa de difusión en el cátodo
Rhoc_O2=(MO2*Pc_GDL_O2)/(R*Tc_GDL);
Rhoc_N2=(MN2*Pc_N2_cata)/(R*Tc_GDL);
Rhoc_H2O=(MH2O*Pc_H2O_cata)/(R*Tc_GDL);
Rho_fluid_GDL=Rhoc_O2+Rhoc_N2+Rhoc_H2O;

Tc_GDL_ccata=(2*Lambda_GDL*A_GDL*delta_cata*Tc_GDL + (qc_O2*Cp_O2+qc_H2O*Cp_H2O)
*delta_GDL*delta_cata*Tc_cata + ((-qc_O2)*Cp_O2-qc_H2O*Cp_H2O)
*delta_GDL*delta_cata*Tc_GDL + 2*Lamda_cata*A_cata*delta_GDL*Tc_cata)/
(2*Lambda_GDL*A_GDL*delta_cata + (qc_O2*Cp_O2+qc_H2O*Cp_H2O)*delta_GDL*delta_cata +
((-qc_O2)*Cp_O2-qc_H2O*Cp_H2O)*delta_GDL*delta_cata +
2*Lamda_cata*A_cata*delta_GDL);

Qc_GDL_c_ch_cd=(2*Lambda_GDL*A_GDL*(Tc_ch_c_GDL-Tc_GDL))/delta_GDL;
Qc_GDL_c_cata_cd=(2*Lambda_GDL*A_GDL*(Tc_GDL_ccata-Tc_GDL))/delta_GDL;
Qc_GDL_c_ch_mass=(qc_O2*Cp_O2+qc_N2*Cp_N2+qc_H2O*Cp_H2O)*(Tc_ch_c_GDL-Tc_GDL);
Qc_GDL_c_cata_mass=(-qc_O2*Cp_O2-qc_N2*Cp_N2-qc_H2O*Cp_H2O)*(Tc_GDL_ccata-Tc_GDL);

dTc_GDL=(Qc_GDL_c_ch_cd+Qc_GDL_c_cata_cd+Qc_GDL_c_ch_mass+Qc_GDL_c_cata_mass)/
(Rho_fluid_GDL*V_fluid_GDL*Cp_fluid_GDL+Rho_solid_GDL*V_solid_GDL*Cp_solid_GDL);

%% Capa catalitica del cátodo
Rho_cata=3.87e2;
V_cata=9.5927e-7;
Cp_cata=7.7e2;
qc_H2=(MH2*i_cell)/(2*F);
Tc_cata_mem=(2*Lamda_cata*A_cata*delta_mem*Tc_cata +
2*Lamda_mem*A_mem*delta_cata*T_mem + (qc_O2*Cp_O2+qc_N2*Cp_N2+qc_H2O*Cp_H2O)
*delta_mem*delta_cata*Tc_cata + (-qH_mas*CpH_mas+qH2O_net*Cp_H2O)
*delta_cata*delta_mem*T_mem)/(2*Lamda_cata*A_cata*delta_mem +
2*Lamda mem*A mem*delta cata + (qc O2*Cp O2+qc N2*Cp N2+qc H2O*Cp H2O)

```

Anexo B

```

*delta_mem*delta_cata + (- (qh_mas*CpH_mas+qh20_net*Cp_H2O) *delta_cata*delta_mem));

Qc_cata_cGDLcd=((2*Lamda_cata*A_cata)/(delta_cata))*(Tc_GDL_ccata-Tc_cata);
Qc_cata_memcd=((2*Lamda_cata*A_cata)/(delta_cata))*(Tc_cata_mem-Tc_cata);
Qc_cata_cGDLmass=(qc_O2*Cp_O2+qc_N2*Cp_N2+qc_H2O*Cp_H2O)*(Tc_GDL_ccata-Tc_cata);
Qc_cata_memmass=((qc_H2)*Cp_H2+qc_H2O_mem*Cp_H2O)*(Tc_cata_mem-Tc_cata);
Qc_cataint=-i_cell*((Tc_cata*DeltaS)/(2*F))+(i_cell*Vc_act);

dTc_cata=(Qc_cata_cGDLcd+Qc_cata_memcd+Qc_cata_cGDLmass+Qc_cata_memmass+Qc_cataint) /
(Rho_cata*V_cata*Cp_cata);
%% Capa catalítica del cátodo
Rho_cata=3.87e2;
V_cata=9.5927e-07;
Cp_cata=7.7e2;
qa_H2=qc_H2;

