ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIEROS INDUSTRIALES Y DE TELECOMUNICACIÓN

UNIVERSIDAD DE CANTABRIA



Proyecto Fin de Máster

DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UNA PILA DE COMBUSTIBLE DE INTERCAMBIO PROTÓNICO (PEMFC) MEDIANTE LA HERRAMIENTA ANSYS FLUENT

(DESIGN AND SIMULATION OF A PROTON EXCHANGE MEMBRANE FUEL CELL (PEMFC) USING THE ANSYS FLUENT TOOL)

Para acceder al Título de

MÁSTER UNIVERSITARIO EN INGENIERIA INDUSTRIAL

Autor: ADRIÁN GONZÁLEZ TRUEBA

Julio - 2021

ÍNDICE

Lista de abreviaturas, siglas y símbolos3
Índice de figuras4
Índice de tablas7
1. INTRODUCCIÓN
2. OBJETIVOS
3. CONTEXTO NACIONAL 10
4. HIDROGENO
4.1 PROPIEDADES
4.2 PRODUCCIÓN
4 3 AI MACENAMIENTO 14
5. POLYMERIC ELECTROLYTE MEMBRANE EUEL CELL (PEMEC)
5.1 FUNCIONAMIENTO15
5.1 FUNCIONAMIENTO
5.1 FUNCIONAMIENTO
5.1 FUNCIONAMIENTO
5.1 FUNCIONAMIENTO 15 5.2 HISTORIA 16 5.3 ELEMENTOS 19 5.3.1 ELECTROLITO 20 5.3.2 CATALIZADOR 21
5.1 FUNCIONAMIENTO 15 5.2 HISTORIA 16 5.3 ELEMENTOS 19 5.3.1 ELECTROLITO 20 5.3.2 CATALIZADOR 21 5.3.3 GAS DIFUSION LAYER 22
5.1 FUNCIONAMIENTO 15 5.2 HISTORIA 16 5.3 ELEMENTOS 19 5.3.1 ELECTROLITO 20 5.3.2 CATALIZADOR 21 5.3.3 GAS DIFUSION LAYER 22 5.3.4 PLACAS BIPOLARES 24
5.1 FUNCIONAMIENTO 15 5.2 HISTORIA 16 5.3 ELEMENTOS 19 5.3.1 ELECTROLITO 20 5.3.2 CATALIZADOR 21 5.3.3 GAS DIFUSION LAYER 22 5.3.4 PLACAS BIPOLARES 24 5.4 CURVA DE POLARIZACIÓN 28
5.1 FUNCIONAMIENTO 15 5.2 HISTORIA 16 5.3 ELEMENTOS 19 5.3.1 ELECTROLITO 20 5.3.2 CATALIZADOR 21 5.3.3 GAS DIFUSION LAYER 22 5.3.4 PLACAS BIPOLARES 24 5.4 CURVA DE POLARIZACIÓN 28 5 E E ADUCACIONES 21
5.1 FUNCIONAMIENTO. 15 5.2 HISTORIA. 16 5.3 ELEMENTOS. 19 5.3.1 ELECTROLITO. 20 5.3.2 CATALIZADOR 21 5.3.3 GAS DIFUSION LAYER 22 5.3.4 PLACAS BIPOLARES 24 5.4 CURVA DE POLARIZACIÓN 28 5.5 APLICACIONES 31
5.1 FUNCIONAMIENTO. 15 5.2 HISTORIA. 16 5.3 ELEMENTOS. 19 5.3.1 ELECTROLITO. 20 5.3.2 CATALIZADOR 21 5.3.3 GAS DIFUSION LAYER 22 5.3.4 PLACAS BIPOLARES 24 5.4 CURVA DE POLARIZACIÓN 28 5.5 APLICACIONES 31
5.1 FUNCIONAMIENTO.155.2 HISTORIA.165.3 ELEMENTOS.195.3.1 ELECTROLITO.205.3.2 CATALIZADOR215.3.3 GAS DIFUSION LAYER225.3.4 PLACAS BIPOLARES245.4 CURVA DE POLARIZACIÓN285.5 APLICACIONES316. ESTADO DEL ARTE EN MODELADO DE PILAS DE COMBUSTIBLE TIPO PEM36
5.1 FUNCIONAMIENTO 15 5.2 HISTORIA 16 5.3 ELEMENTOS 19 5.3.1 ELECTROLITO 20 5.3.2 CATALIZADOR 21 5.3.3 GAS DIFUSION LAYER 22 5.3.4 PLACAS BIPOLARES 24 5.4 CURVA DE POLARIZACIÓN 28 5.5 APLICACIONES 31 6. ESTADO DEL ARTE EN MODELADO DE PILAS DE COMBUSTIBLE TIPO PEM 36 6.1 ESTADO DEL ARTE MODELOS CFD 37
5.1 FUNCIONAMIENTO155.2 HISTORIA165.3 ELEMENTOS195.3.1 ELECTROLITO205.3.2 CATALIZADOR215.3.3 GAS DIFUSION LAYER225.3.4 PLACAS BIPOLARES245.4 CURVA DE POLARIZACIÓN285.5 APLICACIONES316. ESTADO DEL ARTE EN MODELADO DE PILAS DE COMBUSTIBLE TIPO PEM366.1 ESTADO DEL ARTE MODELOS CFD376.2 ESTADO DEL ARTE DE MODELOS ANALÍTICOS41

7. METODOLOGÍA 44
7.1 ANSYS
7.2 MODELO TEÓRICO45
7.3 METODO MATEMÁTICO 46
7.3.1 ELECTROQUÍMICA 46
7.3.2 CONSERVACIÓN DE ESPECIES Y MASA50
7.3.3 TRANSPORTE DE AGUA51
7.3.4 ELEMENTOS ADICIONALES53
7.3.5 ECUACIONES BÁSICAS ADICIONALES54
7.3.6 PROPIEDADES
8. IMPLEMENTACIÓN57
8.1 DISEÑO PILA
8.2 IMPLEMENTACIÓN EN ANSYS69
8.3 MALLADO77
8.4 DESARROLLO SIMULACIÓN
8.4.1 CONDICIONES
8.4.2 SOLUCIÓN
8.5 RESULTADOS
8.5.1 PILA PEMFC BÁSICA96
8.5.2 PILA PEMFC CON STACK DE DOS MEMBRANAS
8.5.3 PILA PEMFC CON REFRIGERACIÓN 108
8.5.4 PILA PEMFC FINAL 114
9. CONCLUSIONES 122
10. BIBLIOGRAFÍA 123
ANEXOS

Lista de abreviaturas, siglas y símbolos

URF	Under Relaxation Factor	
PEM	Proton Exchange Membrane	
PEMFC	Proton Exchange Membrane Fuel Cell	
SOFC	Solid Oxide Fuel Cell	
MEA	Membrane Exchange Assembly	
PTFE	Politetrafluoretileno (Teflón)	
UDS	User Defined Scalar	
DM	Design Modeler	
SMR	Steam methane reforming	
ATR	Auto thermal reformed	
РОХ	Partial oxidation	
MPL	Micro porus layer	
CFD	Computer Fluid Dynamics	
APU	Auxiliary Power Units	
MCIA	Motor de combustión interna	
EPS	Emergency Power Supply	
RAPS	Remote Area Power Supply	
CPU	Central Processing Unit	

Índice de figuras

Figura 1] Elemento hidrógeno de la tabla periódica	11
Figura 2] Fuentes de producción de hidrógeno en porcentaje. Fuente: UNICAMP	12
Figura 3] Vías de producción de hidrógeno	13
Figura 4] Energía almacenada de los distintos combustibles. Fuente: Berry and La	amos
	14
Figura 5] Pila de Grove	16
Figura 6] PEMFC usada en la misión Gemini	17
Figura 7] PEMFC usada en el Programa Apolo	18
Figura 8] Honda FCX Clarity	18
Figura 9] Elementos PEMFC	19
Figura 10] Estructura del Nafion	20
Figura 11] Catalyst layer	21
Figura12] GDL comercial.	
Figura 13] Modelo 3D de un GDL	23
Figura 14] Canal tipo serpentín	25
Figura 15] Canal paralelo	25
Figura 16] Canal tipo 'pin'	26
Figura 17] Placa bipolar	27
Figura 18] curva de polarización	28
Figura 19] Ejemplo curva de potencia y de polarización	30
Figura 20] Aplicaciones del Hidrógeno	31
Figura 21] Esquemas de un ordenador que usa una celda de hidrógeno	32
Figura 22] Sistema de aire hidrógeno de Utsira	33
Figura 23] Funcionamiento de un coche con PEMFC	34
Figura 24] Mercedes-Benz Citaro Fuel Cell ecobus	35
Figura 25] Ejemplo simulación PEMFC en Simulink	42
Figura 26] Definición de las distintas UDS que usa ANSYS	44
Figura 27] Esquema pila de tipo PEMFC	45
Figura 28] Condiciones de contorno para los potenciales eléctricos	47
Figura 29] Logo Inventor	57
Figura 30] Logo ANSYS FLUENT	57
Figura 31] Diseño inventor de la placa bipolar correspondiente a la PEMFC	con
refrigeración	59
Figura 32] Medidas de la placa bipolar correspondiente a la PEMFC con refrigeració	ón 60
Figura 33] Diseño placas (GDL, catalizador y membrana)	60
Figura 34] Medidas placas (GDL, catalizador y membrana)	61
Figura 35] Diseño canal de cátodo y ánodo para PEMFC básica	62
Figura 36] Diseño canal de refrigeración	62
Figura 37] Diseño de placa bipolar para la PEMFC básica	63

Figura 38] Medidas placa bipolar para la PEMFC básica	. 63
Figura 39] Diseño canal para la pila PEMFC final	. 64
Figura 40] medidas canal para la pila PEMFC final	. 64
Figura 41] Diseño placa bipolar de la pila PEMFC final	. 65
Figura 42] Diseño placa bipolar de la pila PEMFC final (vista isométrica)	. 65
Figura 43] Diseño placa bipolar de la pila PEMFC final (vista isométrica 2)	. 66
Figura 44] Medidas de la placa bipolar para la pila PEMFC final	. 66
Figura 45] Diseño capas intermedias de la PEMFC final	. 67
Figura 46] Medidas placas intermedias para la pila PEMFC final	. 67
Figura 47] Paquetes de ANSYS	. 69
Figura 48] Secciones ANSYS FLUENT	. 70
Figura 49] Ensamblaje pila PEMFC básica	. 72
Figura 50] Estructura de un stack	. 73
Figura 51] Ensamblaje stack PEMFC de 2 membranas	. 74
Figura 52] Ensamblaje pila PEMFC con refrigeración	. 75
Figura 53] Ensamblaje pila PEMFC final	. 76
Figura 54] Elementos que componen una pila PEMFC	. 77
Figura 55] Flujos de fluidos dentro de la PEMFC	. 78
Figura 56] Características de tamaño de malla de la pila PEMFC básica	. 78
Figura 57] Mallado de la pila PEMFC simple	. 79
Figura 58] Características de tamaño de malla de la pila PEMFC con 2 membranas	. 80
Figura 59] Mallado de pila PEMFC con dos membrana	. 80
Figura 60] Características de tamaño de malla de la pila PEMFC con refrigeración	. 81
Figura 61] Mallado pila PEMFC con refrigeración	. 82
Figura 62] Características de tamaño de malla de la pila PEMFC final	. 82
Figura 63] Mallado pila PEMFC final	. 83
Figura 64] Modelos de resolución Ansys Fluent	. 84
Figura 65] Parámetros característicos introducidos en el modelo PEMFC de AN	ISYS
FLUENT	. 85
Figura 66] Aluminio	. 86
Figura 67] Platino	. 87
Figura 68] Zonas donde las UDS son resueltas en la PEMFC	. 89
Figura 69] Convergencia con las iteraciones	. 95
Figura 70] Curva de polarización para pila básica	. 96
Figura 71] Presión estática en pila básica	. 97
Figura 72] Fracción másica de H_2 en ánodo	. 98
Figura 73] Fracción másica de H_2O en ánodo	. 98
Figura 74] Fracción másica de hidrógeno en los dos canales	. 99
Figura 75] Fracción másica de O_2 en el cátodo	100
Figura 76] Fracción másica de H_2O en el cátodo	100