%% Membrana
T_mem_acata=(2*Lamda_mem*A_mem*delta_cata*T_mem +
2*Lamda_cata*A_cata*delta_mem*Ta_cata + (qh_mas*CpH_mas+qh20_net*Cp_H2O)
*delta_cata*delta_mem*T_mem + (qa_H2*Cp_H2-qa_H2O*Cp_H2O)
*delta_cata*delta_mem*Ta_cata)/(2*Lamda_mem*A_mem*delta_cata +
2*Lamda_cata*A_cata*delta_mem + (qh_mas*CpH_mas+qh20_net*Cp_H2O)
*delta_cata*delta_mem + (qa_H2*Cp_H2-qa_H2O*Cp_H2O)*delta_cata*delta_mem);

Q_mem_ccatacd=((2*Lamda_mem*A_mem)/(delta_mem))*(Tc_cata_mem-T_mem);
Q_mem_acatacd=((2*Lamda_mem*A_mem)/(delta_mem))*(T_mem_acata-T_mem);
Q_mem_ccatamass=- (qh_mas*CpH_mas+qh20_net*Cp_H2O) *(Tc_cata_mem-T_mem);
Q_mem_acatamass=(qh_mas*CpH_mas+qh20_net*Cp_H2O) *(T_mem_acata-T_mem);
Q_mem_int=(i_cell^2)*(R_mem);

dT_mem=(Q_mem_ccatacd+Q_mem_acatacd+Q_mem_ccatamass+Q_mem_acatamass+Q_mem_int)/
(Rho_fluid*V_fluid*Cp_fluid+Rho_mem*V_mem*Cp_mem);

%% Capa catalítica del ánodo

Ta_cata_a_GDL=((2*Lambda_GDL*A_GDL*delta_cata*Ta_GDL) +
(2*Lamda_cata*A_cata*delta_GDL*Ta_cata) + ((qa_H2*Cp_H2+qa_H2O*Cp_H2O)
*delta_cata*delta_GDL*Ta_cata) + (((-qa_H2*Cp_H2)+(-qa_H2O*Cp_H2O))
*delta_cata*delta_GDL*Ta_GDL))/((2*Lambda_GDL*A_GDL*delta_cata) +
(2*Lamda_cata*A_cata*delta_GDL) + ((qa_H2*Cp_H2+qa_H2O*Cp_H2O)
*delta_cata*delta_GDL) + (((-qa_H2*Cp_H2)+(-qa_H2O*Cp_H2O))*delta_cata*delta_GDL));

Qa_cata_mem_cd=(2*Lamda_cata*A_cata*(T_mem_acata-Ta_cata))/delta_cata;
Qa_cata_a_GDL_cd=(2*Lamda_cata*A_cata*(Ta_cata_a_GDL-Ta_cata))/delta_cata;
Qa_cata_mem_mass=(qa_H2*Cp_H2+(-qa_H2O*Cp_H2O))*(T_mem_acata-Ta_cata);
Qa_cata_a_GDL_mass=(qa_H2*Cp_H2+qa_H2O*Cp_H2O)*(Ta_cata_a_GDL-Ta_cata);

dTa_cata=(Qa_cata_mem_cd+Qa_cata_a_GDL_cd+Qa_cata_mem_mass+Qa_cata_a_GDL_mass)/
(Rho_cata*V_cata*Cp_cata);

%% Capa de difusión en el ánodo
deltaa_ch=4.318e-4;
A_a_ch_fluid=5.1755e-3;
Rhoa_H2=(MH2*Pa_GDL_H2)/(R*Ta_GDL);