Figura 77] Distribución de temperaturas en pila PEMFC básica en el plano longitudinal
Figura 78] Distribución de temperaturas en la pila PEMFC basica en el plano frontal 101
Figura 79] Flujo de corriente eléctrica en pila básica102
Figura 80] Distribución de temperaturas en pila PEMFC con dos membranas 103
Figura 81] Distribución de temperaturas en pila PEMFC con dos membranas y nuevas
condiciones de contorno 104
Figura 82] Flujo de corriente eléctrica en pila con 2 membranas 105
Figura 83] Curva de polarización pila con 2 membranas 106
Figura 84] Curva de polarización de pila con refrigeración 108
Figura 85] Distribución de temperaturas en pila con canales de refrigeración (vista
longitudinal)
Figura 86] Distribución de temperaturas en pila con canales de refrigeración (vista
frontal)
Figura 87] Distribución del flujo de corriente en la pila con canales de refrigeración 111
Figura 88] Evolución de las presiones en la pila con refrigeración 112
Figura 89] Comparación curvas de polarización modelo básico, con y sin refrigeración.
Figura 90] Fracción de hidrógeno en el canal del ánodo 114
Figura 91] Evolución del hidrógeno en el canal del ánodo 115
Figura 92] Fracción de H_2O en el canal del ánodo 115
Figura 93] Evolución de la presión en el canal del ánodo 116
Figura 94] Velocidad en el ánodo 116
Figura 95] Fracción de O_2 en el cátodo 117
Figura 96] Fracción de H_2O en el cátodo 117
Figura 97] Velocidad en el canal del cátodo 118
Figura 98] Curva de polarización pila PEM final 119
Figura 99] Curva de potencia de la Pila PEMFC final120
Figura 100] Curvas características de la pila PEMFC final 120

Índice de tablas

Tabla 1] Propiedades del hidrógeno	11
Tabla 2] Características de la placa bipolar	59
Tabla 3] Tamaño de las distintas capas	61
Tabla 4] Tamaño de las distintas capas en la pila final	68
Tabla 5] Formas de añadir en DM según elemento	71
Tabla 6] Características materiales de los distintos elementos	72
Tabla 7] Formas de añadir en DM por elemento en pila con refrigeración	75
Tabla 8] Datos del mallado de la pila básica	79
Tabla 9] Datos del mallado de la pila de dos membranas	80
Tabla 10] Características de la malla de la pila con refrigeración	81
Tabla 11] Características de la malla de la PEMFC final	83
Tabla 12] Características del Aluminio	86
Tabla 13] Características GDL	86
Tabla 14] Características del catalizador	87
Tabla 15] Características extras para el catalizador del cátodo	87
Tabla 16] Características de la membrana	88
Tabla 17] Condiciones generales de la PEMFC	90
Tabla 18] Condiciones de contorno de la pila básica	91
Tabla 19] Condiciones de contorno de la pila con 2 membranas	91
Tabla 20] Condiciones de contorno pila con refrigerante	92
Tabla 21] Condiciones de contorno de la pila final	92
Tabla 22] URF	93
Tabla 23] Criterios estabilización	94
Tabla 24] Curva polarización pila básica	96
Tabla 25] Curva de polarización pila con dos membranas	106
Tabla 26] Curva de polarización tabla de la pila con refrigeración	108
Tabla 27] Curva de polarización pila final	119
Tabla 28] Características de estudio de la pila	121

1. INTRODUCCIÓN

La progresión de la demanda energética en la actualidad está aumentando cada vez más lo cual implica un incremento considerable del consumo de recursos fósiles para obtener energía y satisfacer estas necesidades, esto implica un crecimiento de los gases contaminantes emitidos a nuestro entorno, actuando en favor del calentamiento global, lo cual tiene consecuencias nocivas en nuestro planeta.

En un contexto en el que la ciudadanía se está concienciando más en el cuidado del planeta surgen nuevas tecnologías como alternativas al uso de combustibles fósiles a la hora de obtener energía o de transportarse, ya que estos modelos que vamos a estudiar se basan en el uso de hidrógeno como fuente de energía libre de contaminantes o emisiones nocivas.

Además, al ser el hidrógeno el elemento más abundante en el universo, en él radican esperanzas de ser una de las futuras fuentes de energía renovable.

Aquí es donde surge como alternativa el uso de PEMFC o pilas de combustible, el cual es un dispositivo electroquímico en el que se convierte directamente la energía química en energía eléctrica. Estas están alimentadas con hidrógeno por el ánodo y con oxígeno en el cátodo, estos reaccionan generando un flujo de electrones, con la consiguiente intensidad que eso lleva asociado.

Otras ventajas que disponen este tipo de tecnologías son que pueden funcionar a temperaturas relativamente bajas, que se puede controlar la potencia de salida y que tiene un arranque relativamente rápido.

2. OBJETIVOS

Este Trabajo Fin de Master se enmarca dentro de una de las actividades del proyecto europeo Energy Push SOE3/P3/E0865 sobre eficiencia energética de viviendas en el que participa la Universidad de Cantabria. El proyecto implementará en Cantabria un sistema híbrido de energías renovables con tecnologías de hidrógeno para el suministro autosuficiente de energía a una vivienda.

En este contexto, el objetivo del presente TFM será diseñar la etapa de generación de energía empleando hidrógeno a través de la tecnología de pila de combustible de intercambio protónico (PEMFC) mediante la herramienta de simulación ANSYS FLUENT. En este sentido, se diseñará la geometría de la pila de combustible que responda a las necesidades energéticas del proyecto, analizándose diferentes aspectos críticos como el rendimiento a través de las curvas de polarización, la distribución del H₂, O₂ y H₂O, temperatura, presión, y densidad de corriente en el ánodo como el cátodo, así como los fenómenos electroquímicos que se producen en el interior del dispositivo.

Como resultado, se dispondrá de una herramienta de simulación capaz de dimensionar y establecer configuraciones óptimas en términos económicos y técnicos que permitan llevar a cabo esta implementación con el menor coste de inversión posible.

Para alcanzar este objetivo global se establecen los siguientes objetivos parciales:

- Diseño de diferentes geometrías, comenzando por una monocelda básica con y sin refrigeración, un stack de dos celdas, y una monocelda con distribución de gases en forma de serpentín con las dimensiones para poder emplearla en el proyecto (2.5 kW).
- Importar a la herramienta 'Design Modeler' de Ansys Fluent la geometría.
- Establecer mallado adecuado.
- Determinar protocolo para la implementación en Ansys Fluent.
- Visualización y análisis de los resultados obtenidos comparándolos con los objetivos marcados por el proyecto.

3. CONTEXTO NACIONAL

Al ser su producción y consumo neutral climáticamente, no generando contaminantes, el hidrógeno es uno de los principales medios energéticos a largo plazo, teniendo como valor añadido que se puede almacenar como gas a presión o en estado líquido.

En España la medida 1.8 del Plan Nacional Integrado de Energía y clima 2021-2030 (PNIEC) [1] fomenta los gases renovables. En esta se referencia el biogás, bio-metano y el hidrogeno de origen renovable, fomentando su utilización a través de planes específicos. Asimismo, la medida 2.4 de impulso al vehículo eléctrico, incluyendo el que usa pila de combustible.

Por otro lado, el gobierno pretende impulsar el uso de gases renovables en la Ley de Cambio Climático y Transición Energética, emitida por el consejo de Ministros a las cortes el 19 de Mayo de 2020.

La estrategia para una economía española moderna y climáticamente neutra en 2050, indica cómo llegar a este objetivo de neutralidad medioambiental, mediante la reducción de gases de efecto invernadero (hasta un 90% menos que las emisiones de 1990), para esto se planean unas transformaciones en la estructura del sistema energético tanto de integración sectorial como de almacenamiento de esta energía eléctrica.

En la "Hoja de Ruta del Hidrógeno: una apuesta por el hidrógeno renovable" [2] en el marco estratégico de energía y clima, decretado por el Ministerio de transición ecológica y reto demográfico, se exploran los distintos retos del hidrógeno, con sus medidas correspondientes para superarlos, para así posicionar a España como referente tecnológico en el uso de esta tecnología y en la descarbonización de los distintos sectores en nuestra economía.

4. HIDRÓGENO

El hidrógeno es el primer elemento de la tabla periódica (número atómico es 1), además del más ligero. Su elemento molecular y más común es el H_2 . Es un elemento que abunda en nuestro planeta y el más abundante del universo (75%) [3].



Figura 1] Elemento hidrógeno de la tabla periódica [3].

4.1 PROPIEDADES

Sus propiedades químicas son las observadas en la Tabla 1.

PROPIEDAD	VALOR
Numero atómico	1
Valencia	1
Estado de oxidación	+1
Electronegatividad	2.1
Radio covalente (pm)	31
Radio iónico (Å)	2.08
Radio atómico (pm)	53
Configuración electrónica	15
Primer potencial de ionización (eV)	13.65
Masa atómica (g/mol)	1.00797
Densidad (g/ml)	0.071
Punto de ebullición (ºC)	-252.7
Punto de fusión (ºC)	-259.2

Tabla 1] Propiedades del hidrógeno.

Otras características importantes del hidrógeno es su nula toxicidad, pero alta inflamabilidad, en su combustión los residuos restantes son no contaminantes (H_2O).

4.2 PRODUCCIÓN

La producción mundial de H_2 se sitúa en torno a unos 40 millones de toneladas anuales, según datos de la Agencia Internacional de la Energía. En la actualidad prácticamente el 96% del hidrógeno mundial se produce a partir de combustibles fósiles, y más concretamente del gas natural, pero también se encuentran el petróleo, carbón, nuclear, biomasa o agua entre otras (Figura 2).



Figura 2] Fuentes de producción de hidrógeno en porcentaje. Fuente: UNICAMP.

Un inconveniente que presentan son que en la producción de hidrógeno se emite también CO_2 , y que se están utilizando como materias primas recursos agotables, de las cuales España en este caso no posee de yacimientos. Aun así, también se puede obtener hidrógeno de recursos renovables como son el agua y la biomasa.

El método más usado es el reformado con vapor del agua del metano CH_4 (SMR – "steam methane reforming") [4], este proceso tiene una eficiencia de entorno al 80%. Usando metano para la obtención de hidrógeno también existen los procesos de oxidación parcial (POX) y reformado auto térmico (ATR).

Además de estos, existen otros procesos como son los de conversión química (gasificación y pirolisis), termolíticos, electrolíticos, biológicos (fermentación de la biomasa) o procesos fotónicos (fotobiólisis y fotocatálisis).

De estos los dos primeros requieren de un aporte de energía térmica, o bien de la combustión del propio recurso que se procesa, o procedente de una fuente externa.



Figura 3] Vías de producción de hidrógeno. [4]

4.3 ALMACENAMIENTO

En cuanto al almacenamiento, Debido a su baja densidad, el hidrógeno es un gas difícil de almacenar. No obstante, existe una gran variedad de posibilidades para su almacenamiento, donde la opción más usada es en gas a presión, comprimiéndolo a unas 200 atmosferas, pero el problema es que se almacena poca energía por unidad de volumen (Figura 4).



Figura 4] Energía almacenada de los distintos combustibles. Fuente: Berry and Lamos

Aun así existen otros tipos de almacenajes en función de su utilidad, un ejemplo de esto es en forma líquida, la cual se asocia a aplicaciones aeroespaciales, esta es de difícil mantenimiento ya que se requieren temperaturas del orden de los 14-20K (temperaturas criogénicas), aunque tiene una densidad energética por unidad de volumen mucho mayor que el hidrogeno gas. Otro ejemplo es el almacenaje en hidruros, los cuales se combinan con el hidrogeno de una manera reversible en condiciones adecuadas de presión y temperatura. Permite almacenar más H_2 por unidad de volumen que con el hidrógeno líquido. Sin embargo el peso del sistema es elevado pero aún está en vías de desarrollo.

5. POLYMERIC ELECTROLYTE MEMBRANE FUEL CELL (PEMFC)

En este capítulo se describe de forma general la tecnología de pilas de combustible tipo PEMFC. En este aspecto el capítulo se ha divido en 5 secciones:

- Funcionamiento de una pila de combustible tipo PEM.
- Historia
- Elementos
- Curva de polarizacion
- Aplicaciones

5.1 FUNCIONAMIENTO

Las celdas de combustible de membrana de intercambio de protones son dispositivos electroquímicos que transforman la energía química contenida en el hidrógeno en energía eléctrica produciéndose unos productos de reacción (en este caso agua H_2O) que necesitan ser evacuados.

Para el uso de estas pilas los elementos necesarios son hidrógeno y oxígeno los cuales tienen una gran afinidad química, estos elementos se introducen a través de placas bipolares desde el exterior, el hidrógeno a la placa bipolar del ánodo y el oxígeno a la del cátodo. Tanto hidrógeno como como oxígeno están físicamente separados por una membrana.

Su funcionamiento es el siguiente:

Primero se alimenta la pila con hidrógeno en forma de gas en el ánodo y con oxígeno en el cátodo. Al llegar el primero al ánodo este se disocia en protones H^+ en presencia de un catalizador, cuya función es la de aumentar la velocidad de la reacción [5].

Debido a la membrana los protones H^+ pasan al cátodo mientras que los electrones cierran el circuito por el exterior, estos elementos reaccionan con el oxígeno del cátodo con lo que se genera electricidad, calor y vapor de agua.

En resumen las reacciones que tienen lugar en ambos lados son [5]:

Ánodo:
$$H_2 \rightarrow 2H^+ + + 2e^ E_0 = 0$$
 (1)

Cátodo:
$$\frac{1}{2} O_2 + 2H^+ + 2e^- \rightarrow H_2 O \qquad E_0 = 1.229 V$$
 (2)

Como resultado de ambas reacciones ((1) y (2)) se obtiene la siguiente reacción global (3) además de una corriente eléctrica debida al movimiento de electrones, lo que genera potencia eléctrica.

Reación global:
$$O_2 + 2H_2 \rightarrow H_2O$$
 (3)

El producto de esta reacción es agua que mediante electrólisis se puede usar para volver a generar hidrógeno y oxígeno.

Estas reacciones liberan calor el cual se evacuará a través de un determinado sistema de refrigeración.

5.2 HISTORIA

El principio de operación de las pilas de combustible es muy antiguo, descubierto por Sir William Robert Grove en el año 1839 [6], basándose en la investigación del suizo Christian F. Schnbein del año anterior [7], cuando desarrolló la 'célula de Grove', un experimento que demostraba que a través de una reacción entre hidrógeno y oxígeno existía la posibilidad de generar corriente eléctrica. El experimento consistía en cuatro celdas electroquímicas en serie, compuestas por un electrodo con hidrógeno y otro con oxígeno, separados por un electrolito de ácido sulfúrico (Figura 5).



Figura 5] Pila de Grove. [6]

No fue sin embargo hasta 1889 cuando se fraguó el término comúnmente utilizado de Pila de Combustible. En este período Ludwig Mond y Charles Langer, aspiraron a construir un prototipo, el cual permitía retener el electrolito en una matriz sólida no conductora, cuya superficie estaba cubierta por una fina capa de Platino u Oro [8].

En los inicios del siglo XX el descubrimiento del petróleo fue un problema para el desarrollo de las pilas de combustible, aun así, Nernst [9] en 1900 dedujo la ley termodinámica que rige el principio de funcionamiento de las células de combustible y,

además, fue el primer constructor de la célula de combustible de óxidos sólidos o cerámica.

Los primeros prototipos relacionados con las pilas de combustible surgieron de los ensayos llevados a cabo en 1932 por el ingeniero Francis Bacon. Sin embargo no sería hasta 1959, cuando se lograrían que Bacon y sus colaboradores lograran desarrollar un sistema de 6 kW. Esta pila era capaz de accionar una máquina de soldadura y consistía en un ánodo de níquel, un cátodo de óxido de níquel y litio, y un electrolito de hidróxido de potasio [8].

Esto abrió la puerta a las futuras investigaciones al respecto, donde a finales de los 50inicios de los 60, fue el programa aeroespacial de estados unidos el que se interesó en esta energía para misiones espaciales. Fue por esto por lo que la General Electric diseño una pila alimentada por hidrógeno usada en la misión Gemini V, la cual se muestra en la Figura 6, seguido por pilas desarrolladas por Pratt y Whitney las cuales fueron usadas en el programa Apolo (pilas de combustible para generar electricidad para comunicaciones y para el uso diario), Apolo-soyuz y Skylab.



Figura 6] PEMFC usada en la misión Gemini [10]

Fue en esta época cuando se desarrolló la tecnología de apilamiento de celdas, (MEA: Membrane Electrode Assembly), que utilizaba gran cantidad de catalizador en su construcción, lo que hizo posible en gran medida estas misiones.

La pila usada en la misión espacial del Apollo [9] mostrada en la Figura 7 podía generar una potencia de hasta 12 kW, pesaba 120 kg, llegando a medir más de 1 metro de alto.



Figura 7] PEMFC usada en el Programa Apolo [11].

La crisis de combustibles de los años 70 hizo que se aumentara más la investigación, por lo que Du Pont desarrolló las membranas de Nafion, lo que supuso la puesta en marcha de las pilas poliméricas.

A partir de este momento se probaron sistemas de pilas de combustibles en todo tipo de aplicaciones, como en coches [12], siendo en el 1993 donde Ballard comercializa el primer vehículo con pila de combustible PEM, en 2008 honda se lanzó a la carrera lanzando el FCX Clarity [13] coche basado en pila de combustible de hidrógeno (Figura 8).



Figura 8] Honda FCX Clarity [13].

Hoy en día, ya que esta es una tecnología que como producto de reacción deja agua, se está aumentando el número de investigaciones ante la demanda social de reducir el efecto invernadero y las emisiones contaminantes. La investigación de esta tecnología radica actualmente en crear unos dispositivos más duraderos, fiables y de bajo coste.

5.3 ELEMENTOS

Los elementos más importantes son:

- Membrana de intercambio de protones
- Ánodo y cátodo (placas bipolares)
- Capas difusoras (GDL)
- Catalizador.
- MEA (lo componen los catalizadores, GDLs y membrana)

Adicionalmente se incluyen elementos auxiliares de suministro de reactivos, así como sistemas de refrigeración.



Figura 9] Elementos PEMFC [14].

5.3.1 ELECTROLITO

El electrolito es una membrana de intercambio de protones semipermeable que cumple la misión de dejar el paso de los iones positivos del hidrógeno (H^+) y oponerse al paso del flujo de electrones (e^-) , obligándolos a circular por el exterior para poder cerrar el circuito eléctrico, así como de negar el paso a gases reactantes [11].

Para el correcto funcionamiento de la pila de combustible tipo PEM, la membrana debe de mantenerse hidratada en todo momento ya que los protones se transportan a través de la membrana conjuntamente con moléculas de agua. Tanto una mala hidratación como una sobre-hidratación significa un descenso de las prestaciones, si esta se deshidrata, la conductividad protónica disminuirá y si esta experimenta un exceso de hidratación se puede encharcar el cátodo impidiendo al oxígeno alcanzar el catalizador. Esto limita la temperatura de funcionamiento entorno a los 90ºC.

Uno de los electrolitos mejor conocidos y más empleados es el Nafion, un polímero perfluorado con grupos sulfonato polares [15]. Este tipo de membrana consiste en una resina termoplástica, que puede ser moldeada de diversas formas. Su composición le reporta estabilidad química. Tiene varias especificaciones Nafion m 117, Nafion m 115, Nafion m 212, Nafion m 211 en función del espesor necesario oscilando entre 25.4 µm y 254 µm.

La conductividad de este elemento es elevada $0.083 S * cm^{-1}$, estando está directamente asociada a su espesor.



Figura 10] Estructura del Nafion [16].

5.3.2 CATALIZADOR

Es la capa activa, en contacto con la membrana, formada por partículas de platino, donde se produce la catálisis por lo que están cercanas al electrolito, y así minimizar pérdidas en el transporte de iones.

El platino es un elemento costoso por lo que se usa una pequeña cantidad la cual se aplica por deposición de partículas o por cepillado con una solución de platino. Las partículas de este elemento son del orden de 1 nanómetro dispersas cada 30-40 nanómetros de la superficie porosa de carbón que actúa de soporte [17].

Esta capa debe favorecer la capacidad de difusión de los reactantes, resiliencia de los catalizadores y el nivel de hidrofobia. Para eliminar perdidas del potencial esta capa es muy delgada y al mismo tiempo maximizar el área de superficie activa de metal para lo cual las partículas de platino han de ser muy pequeñas.