Rhoa_H2O=(MH2O*Pa_H2O_cata)/(R*Ta_GDL);
Rhoa_fluid_GDL=Rhoa_H2+Rhoa_H2O;
Cp_fluid_GDL=14000;

```

```

Ta_GDL_a_ch=(2*Lambda_plate*Aa_ch_solid*delta_GDL*Ta_ch_solid + ((-qa_H2)*Cp_H2-
qa_H20*Cp_H20)*deltaa_ch*delta_GDL*Ta_ch_fluid +
hfc_a_ch*A_a_ch_fluid*deltaa_ch*delta_GDL*Ta_ch_fluid +
2*Lambda_GDL*A_GDL*deltaa_ch*Ta_GDL + (qa_H2*Cp_H2+qa_H20*Cp_H20)
*deltaa_ch*delta_GDL*Ta_GDL)/(2*Lambda_plate*Aa_ch_solid*delta_GDL + ((-qa_H2)
*Cp_H2-qa_H20*Cp_H20)*deltaa_ch*delta_GDL +
hfc_a_ch*A_a_ch_fluid*deltaa_ch*delta_GDL + 2*Lambda_GDL*A_GDL*deltaa_ch +
(qa_H2*Cp_H2+qa_H20*Cp_H20)*deltaa_ch*delta_GDL);

Qa_GDL_a_cata_cd=(2*Lambda_GDL*A_GDL*(Ta_cata_a_GDL-Ta_GDL))/delta_GDL;
Qa_GDL_a_ch_cd=(2*Lambda_GDL*A_GDL*(Ta_GDL_a_ch-Ta_GDL))/delta_GDL;
Qa_GDL_a_cata_mass=((-qa_H2*Cp_H2)+(-qa_H20*Cp_H20))*(Ta_cata_a_GDL-Ta_GDL);
Qa_GDL_a_ch_mass=(qa_H2*Cp_H2+qa_H20*Cp_H20)*(Ta_GDL_a_ch-Ta_GDL);

dTa_GDL=(Qa_GDL_a_cata_cd+Qa_GDL_a_ch_cd+Qa_GDL_a_cata_mass+Qa_GDL_a_ch_mass)/
(Rhoa_fluid_GDL*V_fluid_GDL*Cp_fluid_GDL+Rho_solid_GDL*V_solid_GDL*Cp_solid_GDL);

%% Parte solida de los canales
A_a_ch_solid=9.5825;
delta_a_ch=4.318e-4;
A_a_supp=Ac_supp;
delta_a_supp=8.182e-4;

Ta_ch_a_supp=(2*Lambda_plate*A_a_supp*delta_a_ch*Ta_supp +
hfc_a_ch*A_a_ch_fluid*delta_a_ch*delta_a_supp*Ta_ch_fluid +
2*Lambda_plate*A_a_ch_solid*delta_a_supp*Ta_ch_solid)/
(2*Lambda_plate*A_a_supp*delta_a_ch + hfc_a_ch*A_a_ch_fluid*delta_a_ch*delta_a_supp
+ 2*Lambda_plate*A_a_ch_solid*delta_a_supp);

%% Canales de gas en el cátodo parte 1
Va_ch_solid=4.1377e-06;
Aa_ch_lateral=6.0775e-4;
Qa_ch_lateral=hfc_c_ch*Aa_ch_lateral*(Ta_ch_solid-Ta_ch_fluid);

%% Parte sólida de los canales parte 2
Ac_ch_ext=2.1694e-04;

Qa_ch_c_supp_cd=(2*Lambda_plate*Aa_ch_solid*(Ta_ch_a_supp-Ta_ch_solid))/deltaa_ch;
Qa_ch_c_GDL_cd=(2*Lambda_plate*Aa_ch_solid*(Ta_GDL_a_ch-Ta_ch_solid))/deltaa_ch;
Qa_ch_nc_rd=hc_ch_nc_rd*Ac_ch_ext*(Tamb-Ta_ch_solid);

dTa_solid=(Qa_ch_c_supp_cd+Qa_ch_c_GDL_cd+Qa_ch_nc_rd-Qa_ch_lateral)/
(Rho_plate*Va_ch_solid*Cp_plate);