Las reacciones se desarrollan en la superficie activa o catalítica, en las que participan, gases, electrones y protones. El catalizador debe estar en contacto con el ionomero ya que a través de estos circulan los electrones.

Para hacer menor el efecto de envenenamiento por monóxido de carbono se utiliza un porcentaje de rutenio además de Co y Mo sobretodo en el cátodo que también favorece la catálisis del proceso.

Se usa una carga de Pt hasta 0.05 mg/ cm^2 en el ánodo y a 0.2 mg/ cm^2 en el cátodo, sin un sobre-potencial significativo, empleando H2/Aire [15].

Las reacciones que se producen ocurren muy lentamente con lo que es necesario acelerar el proceso para garantizar el funcionamiento, por lo que estos catalizadores se encargan también de acelerar las velocidades de las semi-reacciones, sin ser consumida ni sufrir alteración química ya que estos forman compuestos intermedios que se descomponen regenerando el catalizador, con lo que hacen que la reacción siga un camino de menor energía de activación.



5.3.3 GAS DIFUSION LAYER

Esta es una capa porosa, construida típicamente de papel de carbón que se sitúa entre catalizador y placas bipolares tanto de ánodo como de cátodo. No participa activamente en las reacciones electroquímicas, pero:

- Hace llegar los gases reactivos a los electrodos, permitiéndole acceso a la capa activa, de la manera más homogénea posible, maximizando en todo momento la inter-fase de reactantes y electrodos.
- Proporciona también el camino al producto de la reacción en el cátodo, por esto mismo se usa un material hidrofóbico (PTFE) que facilita la evacuación del agua. Como contrapartida el PTFE, dificulta el transporte de oxígeno hacía el catalizador, siendo necesario así un equilibrio. A menudo esta capa es recubierta de Teflón (PTFE), para asegurar que los poros por donde se difunde el gas no se congestionen con el agua líquida. El PTFE aumenta la resistencia óhmica, su empleo no puede ser excesivo, alcanzándose valores óptimos entorno al 20% del volumen de PTFE.
- Permite que los electrones cierren el circuito eléctrico conectando la capa activa (catalizador) con las placas bipolares, con lo que el material debe ser buen conductor eléctrico para transportar los electrones hacia y desde la capa del catalizador, minimizando las pérdidas óhmicas.
- Permite la evacuación de calor hasta las placas bipolares, por lo que ha de ser buen conductor térmico.
- Sirve de soporte al MEA (Membrane Electrode Assembly, incluye tanto catalizador como membrana), por lo que ha de ser lo suficientemente rígido para soportar el MEA.

Los espesores más usados para estas capas se diseñan entre 100 μ m y 400 μ m. El uso de poros mayores a 60 μ m permite la acumulación de agua provocando dificultades en transporte de masa. La densidad de estas capas varía entre 0,21 y 0,73 g/ cm3 y la porosidad entre 70% y 80% [15].



Figura 12] GDL comercial [19].

Figura 13] Modelo 3D de un GDL [20].

5.3.4 PLACAS BIPOLARES

Placas que actúan como separadores entre celdas. Sus principales funciones características son:

- Suministran el combustible y el oxidante (por lo que ha de ser un material resistente a la oxidación y corrosión) a los centros activos de los electrodos y evacuan el agua generada en el cátodo.
- Conectan celdas eléctricamente en serie (conectan eléctricamente el ánodo de una celda y el cátodo de la adyacente) y transportan los electrones hasta las placas terminales, por lo que han de ser conductoras de electricidad.
- Separan los gases en celdas adyacentes, por lo que han de ser impermeables a los gases evitando que estos se difundan a través de si, cosa que es más complicada con el hidrógeno ya que son partículas muy pequeñas, para lo que se realizan procesos de electro deposición en materiales porosos como el grafito.
- Proporcionan integridad estructural para la pila, por lo que han de tener la resistencia y rigidez adecuada, pero además ser ligeros ya que suponen el 70-80% del peso de la pila.
- Conducen el calor de las celdas activas a los conductos de refrigeración para así disipar el calor generado por lo que deben ser buenas conductoras térmicas.

Suponen en torno al 70-80% del peso y al 60% del coste. En la actualidad, según la mayoría de los estudios, las placas bipolares tienen una vida entre 1000 y 3000 horas [15].

Para el correcto suministro del combustible se han desarrollado varias tipologías según su patrón de flujo:

• Serpentín

Esta presenta una muy buena distribución de flujo, lo que facilita la evacuación de agua pero tiene una gran pérdida de carga debido al rozamiento con los numerosos codos que posee, ya que obligan al fluido a cambiar bruscamente de dirección.

Esta tipología busca maximizar longitud de los canales garantizando un flujo elevado de gas en toda la GDL.



Figura 14] Canal tipo serpentín [21].

Paralelo

Su principal ventaja es la poca perdida de carga pero como contrapartida esta que la distribución de flujo es poco homogénea. Los canales, dispuestos en paralelo, distribuyen los gases de un extremo a otro de la celda.



Figura 15] Canal paralelo [21].

Estas dos son las configuraciones más usadas, en las que para obtener los buenos efectos de ambas se pueden combinar en placas bipolares en paralelo con múltiples canales en serpentín.

• Pin

Los canales, dispuestos en paralelo, distribuyen los gases de un extremo a otro de la celda. Los canales, dispuestos en paralelo, distribuyen los gases de un extremo a otro de la celda.



Figura 16] Canal tipo 'pin' [21].

Se pueden distribuir los gases reactantes de dos formas, el gas entrante en el ánodo circula en el mismo sentido que el cátodo (flujo paralelo) o aquel en el que el gas del ánodo circula en sentido contrario al del cátodo (flujo inverso).

Actualmente existen varios materiales que cumplen los requisitos mencionados. Algunos de los más comunes son los electrografítos (tradicionalmente impregnadas con resina o con una impregnación pirolítica la cual sella los poros), los materiales compuestos (composites de carbono-carbono, usado principalmente para pilas de altas temperaturas, o composites carbono-polímero, de bajo coste y ligero pero cuya conductividad iónica es inferior), el acero inoxidable y otros materiales metálicos, a los que se aplican tratamientos superficiales con recubrimientos especiales para evitar la corrosión y la disolución de iones ya que tienen baja resistencia a la corrosión, pero a la vez alta conductividad eléctrica e impermeabilidad de gas, dentro de estos destacan el aluminio (baja densidad y coste), titanio (baja densidad y gran resistencia a la corrosión por su capa de óxido) y níquel (solo en el caso de que esté tratado químicamente o aleado con cromo) [15].



Figura 17] Placa bipolar [22].

5.4 CURVA DE POLARIZACIÓN

Como ya hemos visto idealmente la pila es capaz de suministrar $E_0 = 1.229 V$, sin embargo a la hora de ponerla en funcionamiento se aprecia que esta tensión se ve reducida, en mayor medida cuanto mayor es la densidad de corriente.

Esto se puede apreciar en el siguiente gráfico, el cual se denomina "Curva de Polarización", las cuales siguen todos los mismos patrones siendo diferentes entre ellas para distintas temperaturas de funcionamiento o diferentes pilas. Esta curva define el funcionamiento y prestaciones de una pila de combustible, mostrando la evolución de la tensión (V) de la pila de combustible (eje Y) a medida que aumenta la intensidad de corriente (eje X) en unidades de densidad de corriente (mA. $/cm^2$).





Como se puede apreciar en esta curva, a circuito abierto, la tensión es menor a la potencia ideal lo cual nos hace pensar que existen unas perdidas incluso cuando no circula corriente a través de la pila (efecto Crossover), estas se deben al uso de combustible pero este no realiza ningún trabajo útil.

Después existe una sección en el que la tensión cae rápidamente, es la llamada región de polarización por activación, esta viene seguida por una región lineal asociada a las perdidas resistivas donde la tensión cae paulatinamente de manera lineal, para llegar a una última sección donde la tensión vuelve a caer de forma abultada debido a las perdidas por transporte de masa. Estos efectos demuestran que el comportamiento de una pila difiere del ideal en función de unos determinados parámetros [24].

Como ya hemos explicado existen 3 zonas:

• Zona de pérdidas por activación.

Esta zona se refiere a pérdidas de potencial debidas a la lentitud de la cinética de las reacciones tanto en ánodo como en cátodo. Provienen de la energía de activación de las reacciones, la cual es mucho mayor en el cátodo con el oxígeno. También tiene en cuenta las perdidas por el combustible no reaccionado. Depende principalmente del catalizador usado, en los que usando uno que aumente más la velocidad de reacción estas pérdidas disminuirían. Además si aumentas la presión (mejorando el aprovechamiento del catalizador), temperatura (aumentando así la energía total del sistema) o concentración de reactivos estas pérdidas se ven reducidas [25]. Esto corresponde a una polarización de activación o η_{act} .

• Zona de pérdidas óhmicas o resistivas

Esta zona se relaciona a las pérdidas por la resistencia de la propia pila (en las placas bipolares, electrodos, colectores...) Depende fundamentalmente de los materiales usados (capacidad de conducción de estas) y la geometría empleada.

Es una zona donde las pérdidas siguen una distribución rectilínea, la cual está asociada a la siguiente ecuación (4) básica de la electrotecnia:

$$V(V) = I(A) * R(\Omega)$$
(4)

Esta resistencia es la suma tanto de la resistencia eléctrica como de la resistencia iónica, la cual domina sobre la eléctrica. El electrolito es el elemento que mayor resistencia supone, por lo que a mayores dimensiones de esta mayor será la resistencia. Para esto se suelen usar membranas lo más finas posibles [26]. Esto corresponde a una polarización resistiva o η_{ohmn} .

• Zona de pérdidas por concentración

Esta es resultado de las limitaciones a la hora de la transferencia de materia (de oxígeno e hidrógeno) en las reacciones en los electrodos. A altas densidades de corrientes los reactivos se consumen más rápido de lo que son suministrados por lo que el potencial decae drásticamente, además de que los productos se generan también mucho más rápido pudiendo llegar a causar problemas a la hora de la evacuación de los mismos. Dependen de las estructuras de los elementos [27]. Esto corresponde a una polarización de concentración o η_{conc} .



Figura 19] Ejemplo curva de potencia y de polarización [23].

Al final el potencial real de la celda se obtiene mediante la expresión (5).

$$E_{celda} = E - \eta_{conc} - \eta_{ohmn} - \eta_{act}$$
⁽⁵⁾

5.5 APLICACIONES

Las pilas de combustible tienen un amplio número de aplicaciones en la vida cotidiana, debido a su amplio rango de especificaciones en potencias y modularidad. Desde un coche hasta una planta de cogeneración. Forman parte de varias de las aplicaciones principales del hidrógeno.



Figura 20] Aplicaciones del Hidrógeno [30].

En 2020 se alcanzó una inversión en esta tecnología de 19.2 billones de dólares, siendo Japón, Estados Unidos, Alemania, Corea del Sur y Canadá las más importantes en la actualidad [31].

Lo vamos a dividir en aplicaciones portátiles y estacionarias:

• Aplicaciones portátiles:

Estas se caracterizan por el uso de pilas de combustible pequeñas que pueden ser recargadas con pequeños cartuchos de metanol, pudiendo ser alimentados también por etanol o hidrógeno [32].

Son usadas en sustitución de las clásicas baterías para dispositivos de pequeña potencia o pequeñas luminarias portables debido a su mayor autonomía y la no necesidad de ser recargadas. Aun así, estos elementos tienen problemas de conversión de calor, obtención de energía eléctrica a bajas temperaturas, ruido y vibraciones entre otras, y esto hace que sean necesarios mayores avances para el uso de PMFC en esta aplicación.

Suelen estar entre 5 y 500W. Estas representan el 1% del mercado de pilas PEMFC entre 2008 y 2011.



Fuente www.risoe.dk/rispub/lenergy_report3/ris-r-1469_summary.pdf



• Aplicaciones estacionarias:

Representan un 70% del consumo en MW de todas las PEMFC. La eficacia y las pocas emisiones con respecto a los combustibles fósiles, lo hacen una tecnología atractiva. Estas pilas pueden ser instaladas en cualquier vivienda privada así como en plantas para suplir de energía a los procesos industriales [33].

Las pilas de combustible de alta temperatura hacen que se puedan usar para aplicaciones industriales al suministrar MW.

Son usados además como elementos de respaldo para áreas críticas o como generadores independientes para la red en sitios de difícil acceso para estas líneas eléctricas.

EPS (Emergency Power Supply)

Debido a largos tiempos de uso, tamaño compacto y capacidad de funcionar en ambientes duros, esta tecnología se está haciendo un hueco en el mercado de las telecomunicaciones. También se usa para lugares donde es necesario mantener una potencia de suministro de entre 2 y 8 kW y estas pilas se usarían en caso de fallo de la red o de bajadas de potencia.

RAPS (Remote Area Power Supply)

La ventaja del uso de pilas para estas áreas radica en el ahorro económico que se evita al no instalar líneas eléctricas. En este contexto y para un uso en viviendas se puede hacer uso de una tecnología mixta entre energía solar o fotovoltaica y el uso de pilas PEMFC.

En este contexto, surgió el primer proyecto de este sistema en la isla noruega de Utsira [34].

Está formado por 2 aerogeneradores de 600kW, electrolizador de 48kW, compresor de 5.5 kW, un tanque de almacenamiento de hidrógeno de 200 bares y una pila de combustible de 10kW, así como un motor de hidrógeno de 55kW entre otros.

Los aerogeneradores generan energía eléctrica y la excedente de las viviendas se almacena en forma de hidrógeno que más tarde se puede usar como combustible en el motor de hidrógeno o en la PEMFC que reconvierten esta energía en energía eléctrica.

Este sistema provee de autonomía 2-3 días en energía eléctrica para 10 casas. Su esquema es el correspondiente a la Figura 22.



Figura 22] Sistema de aire hidrógeno de Utsira [34].

Además de estos destacan también la pila en sistemas de cogeneración con eficiencias eléctricas de entorno al 34% y eficiencia térmica del 42%, usado por ejemplo para calentar agua de un depósito.

Este sistema está siendo investigando en España por investigadores de la Universidad CEU Cardenal Herrera.

• Aplicaciones transporte

Las nuevas legislaciones ambientales están impulsando a muchas marcas automovilísticas a renovar su gama de vehiculas por una con menos emisiones, sustituyendo así los que producen grandes emisiones. Unas de las que ya poseen prototipos de vehículo con esta tecnología son General Motors, Ford, Chrysler, Toyota u Honda, e incluso existen diversos proyectos para llevar coches propulsados por hidrógeno al Dakar en futuros años.

Usando hidrógeno obtenido a través de gas natural se reduce la cantidad de emisiones de dióxido de carbono en un 72% con respecto a los motores de combustión interna de gasolina.

Para esta aplicación las PEMFC son una tecnología muy adecuada ya que alcanza las temperaturas de operación relativamente rápido y se obtiene una eficacia mucho mayor que la de un MCIA. También se puede usar el hidrógeno para impulsar vehículos por medio de motores de combustión interna y pequeñas turbinas de gas [35] [12].



Figura 23] Funcionamiento de un coche con PEMFC [35].

También son usadas como APU (Auxiliary power Units) que básicamente se usan para reducir el consumo de energía total del vehículo. Esta energía va destinada a aire acondicionado, refrigeración, multimedia, luces o comunicación por ejemplo. Estas tecnologías son usadas en amplios rangos de vehículos, como pueden ser desde vehículos ligeros hasta autobuses (Figura 24) y grandes vehículos, pero no solo son usadas para automoción sino también para barcos o aviones.



Figura 24] Mercedes-Benz Citaro Fuel Cell ecobus [35].
6. ESTADO DEL ARTE EN MODELADO DE PILAS DE COMBUSTIBLE TIPO PEM

En cuanto al estado del arte del modelado de pilas PEM, destacan dos vertientes las cuales vamos a analizar en este apartado. La primera de ellas consiste en los modelos CFD de dinámica de fluidos computacional, los cuales tienen un alto potencial, ya que se obtienen resultados locales en 3D o 2D, de las variables implicadas. Sin embargo requieren un alto coste computacional por lo que la mayoría de estudios aplicados con este método analizan unas determinadas variables para una única celda de combustible 3D, en vez de un stack con varias celdas.

De hecho, autores como S. Shimpalee [36] llegaron a simular un stack de 6 celdas con 4.8 millones de nodos en la malla a través de una metodología CFD. En este trabajo se simula un modelo de un stack de 6 celdas analizando la densidad de corriente, así como las distribuciones de temperatura por celda. Esto nos hace ver el alto coste computacional que estos programas pueden llegar a alcanzar y nos justifica el porqué del amplio número de estudios de una celda en contraposición a la cantidad de estudios con varias celdas.

El segundo tipo de modelados que vamos a analizar son los modelados de pilas de combustible PEM mediante modelos analíticos y semi-analíticos, los cuales requieren menos esfuerzos computacionales a la hora de llegar a una solución, por lo que esta más generalizado los estudios de varias celdas sobre una celda en comparación con la metodología CFD, además pueden abarcar un mayor grado de complejidad abarcando múltiples efectos. Son simulaciones perfectas para realizar pre diseños y comprobar ciertos tipos de parámetros. Aun así, estos métodos obtienen como resultado valores medios, con lo que la información es bastante más limitada que en las simulaciones con dinámica de fluidos computacional.

Los dos métodos son totalmente complementarios. Los primeros abarcan programas como pueden ser ANSYS FLUENT, STAR-CD o COMSOL, mientras que los métodos analíticos o semi-analíticos abarcan programas como pueden ser MATLAB-SIMULINK o ADVISOR.

Teniendo en cuenta la dimensionalidad como ya se ha comentado pueden ser de 2 o 3 dimensiones e incluso realizar discretizaciones 1D para determinadas variables en un punto en concreto.

6.1 ESTADO DEL ARTE MODELOS CFD

La dinámica de fluidos computacional conocida por CFD se basa en la resolución numérica de las ecuaciones que gobiernan el flujo de fluidos, transferencia de calor y fenómenos relacionados tales como reacciones químicas, combustión etc.

El elemento (volumen de control) a analizar se subdivide en celdas y nodos, formando el mallado, donde el conjunto de ecuaciones implicadas se discretizan para los elementos, resolviéndose iterativamente hasta llegar a cumplir unos criterios de convergencia y estabilidad, realizando el ordenador millones de operaciones, mayor cantidad cuantos más elementos tenga la malla.

Los métodos de discretización mas difundidos son el método de las diferencias finitas, método de los elementos finitos y el método de los volúmenes finitos.

Al incorporar modelos para los transportes de energía y de las reacciones electroquímicas, las capas de difusión (gas difusión layer GDL) y electrodos mejoran los resultados pero también su complejidad, por lo que los primeros modelos usando estas variables se realizaban en 2D y más recientemente con el avance de la tecnología y la capacidad de computación se están usando en 3D.

Uno de los primeros modelos de una PEM fue el realizado por Bernardi y Verbrugge ([37] y [38]) en 1991 los cuales elaboraron un modelo unidimensional, en estado estacionario e isotermo que describía el transporte de agua, de las especies reactivas y los sobre potenciales. Supuso membrana siempre hidratada.

Uno de estos primeros modelos de CFD en 2D fue el de Gurau en 1998 [39], en el que se incluyen los principales fenómenos de transporte en la membrana, capas catalizadoras y GDL. En este trabajo de Gurau se resuelven las ecuaciones de Navier-Stokes, el transporte de energía, la continuidad y la concentración de especies en los canales de gas.

Los modelos 3D usan la geometría real de la celda por lo que los resultados son mucho más fiables.

Uno de estos modelos en 3D es el desarrollado por Nguyen [40] en 2004 diseñando un modelo en el que medía el transporte de masa y calor además de las distribuciones de corriente y potencial usando canales de gas en forma de serpentín. Además se implementó el algoritmo "voltaje to current" VTC que permite el y permite el cálculo del sobre potencial de activación local. Esto hace posible la predicción de la densidad de corriente local de una manera más precisa. Este trabajo termina concluyendo con que la concentración de oxígeno disminuye a lo largo del canal según va avanzando.

Otro estudio interesante es el realizado por Z. Lui [41] en el cual simula un stack de 6 celdas llegando a la conclusión de la necesidad de reducir el problema simplificándolo debido al alto coste computacional del mismo.

En este sentido también se destaca el uso de varias CPUs en paralelo cuando el problema es complicado y el número de elementos de la malla es muy alto. Celdas más grandes requieren de mayor potencia computacional como sucede con los stacks. Un ejemplo es el estudio de Meng y Wang [42] en el cual se usa computación en paralelo con StarCD con flujo en serpentín con 10 procesadores e incluso en un estudio posterior con Ansys Fluent llegaron a simular con 32 CPUs un modelo de 23.5 Millones de elementos llegando a la conclusión de que a mayor tamaño, mayores necesidades computacionales.

En la literatura existen numerosos trabajos usando CFD para analizar el funcionamiento de una pila PEM de combustible. Uno relevante es el realizado por C. Siegel [43] donde se comparan diferentes tipos de software de cálculo computacional como son FLUENT, STAR-CD u OpenFOAM entre otros. La conclusión principal fue que es necesario esperar al desarrollo de tanto ordenadores como software para poder así resolver con CFD usando mayores complejidades y mayor número de celdas simulando así stack completos asemejándose más a la realidad. Pero entre medias CFD puede ser usado como una herramienta de diseño y mejora de las PEMFC.