%% Canales de gas en el ánodo
Ta_ch_out=Ta_ch_fluid;
Ta_ch_in=Tamb;

A_a_ch_lateral=6.0775e-4;
Cp_a_fluid=14000;
Va_ch=1.7172e-06;
Rho_a_ch_fluid=(MH2*Pa_H2_ch+MH20*Pa_H20_ch)/(R*Ta_ch_fluid);

Qa_ch_A_GDL_fc=hfc_a_ch*A_a_ch_fluid*(Ta_GDL_a_ch-Ta_ch_fluid);
Qa_ch_a_supp_fc=hfc_a_ch*A_a_ch_fluid*(Ta_ch_a_supp-Ta_ch_fluid);
Qa_ch_lateral=hfc_a_ch*A_a_ch_lateral*(Ta_ch_solid-Ta_ch_fluid);
Qa_ch_in=qa_tot_in*Cp_a_fluid*(Ta_ch_in-Ta_ch_fluid);
Qa_ch_out=qa_tot_out*Cp_a_fluid*(Ta_ch_out-Ta_ch_fluid);

```

Anexo B

```
Qa_ch_a_GDL_mass=(-qa_H2)*Cp_H2-qa_H20*Cp_H20)*(Ta_GDL_a_ch-Ta_ch_fluid);

dTa_fluid=
(Qa_ch_A_GDL_fc+Qa_ch_a_supp_fc+Qa_ch_in+Qa_ch_out+Qa_ch_a_GDL_mass+Qa_ch_lateral)/
(Rho_a_ch_fluid*Va_ch*Cp_a_fluid);

%% Parte solida de los canales del ánodo
Va_supp=8.3265e-06;
deltaa_supp=8.182e-4;
A_a_supp_ext=2.8345e-04;

Qa_supp_a_ch=(2*Lambda_plate*A_a_supp*(Ta_ch_a_supp-Ta_supp))/deltaa_supp;
Qa_supp_R=(2*Lambda_plate*A_a_supp*(TR_A_supp-Ta_supp))/deltaa_supp;
Qa_supp_nc_rd=ha_supp_nc_rd*A_a_supp_ext*(Tamb-Ta_supp);

dTa_supp=(Qa_supp_a_ch+Qa_supp_R+Qa_supp_nc_rd)/(Rho_plate*Va_supp*Cp_plate);

sys=[dTc_supp;dTc_fluid;dTc_solid;dTc_GDL;dTc_cata;dT_mem;dTa_cata;dTa_GDL;
dTa_solid;dTa_fluid;dTa_supp;dTR_fluid;dTR_solid;dPc_O2_ch;dPc_N2_ch;dmc_H2O_ch;
dPa_H2_ch;dma_H2O_ch;dotVcact];

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% Outputs %
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
case 3,
    %% Estados
    Tc_supp=x(1);
    Tc_ch_fluid=x(2);
    Tc_ch_solid=x(3);
    Tc_GDL=x(4);
    Tc_cata=x(5);
    T_mem=x(6);
    Ta_cata=x(7);
    Ta_GDL=x(8);
    Ta_ch_solid=x(9);
    Ta_ch_fluid=x(10);
    Ta_supp=x(11);
    TR_fluid=x(12);
    TR_solid=x(13);
    Pc_O2_ch=x(14);
    Pc_N2_ch=x(15);
    mc_H2O_ch=x(16);
    Pa_H2_ch=x(17);
    ma_H2O_ch=x(18);
    Vc_act=x(19);

    %% Entradas
    Tamb=u(1);
    qc_tot_in=u(2);
    qc_H2O_in=u(3);
    Pa_H2_in=u(4);
    Pa_H2O_in=u(5);
    i_cell=u(6);
    qc_tot_in1=u(7);