En cuanto al programa que se va a desarrollar en este proyecto (ANSYS FLUENT) es una de los softwares más completos, y que tiene un pre y pos procesado potente. Volúmenes finitos computacionales pueden ser usados con simple o doble precisión usando diferentes solvers. Campos potenciales y saturación de agua y contenido de agua se resuelven mediante valores definidos por el usuario. El término de saturación del agua líquida se puede tratar bajo factores de relajación. Además, el software ofrece la posibilidad de tener en cuenta las resistencias de contacto y las interacciones del canal de refrigeración. Si ocurren problemas de convergencia, se recomienda cambiar el ciclo de redes múltiples al ciclo F con un método de estabilización de gradiente bi-conjugado (BCGSTAB) [44]. Para algunas ecuaciones escalares, puede ser necesario reducir la tolerancia.

Otros trabajos destacados usando CFD y más concretamente, el software ANSYS FLUENT es el desarrollado por A. Iranzo ([45] y [46]) en 2009, en este se estudia una monocelda de tipo PEM de 50 cm2 y canal en forma paralela y de serpentín, usando como único parámetro de ajuste la densidad de corriente en el cátodo y siendo el resto de parámetros obtenidos experimentalmente o por literatura. Todos los resultados se comprobaron experimentalmente hallándose discrepancias en el transporte de masa, presumiblemente cuando el agua genera en los canales bloqueo que no puede ser modelado a través de CFD.

Otro trabajo usando ANSYS FLUENT es el de Sivertsen y Djilali [47] en el 2005, en cuyo modelo se incluyen fenómenos de transferencia de calor con un flujo monofásico, es decir no incluyen fenómenos de transporte y generación de agua pero si de transferencia de calor, con lo que a altas densidades de corriente los valores no van a ser parecidos a los obtenidos experimentalmente, ya que no se tiene en cuenta el fenómeno de encharcamiento de la membrana que hace que la curva de polarización decaiga notoriamente. La conclusión de esto es que es muy importante y necesario realizar un análisis teniendo en cuenta estos parámetros ya que son críticos para el funcionamiento de una PEMFC.

En este aspecto muchos autores se están centrando en el estudio de la gestión del agua en el interior de la pila, ya que este se genera como producto en el electrodo, y puede llegar a bloquear los poros del electrodo y de la GDL, impidiendo el transporte de una de las especies como es el oxígeno, siendo necesario ser evacuado hasta la placa bipolar, pero manteniendo la membrana hidratada para que la conductividad protónica no disminuya drásticamente y se pierda durabilidad y rendimiento tanto en la membrana como en la pila general. Con esto se puede llegar a las siguientes conclusiones del estado del arte en modelos CFD:

- Se establecen como alternativa para simulación y diseño de pilas de combustible PEM.
- Requieren de altos tiempos de computación, con lo que el sistema real se he de simplificar y discretizar para poder alcanzar simulaciones y resultados. Esto nos lleva a la necesidad de realizar simulaciones en paralelo para reducir estos tiempos y poder usar más parámetros.
- Por otro lado, es imposible modelar todos los fenómenos intervinientes en las pilas de combustibles PEMFC para su correcto funcionamiento en un stack de varias celdas, con lo que habrá que realizar simplificaciones en este aspecto.
- Importancia de la simulación de los transportes de agua en la pila para poder analizar su correcto funcionamiento, siendo esto muchas veces difícil por el alto coste computacional de simulación que conlleva su simulación al lado de los demás parámetros que componen una pila de combustible (modelos multifásicos).

Estas limitaciones y características ponen en manifiesto que pese a que los modelos en CFD son modelos a tener en cuenta para diseño y simulación, es necesaria una evolución en las tecnologías para poder llegar a simular de una manera veraz y completa todos los parámetros que caracterizan a la pila de combustible tipo PEMFC para grandes tamaños y stacks de varias celdas.

6.2 ESTADO DEL ARTE DE MODELOS ANALÍTICOS

Dentro de este tipo de modelos destacan software como puede ser Matlab-Simulink, Ris3cat o ADVISOR entre otros.

Hasta ahora los modelos analiticos se centran en algun fenomeno o parametro en concreto para simplificar el modelo, además de que la mayoria de la literatura usando estos metodos se centra en el estudio de una celda. Estos modelos son solo aproximados y no reflejan una imagen precisa del funcionamiento de la pila, pero a su vez son modelos utiles para diseños simples y requieren menor coste computacional que los anteriores (CFD).

Un primer estudio realizado por Xiaoche Yu junto a B. Zhou, y A. Sobiesiak [48] en 2005 el cual simula la distribucion de temperaturas y las curvas de potencia de un stack, llegandose a modelar los transitorios tanto de puesta en marcha o arranque como los de parada.

Los parametros mas estudiados mediante metodos analiticos son el estudio del transporte de agua, asi como las curvas de polarización, para conocer la influencia de determinados parametros o fenomenos en la pila de combustible y el transporte de calor. En el ultimo caso se ha demostrado que temperaturas mas elevadas se encuentran en placas intermedias con respecto a las laterales en un stack de varias celdas y asi mismo dentro de una monocelda las temperaturas mas altas se encuentran ahí donde se realizan las reacciones quimicas.

En este contexto Yuyao Shan y Song-Yul Choe [49] estudiaron el impacto de la distribucion de temperaturas y las condiciones operativas sobre las prestaciones de las pilas de combustible, descubriendose la diferencia de temperaturas entre diversas celdas de un stack teniendo mas temperatura los stacks intermedios que los laterales.

Otro estudio relacionado con la temperatura es el realizado por D. J. L. Brett, J. B. Robinson y Q. Meyer [50] entre otros en 2014 en el cual se analiza la importancia de la temperatura para poder optimizar este parametro y obtener los mejores rendimientos de la pila. Sus conclusiones fueron que este era un parametro crítico y mas especificamente en la zona de alta densidad de corriente, asi como donde se encuentran las bajas temperaturas de operación.

Por otro lado destaca el trabajo de Frano Babir [51] en el que se detallan las ecuaciones necesarias para la resolucion de un stack de N celdas, relacionandolas entre ellas.

Por ultimo en relacion a las curvas de polarizacion Xiao-guang Li [52] desarrolla el modelo analitico para obtener esta curva asi como un analisis de la estequiometria en el catodo, presion y temperatura de operación midiendo su sensibilidad en el funcionamiento de la pila.

Con esto se puede llegar a las siguientes conclusiones del estado del arte en modelos analíticos:

- Los modelos analíticos son una alternativa para el estudio y diseño de Stacks de pilas, pudiéndose simular un gran número de estas debido al bajo coste computacional en comparación a las metodologías CFD.
- La literatura disponible nos indica que al ser tan compleja la simulación de todos los fenómenos, cada uno de ellos se centra en alguno en concreto para analizarlo en mayor profundidad pero sin llegar a ser muy válido debido a que no se incluyen muchos de estos parámetros.
- Estos sirven para optimizar las condiciones de operación de una pila de combustible PEM.

Un ejemplo usando Matlab es el mostrado en la Figura 25.



Figura 25] Ejemplo simulación PEMFC en Simulink [53].

6.3 CONCLUSIONES FINALES DEL ESTADO DEL ARTE

Se espera que la tecnologia PEMFC juegue un papel importante en la creciente demanda de energia limpia en todo el mundo para reducir emisiones. En esfuerzos para llegar a cumplir los estandares de ambiente y cumplir con los requerimientos de energia que se ven aumentados cada año con el avance de la sociedad, se requiere que tecnologias como esta se estudien y evolucionen para alcanzar los crecientes requerimientos de la sociedad con el minimo impacto y con la mayor eficiencia posible.

Al ser esta una tecnologia que convierte energia quimica en energia electrica con el unico residuo de agua, se espera que sea una tecnologia que alcance estos requerimientos.

En este contexto surgen los dos metodos de modelado para poder estudiar todas las variables que influyen en estas para poder asi mejorar las eficiencias de estas pilas.

Teniendo en cuenta los estados del arte mencionados anteriormente se extraen las siguientes conclusiones:

- Existen dos variantes comunmente usadas, modelado mediante CFD y mediante tecnicas analiticas, siendo completamente complementarios, es decir, se pueden analizar las condiciones de operación mediante tecnicas analiticas para luego simularlo en una celda en CFD.
- Los modelos CFD ofrecen una informacion mas detallada que los modelos analiticos. Mientras en CFD se pueden obtener valores locales en cada punto de la pila, en los metodos analiticos se pueden obtener valores medios.
- Los modelos CFD tienen un mayor coste computacional comparado con los modelos analiticos, por lo que con estos ultimos es mucho mas sencillo realizar simulaciones con stacks de varias celdas.
- La mayoria de los documentos estudiados se centran en parametros en concreto, perdiendo informacion sobre los otros fenomenos que ahí suceden.

Teniendo en cuenta que el objetivo de este proyecto es el desarrollo de una pila de combustible PEMFC a traves del software ANSYS-FLUENT en una celda, nos centraremos en el modelado en CFD.

7. METODOLOGÍA

7.1 ANSYS

El módulo de Ansys Fluent para las pilas de combustible tiene dos variantes:

- Modelo PEMFC
 Permite modelar las pilas de combustible PEMFC, con o sin capa micro poroso.
 Es el mejor de los dos para simular el proceso de conversión energética.
- Fuel cell and electrolysis model Este te permite modelar PEMFC, SOFC y electrolisis con Ansys Fluent. Este modelo puede ser usado para simular pilas usando altas y bajas temperaturas.

En el desarrollo de este proyecto usaremos el primero.

Este modelo está formado por numerosas funciones definidas por el usuario (UDFs) y una interfaz gráfica de usuario. Estas UDFs se muestran en la siguiente imagen (Figura 26).

UDS	0	Electric Potential (solid phase potential) (Volts)	
UDS	1	Protonic Potential (membrane phase potential) (Volts)	
UDS	2	Capillary Pressure	
UDS	3	Water Content	
UDS	4	Liquid Saturation in Channels	

Figura 26] Definición de las distintas UDS que usa ANSYS [54]

Las reacciones electroquímicas que suceden en las capas catalíticas están modeladas a través de varios términos mientras que otros parámetros se pueden cambiar a través de la interfaz.

Este modelo puede ser usado en paralelo, pero tiene como limitación de que la opción de difusividad de las especies anisotrópicas no es compatible con el modelo descrito.

7.2 MODELO TEÓRICO

En cuanto al modelo teórico es el desarrollado anteriormente en esta memoria y resumido en la Figura 27.



Figura 27] Esquema pila de tipo PEMFC [55].

El software resuelve 2 campos eléctricos, resuelto uno en la membrana y en una capa de catalizador y el otro en la otra capa de catalizador, el electrodo poroso y las placas bipolares. Estas se calculan tanto en ánodo como en cátodo. Basándose en el voltaje de la celda se resuelve la densidad de corriente, obteniéndose la curva de polarización. En el caso de este proyecto se alimentara con hidrógeno por el ánodo y con aire por el cátodo [47].

Las reacciones que tienen lugar en estas pilas son la (1) y (2).

Ánodo: H₂ → 2H⁺ + + 2e⁻ $E_0 = 0$ Cátodo: $\frac{1}{2}$ O₂ + 2H⁺ + 2e⁻ → H₂O $E_0 = 1.229 V$

Los electrones producidos en el ánodo viajan a través de un circuito externo y los protones viajan a través de la membrana del ánodo al cátodo cerrando el circuito eléctrico.

El apartado para PEMFC de Ansys Fluent. El modelo resuelve la carga (electrones y protones), especies (hidrógeno, oxígeno, agua y gases reactantes), conservación de la energía. En este apartado se verá una descripción matemática del modelo en ANSYS FLUENT.

7.3 METODO MATEMÁTICO

7.3.1 ELECTROQUÍMICA

ANSYS FLUENT resuelve dos ecuaciones potenciales una para el transporte de electrones en los sólidos conductores y otro para el transporte protónico en las capas catalíticas y la membrana [55].

La fuerza impulsora detrás de estas reacciones es el sobre potencial superficial: la diferencia entre el potencial de fase del sólido y el potencial de fase del electrolito/membrana. Con lo que se necesitan las dos ecuaciones para ambos potenciales que son las siguientes.

La primera ecuación (6), relacionada con el transporte de electrones e^- en los sólidos conductores.

$$\nabla * (\sigma_{sol} * \nabla \phi_{sol}) + R_{sol} = 0 \tag{6}$$

La segunda (7) para el transporte protónico (iónico) de H^+ en las capas catalíticas y la membrana.

$$\nabla * (\sigma_{mem} * \nabla \phi_{mem}) + R_{mem} = 0 \tag{7}$$

Dónde:

$$\begin{split} \sigma \ es \ la \ conductividad \ electrica \ (ohm^{-1}*m^{-1}). \\ \emptyset \ es \ el \ potencial \ electrico \ (Voltios). \\ R \ es \ la \ transferencia \ volumetrica \ de \ corriente \ \left(\frac{A}{m^3}\right). \end{split}$$

Donde las \emptyset pueden ser dos tipos de condiciones de contorno:

- Como no hay corriente eléctrica abandonando la pila a través, hay una condición de contorno de 0 flujo para el potencial de fase de la membrana, ϕ_{mem} en todas los limites externos.
- Para el Ø_{sol} (potencial fase solida), hay condiciones de contorno en las tapas externas tanto de ánodo como de cátodo que están en contacto con el circuito eléctrico externo. La corriente eléctrica generada en la celda solo pasa por estas zonas. En todas las demás fronteras externas existe una condición de frontera de flujo cero para Ø_{sol}.

En nuestro ejemplo en el ánodo habrá un potencial de 0 y el valor positivo del potencial se agencia al cátodo, siendo este el valor del voltaje total de toda la pila.

Estas condiciones de contorno, quedan reflejadas en la Figura 28.



Figura 28] Condiciones de contorno para los potenciales eléctricos [55].

En cuanto a las R_{mem} y R_{sol} son cero en todas las zonas salvo en las capas catalíticas (TPB) donde se componen de la siguiente manera:

• Para el sólido (8):

$$R_{sol} \begin{cases} -R_{an} \\ +R_{cat} \end{cases}$$
(8)

• Para la membrana (9):

$$R_{mem} \begin{cases} +R_{an} \\ -R_{cat} \end{cases}$$
(9)

Donde R_{an} y R_{cat} son respectivamente las corrientes de transferencia volumétrica en el ánodo y en el cátodo.

En Ansys Fluent, el usuario puede elegir entre la formula general de Butler-Volmer o la simplificada de Tafel, usada para situaciones donde la magnitud del sobrepotencial de superficie es grande.

Las fórmulas de Butler-Volmer se reducen a las siguientes (10) y (11):

• Para el ánodo:

$$R_{an} = (\zeta_{an} * j_{an}(T)) * \left(\frac{H_2}{H_{2ref}}\right)^{\gamma a} * \left[\exp\left(\frac{\alpha_{an}^{an} * F * \eta_{an}}{R * T}\right) - \exp\left(-\frac{\alpha_{cat}^{an} * F * \eta_{an}}{R * T}\right)\right]$$
(10)

• Para el cátodo:

$$R_{cat} = \left(\zeta_{cat} * j_{cat}(T)\right) * \left(\frac{O_2}{O_{2ref}}\right)^{\gamma a} * \left[\exp\left(\frac{\alpha_{an}^{cat} * F * \eta_{cat}}{R * T}\right) - \exp\left(-\frac{\alpha_{cat}^{cat} * F * \eta_{cat}}{R * T}\right)\right]$$
(11)

Dónde:

j(T)es la densidad de corriente de intercambio de referencia por area activa $\left(\frac{A}{m^2}\right)$. ζ es el area activa especifica (m^{-1}) .

 γ es la dependencia de concentración. $\alpha_{an}^{an} y \alpha_{cat}^{an}$ son los coeficientes de transferencia del ánodo (adimensional). $\alpha_{an}^{cat} y \alpha_{cat}^{cat}$ son los coeficientes de transferencia del cátodo (adimensional). η_{an} es el sobrepotencial en la superficie

F constante de Faraday $\left(9.65 * 10^7 \left(\frac{C}{kmol}\right)\right)$.

R es la constante de los gases. T es la temperatura.

La densidad de corriente de intercambio j(T) son dependientes de la temperatura local de la forma indicada en las ecuaciones (12) y (13).

• Para el ánodo

$$j_{an}(T) = j_{an}^{ref} * \exp(-\frac{E_{an}}{R * T * \left(1 - \frac{T}{T_{an}^{ref}}\right)})$$
(12)

• Para el cátodo

$$j_{cat}(T) = j_{cat}^{ref} * \exp\left(-\frac{E_{cat}}{R * T * \left(1 - \frac{T}{T_{cat}^{ref}}\right)}\right)$$
(13)

Donde:

$$E_{an}$$
 es la energia de activacion dada por el usuario.
 T_{an}^{ref} es la temperatura de referencia dada por el usuario.
 j_{an}^{ref} es la densidad de corriente de intercambio de referencia a
una temperatura de referencia.

La fuerza impulsora de la cinética es el sobrepotencial local de superficie, η , también conocido como la pérdida de activación. Es generalmente la diferencia entre los potenciales sólido y de membrana, ϕ_{sol} y ϕ_{mem} .

$$\eta_{an} = \phi_{sol} - \phi_{mem} \tag{14}$$

$$\eta_{cat} = \phi_{sol} - \phi_{mem} - U \tag{15}$$

Siendo la U el voltaje a circuito abierto en la ecuación (15).

7.3.2 CONSERVACIÓN DE ESPECIES Y MASA

Los términos de las especies $(kg/(m^3 * s))$ para el hidrógeno, oxígeno y el contenido de agua disuelto (λ) , debido a las reacciones electroquímicas son aplicadas al catalizador como se muestran en las ecuaciones (16), (17) y (18) respectivamente.

• Para el hidrógeno

$$S_{H_2} = -\frac{M_{w,H_2}}{2F} * R_{an} < 0 \tag{16}$$

• Para el oxígeno

$$S_{O_2} = -\frac{M_{w,O_2}}{4F} * R_{cat} < 0 \tag{17}$$

• Para el agua

$$S_{\lambda} = \frac{M_{w,H_2O}}{2F} * R_{an} > 0$$
 (18)

Donde

$$M_w$$
son las masas moleculares de cada elemento.
F constante de Faraday $\left(9.65 * 10^7 \left(\frac{C}{kmol}\right)\right)$.
2 y 4 son los numeros de electrones por mol de reactivos y productos.

Al ser la corriente eléctrica toral producida en las capas de catalizador del cátodo y ánodo son iguales.

Teniendo esto en cuenta, se describe la ecuación (19) para la conservación de corriente.

$$\int_{anodo} R_{an} dV = \int_{catodo} R_{cat} dV$$
(19)

Donde V es el volumen local.

7.3.3 TRANSPORTE DE AGUA

Las PEMFC por lo general trabajan a bajas temperaturas y especialmente en las zonas de bajo potencial, el agua puede condensar y formar agua líquida que bloquee las GDL, bajando drásticamente el rendimiento de la pila de combustible. Aun así, esta agua también es necesaria para mantener la membrana de la pila hidratada [55].

El modelo considera agua en las 3 fases; líquida, gas y disuelta.

Como vapor se resuelve a través de la ecuación de conservación de especies junto con las demás.

En cuanto al agua disuelta, la cual se sitúa en las capas de catalizadores y membrana, la generación y transporte se resuelve de la forma descrita en la ecuación (20).

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\varepsilon_i M_{w_i H_2 O} \rho_i \lambda}{EW} \right) + \nabla \left(\overrightarrow{i_m} \frac{n_d M_w}{F} \right) = \nabla \cdot \left(M_w D_w^i \nabla \lambda \right) + s_\lambda + S_{gd} + S_{id}$$
(20)

Dónde:

$$\varepsilon_i es la porosidad del medio poroso.$$

 $\overrightarrow{\iota_m} = -\sigma_{mem} \nabla \phi_{mem} la densidad corriente ionica.$
 $n_d coeficiente osmotico.$
 $D_w^i coeficiente de difusion del agua.$
EW peso equivalente de la membrana.

 S_{gd} , S_{id} son el ratio de intercambio de masa entre gas o liquido y la fase disuelta.

$$S_{gd} = (1 - s^{\theta}) \gamma_{gd} M_{w_i H_2 0} * (\rho_i / EW) * (\lambda_{eq} - \lambda)$$
⁽²¹⁾

$$S_{id} = (s^{\theta}) \gamma_{id} M_{w_i H_2 0} * (\rho_i / EW) * (\lambda_{eq} - \lambda)$$
⁽²²⁾

$\gamma_{id} \gamma_{gd}$ constantes de intercambio de masa liquido y gas. s saturacion liquida.

El equilibrio de contenido de agua:

$$\lambda_{eq} = 0.3 + 6a(1 - \tanh(a - 0.5)) + 0.69(\lambda_{a=1} - 3.52)a^{0.52\left(1 + \tanh\left(\frac{a - 0.89}{0.23}\right)\right)} + s(\lambda_{s=1} - \lambda_{a=1})$$
(23)

Donde

a es la actividad del agua siendo =
$$p_{wv}/p_{sat.}$$

 p_{wv} presion parcial del vapor de agua.
 p_{sat} es la presion de saturacion.

En cuanto al agua liquido destacamos su comportamiento en dos zonas:

- En la membrana y en el electrodo poroso (24).
- En los canales (29).