    %% Parámetros
    R=8.314;
    F=96485;
```

```

Va_ch=1.7172e-06;
Vc_ch=4.1489e-06;
MH2O=18e-3;
M_mem=1;
eta_sat=2.5;
phi_GDL=0.4;
eps_GDL=1.5;
V_corr=0.15;
A=1.4758e-2;
delta=1.83e-4;
Rho_dry_mem=1.97e3;

%% Ecuaciones %%%
Psat_H2Oc_ch=(10^((-1.69e-10)*(Tc_ch_fluid^4)+(3.85e-7)*(Tc_ch_fluid^3)-(3.39e-4)*(Tc_ch_fluid^2)+0.143*(Tc_ch_fluid)-20.92))*1e3;
ac=(mc_H2O_ch*R*Tc_ch_fluid)/(Vc_ch*MH2O);
if (ac<=Psat_H2Oc_ch)
    Pc_H2O_ch=ac;
else
    Pc_H2O_ch=Psat_H2Oc_ch;
end

Psat_H2O=(10^((-1.69e-10)*(Ta_ch_fluid^4)+(3.85e-7)*(Ta_ch_fluid^3)-(3.39e-4)*(Ta_ch_fluid^2)+0.143*(Ta_ch_fluid)-20.92))*1e3;
aa=(ma_H2O_ch*R*Ta_ch_fluid)/(Va_ch*MH2O);

if (aa<=Psat_H2O)
    Pa_H2O_ch=aa;
else
    Pa_H2O_ch=Psat_H2O;
end

%% GDL Cátodo
delta_GDL=4e-4;
A_GDL=1.4758e-2;
Pc_tot_ch=Pc_H2O_ch+Pc_O2_ch+Pc_N2_ch;

DO2_H2O=(2.82e-5)*(Pc_tot_ch/101325)*((Tc_ch_fluid/307.5)^(3/2))*(phi_GDL^eps_GDL);
Pc_O2_cata=Pc_O2_ch-(((i_cell)/(4*F))*R*T_mem)/(DO2_H2O*A_GDL)*delta_GDL;
Pc_N2_cata=Pc_N2_ch;
Pc_H2O_cata=Pc_tot_ch-Pc_O2_cata-Pc_N2_cata;

%% GDL Ánodo
Pa_tot_ch=Pa_H2O_ch+Pa_H2_ch;
DH2_H2O=(9.15e-5)*(Pa_tot_ch/101325)*((Ta_ch_fluid/307.1)^(3/2))*(phi_GDL^eps_GDL);
Pa_H2_cata=Pa_H2_ch-(((i_cell)/(2*F))*R*T_mem)/(DH2_H2O*A_GDL)*delta_GDL;
Pa_H2O_cata=Pa_H2O_ch;

%% Membrana
%% Contenido de agua cátodo
Pcsat_H2O_cata=(10^((-1.69e-10)*(Tc_cata^4)+(3.85e-7)*(Tc_cata^3)-(3.39e-4)*(Tc_cata^2)+0.143*(Tc_cata)-20.92))*1e3;
caw=Pc_H2O_cata/Pcsat_H2O_cata;
if (caw <= 1) && (caw > 0)
    Lambda_delta=0.043+17.81*caw-39.85*(caw^2)+36*(caw^3);
elseif (caw <= 3) && (caw > 1)
    Lambda_delta=14+1.4*(caw-1);
else

```

Anexo B

```

    Lambda_delta=14+1.4*(caw-1);
end
%% Contenido de agua ánodo
Pasat_H2O_cata=(10^((-1.69e-10)*(Ta_cata^4)+(3.85e-7)*(Ta_cata^3)-(3.39e-4)*(Ta_cata^2)+0.143*(Ta_cata)-20.92))*1e3;
aaw=Pa_H2O_cata/Pasat_H2O_cata;
if (aaw <= 1) && (aaw > 0)
    Lambda_w=0.043+17.81*aaw-39.85*(aaw^2)+36*(aaw^3);
elseif (aaw <= 3) && (aaw > 1)
    Lambda_w=14+1.4*(aaw-1);
else
    Lambda_w=14+1.4*(aaw-1);
end

%% Modelo eléctrico
Ec=1.229-(0.85e-3)*(Tc_cata-298.15)+((R*Tc_cata)/(2*F))*log(sqrt(Pc_O2_cata/101325));
Lamda_barw=(Lambda_w+Lambda_delta)/2;
if (Lamda_barw<2)
    Cd_Lamda_w=1e-6;
elseif (Lamda_barw<=3) && (2<=Lamda_barw)
    Cd_Lamda_w=(1e-6)*(1+2*(Lamda_barw-2));
elseif (Lamda_barw<=4.5) && (3<=Lamda_barw)
    Cd_Lamda_w=(1e-6)*(3-1.67*(Lamda_barw-3));
elseif (Lamda_barw>=4.5)
    Cd_Lamda_w=1.25e-6;
else
    Cd_Lamda_w=1e-6;
end

Dlamba_w=1e-4*exp(2416*((1/303)-(1/T_mem)))*Cd_Lamda_w;

k_A=(eta_sat*MH2O*i_cell)/(22*F);
k_B=(Rho_dry_mem*A*Dlamba_w*MH2O)/M_mem;
alpha1=0.5193*((Lambda_w*exp((k_A*delta)/k_B)-Lambda_delta)/(exp((k_A*delta)/k_B)-1))-0.326;
alpha2=0.5193*((Lambda_delta-Lambda_w)/(exp((k_A*delta)/k_B)-1));
alpha3=exp(1268*((1/T_mem)-(1/303)));
alpha4=0.5193*Lambda_w-0.326;
alpha5=0.5193*((Lambda_delta-Lambda_w)/delta);

if (i_cell == 0)
    z_crit=(1-Lambda_w*delta)/(Lambda_delta-Lambda_w);
else
    z_crit=(k_B/k_A) * log(((1-Lambda_w)*exp((k_A*delta)/k_B)) - (1-Lambda_delta)) / (Lambda_delta-Lambda_w);
end

if (Lambda_w > 1) && (Lambda_delta > 1)
    Bn1=0;
    Bn2=delta;
    Delta_zdry=0;
elseif (Lambda_w > 1) && (Lambda_delta <= 1)
    Bn1=0;
    Bn2=z_crit;
    Delta_zdry=delta-z_crit;
elseif (Lambda_w <= 1) && (Lambda_delta > 1)
    Bn1=z_crit;

```

```

        Bn2=delta;
        Delta_zdry=z_crit;
    elseif (Lambda_w <= 1) && (Lambda_delta <= 1)
        Bn1=0;
        Bn2=0;
        Delta_zdry=delta;
    else
        Bn1=0;
        Bn2=delta;
        Delta_zdry=0;
    end

    if (i_cell == 0)
        R_mem=(1/A)*(alpha3/alpha5)*(log((alpha4+alpha5*Bn2)/(alpha4+alpha5*Bn1)))+
        ((alpha3*Delta_zdry)/(0.1933*A));
    else
        R_mem=((k_B*alpha3)/(A*k_A*alpha1))*((k_A/k_B)*(Bn2-Bn1)-log
        ((alpha1+alpha2*exp((k_A*Bn2)/k_B))/(alpha1+alpha2*exp((k_A*Bn1)/k_B))))+
        ((alpha3*Delta_zdry)/(0.1933*A));
    end
    Vc_cata=Ec-Vc_act;
    Va_cata=((R*Ta_cata)/(2*F))*log(Pa_H2_cata/101325);
    V_mem=-R_mem*i_cell;
    Vcell=Vc_cata+Va_cata+V_mem-V_corr;
    Vtot=Vcell*47;

    Pc_ch=Pc_O2_ch+Pc_N2_ch+Pc_H2O_ch;

    %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
    %% Salidas visualizadas %%
    %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
    sys=[Vtot;Lambda_delta;Lambda_w;Pc_O2_cata;Pa_H2_cata;T_mem;Tc_ch_fluid;
TR_fluid];

    case {2 4 9},
        sys=[];

    %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
    % Unexpected flags %
    %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
    otherwise
        DAStudio.error('Simulink:blocks:unhandledFlag', num2str(flag));
end

```