Analizando el primero:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_i \rho_i s) = \nabla \left(\frac{\rho_i K K_r}{\mu_l} \nabla p_l \right) + S_{gd} - S_{id}$$
(24)

Donde

 $\begin{array}{l} \rho_i \ es \ la \ densidad \ del \ agua. \\ \mu_l \ viscosidad \ dinamica \ del \ liquido. \\ K, K_r \ permeabilidad \ absoluta \ y \ relativa \ respectivamente. \\ p_l \ presion \ del \ liquido. \end{array}$

$$K_{r} \begin{cases} GDL: \qquad s^{b} \\ membrana: \qquad \left(\frac{\left(\frac{M_{w_{i}H_{2}O}}{\rho_{i}} * \lambda_{s=1} + \frac{EW}{\rho_{i}} \right)}{\left(\frac{M_{w_{i}H_{2}O}}{\rho_{i}} \lambda + \frac{EW}{\rho_{i}} \right)} * \frac{\lambda}{\lambda_{s=1}} \right)^{2} \end{cases}$$
(25)

$$S_{gl} \begin{cases} \gamma_e * \varepsilon * s * D_{gl} * \frac{M_{w_i H_2 O}}{RT} * p * \ln\left(\frac{p - p_{sat}}{p - p_{wv}}\right) & p_{wv} \le p_sat \\ \gamma_c * \varepsilon * (1 - s) * D_{gl} * \frac{M_{w_i H_2 O}}{RT} * p * \ln\left(\frac{p - p_{sat}}{p - p_{wv}}\right) & p_{wv} > p_sat \end{cases}$$
(26)

$$D_{gl} \begin{cases} C\acute{a}todo: \ 0.365 * 10^{-4} \left(\frac{T}{343}\right)^{2.334} \left(\frac{10^5}{p}\right) \\ \acute{A}nodo \ 1.79 * 10^{-4} \left(\frac{T}{343}\right)^{2.334} \left(\frac{10^5}{p}\right) \end{cases}$$
(27)

Usando la fórmula de Leverett para hallar la saturación del agua líquida:

$$\begin{cases} \sigma * \cos\theta * \sqrt{\frac{\varepsilon}{K}} (1.417(1-s) - 2.12(1-s)^2 + 1.263(1-s)^3) & \theta \le 90 \\ \sigma * \cos\theta * \sqrt{\frac{\varepsilon}{K}} (1.417(s) - 2.12(s)^2 + 1.263(s)^3) & \theta > 90 \end{cases}$$
(28)

En cuanto a los canales:

El agua líquida abandona las GDL y entra en los canales, provocando una pérdida de presión en los mismos.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_i s) + \nabla (\rho_i \vec{v}_i s) = \nabla (D_{liq} \nabla s)$$
⁽²⁹⁾

Dónde:

 D_{liq} es el coeficiente de difusion en estos canales. $\overrightarrow{v_l}$ es la velicidad del liquido, la cual es una fraccion de la velocidad del gas.

7.3.4 ELEMENTOS ADICIONALES

Estos elementos se añaden la ecuación de energía térmica según donde estén.

$$GDL \quad \frac{i_s^2}{\sigma_{sol}} - S_{gl} * L \tag{30}$$

Catalizador ánodo
$$R_{an}\left(\eta_{an} - \frac{T\Delta S_{an}}{2F}\right) + \frac{i_s^2}{\sigma_{sol}} + \frac{i_m^2}{\sigma_{mem}} - (S_{dl} + S_{gl})L$$
 (31)

Catalizador cátodo
$$R_{cat}\left(-\eta_{cat}-\frac{T\Delta S_{cat}}{2F}\right)+\frac{i_s^2}{\sigma_{sol}}+\frac{i_m^2}{\sigma_{mem}}-\left(S_{dl}+S_{gl}\right)L$$
 (32)

$$Membrana \quad \frac{i_m^2}{\sigma_{mem}} \tag{33}$$

Placas bipolares
$$\frac{i_s^2}{\sigma_{sol}}$$
 (34)

7.3.5 ECUACIONES BÁSICAS ADICIONALES

• Continuidad

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = S_{m}$$
(35)

• Conservación del Momento en una dirección (X)

$$u\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + v\frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + w\frac{\partial(\rho w)}{\partial z}$$

= $-\frac{\partial(P)}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x}\left(\mu\frac{\partial u}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\mu\frac{\partial u}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\mu\frac{\partial u}{\partial z}\right) + S_{px}$ (36)

• Energía

$$u\frac{\partial(\rho CT)}{\partial x} + v\frac{\partial(\rho CT)}{\partial y} + w\frac{\partial(\rho CT)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x}\left(k\frac{\partial T}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(k\frac{\partial T}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(k\frac{\partial T}{\partial z}\right) + S_{h}$$
(37)

• Transporte de especies (ejemplo H2)

$$u\frac{\partial(\rho\gamma_{H_2})}{\partial x} + v\frac{\partial(\rho\gamma_{H_2})}{\partial y} + w\frac{\partial(\rho\gamma_{H_2})}{\partial z} = \frac{\partial(J_{x,H_2})}{\partial x} + \frac{\partial(J_{y,H_2})}{\partial y} + \frac{\partial(J_{z,H_2})}{\partial z} + S_{H_2}$$
(38)

7.3.6 PROPIEDADES

En este apartado analizaremos las diferentes propiedades que se pueden introducir en el programa para modelizar las distintas partes de la pila de combustible [55].

7.3.6.1 DIFUSIVIDAD

La difusividad efectiva de las especies gaseosas.

$$D_{eff} = (1-s)^{2.5} \varepsilon^{1.5} D \tag{39}$$

Donde

 $arepsilon^{1.5}$ simula la tortuosidad en el medio poroso. D es la difusividad másica de las especies. $(1-s)^{2.5}$ tiene en cuenta el bloqueo por agua liquida.

7.3.6.2 CONDUCTIVIDAD IÓNICA

La conductividad de fase del electrolito o membrana es la ecuación (40).

$$\sigma_{mem} = \Im_i (0.514 \,\lambda - 0.326)^{w_i} e^{E_i \left(\frac{1}{303} - \frac{1}{T}\right)} \tag{40}$$

Dónde:

E_i es la energia de activación.

 ξ_a fraccion volumetrica de ionomero en anodo. τ_a tortuosidad em el ionomero en anodo.

7.3.6.3 DIFUSIVIDAD DEL AGUA

El coeficiente de difusividad en el agua toma la siguiente forma:

$$D_{w} = \eta_{\lambda} * \frac{\rho_{i}}{EW} * f(\lambda)$$
(42)

En nuestro caso como utilizaremos la implementación de Wu (43).

$$f(\lambda) = 4.1 * 10^{-10} \left(\frac{\lambda}{25}\right)^{0.15} \left(1 + \tanh\left(\frac{\lambda - 2.5}{1.4}\right)\right)$$
(43)

7.3.6.4 COEFICIENTE OSMÓTICO

$$n_d = \eta_{osm} * 2.5 * \frac{\lambda}{22} \tag{44}$$

 η_{osm} es un coeficiente que por defecto esta en 1 pero se puede cambiar, es el rendimiento osmotico.

7.3.6.5 PRESIÓN DE SATURACIÓN

Esta se calcula en términos de atmósferas según la siguiente formula (45).

$$log_{10} P_{sat} = -2.1794 + 0.02953 * (t - 273.17) -9.1837 * 10^{-5} (T - 273.17)^{2} +1.4454 * 10^{-7} (T - 273.17)^{3}$$
(45)

8. IMPLEMENTACIÓN

Para realizar la implementación de la pila, usaremos dos programas AUTODESK INVENTOR y ANSYS FLUENT, el primero de ellos para el diseño de la pila de combustible PEM y el segundo para la simulación de la misma, observando todos los fenómenos que en ella ocurren.

Para observar el funcionamiento de una pila de estas características realizaremos un diseño previo básico con diversas adaptaciones para ver cómo estas pueden variar el funcionamiento de las mismas, esto lo podremos ver comparando las diferentes curvas de polarización de los distintos modelos.

Por último, y en el marco del programa europeo en el que se basa este proyecto simularemos una pila de 64 cm^2 cuya configuración de canales de flujo va a ser en serpentín.

En este apartado analizaremos como se ha procedido con la implementación del modelo en el software, para más tarde ver como esta se comporta a través de los diferentes gráficos y datos obtenidos del programa.



Figura 29] Logo Inventor [56].



Figura 30] Logo ANSYS FLUENT [57].

8.1 DISEÑO PILA

Como ya hemos explicado en la breve introducción de este apartado para el diseño de esta pila hemos usado el software AUTODESK INVENTOR.

Dentro de este programa diseñamos una pila sencilla monocelda con canal recto de 20 mm^2 de superficie de la membrana. Para esto se diseñan todas las partes de la pila que son:

- Placa bipolar del ánodo
- Canal del ánodo
- GDL del ánodo
- Catalizador del ánodo
- Membrana
- Catalizador del cátodo
- GDL del cátodo
- Canal del cátodo
- Placa bipolar del cátodo

Todas estas se diseñan por separado la una de la otra.

Por otro lado, se proponen dentro de la pila sencilla dos variantes de placa bipolar:

- Sin refrigeración
- Con refrigeración

La que tiene refrigeración se le añadirán a los anteriores los correspondientes canales de refrigeración.

Por ultimo diseñaremos las mismas piezas pero para la pila final.

El proceso que se ha seguido para realizar estos diseños es realizar el boceto en el plano vertical y luego hacer extrusiones del mismo. En el 0,0 se situará la esquina inferior izquierda de la placa bipolar del ánodo y a partir de ahí se tomaran referencias a la hora de empezar los bocetos de las otras partes de la pila de combustible PEM, para que las coordenadas cuadren a la perfección y no haya problemas a la hora de exportar los diversos archivos en ANSYS.

A continuación analizaremos todos los modelos:

MODELO BÁSICO CON REFRIGERACIÓN

En referencia al modelo con refrigeración tenemos la siguiente disposición en la placa bipolar del ánodo, la cual es exactamente igual a la del cátodo (Figura 31 y 32).



Figura 31] Diseño inventor de la placa bipolar correspondiente a la PEMFC con refrigeración

Las características de este elemento son las indicadas en la Tabla 2.

Tabla 2] Características de la placa bipolar

Placa bipolar altura	2.5 mm
Placa bipolar anchura	2 mm
Tamaño canal	1x1 mm
Tamaño del canales de refrigeración	0.61x0.3 mm
Longitud	1 cm



Figura 32] Medidas de la placa bipolar correspondiente a la PEMFC con refrigeración

En cuanto a las partes de GDL, catalizador tanto de ánodo como de cátodo además de la membrana, todas tienen la misma forma (Figuras 33 y 34) con 10 mm de largo y 2 mm de ancho, dando una superficie de 20 mm^2 , siendo su espesor el especificado en la Tabla 3.



Figura 33] Diseño placas (GDL, catalizador y membrana)



Figura 34] Medidas placas (GDL, catalizador y membrana)

Lo único que las diferencia unas capas con las otras son los diferentes espesores que posee cada una, los cuales se detallan en la Tabla 3.

Tabla 3] Tamaño de las distintas capas

GDL	0.0254 mm
Catalizador	0.014 mm
Membrana	0.051 mm

En el apartado de canales, destacan los canales tanto de ánodo como de cátodo, los cuales tienen la misma forma y los canales de refrigerante que son iguales los 6.

Los canales de ánodo y cátodo tienen la forma indicada en la Figura 35.



Figura 35] Diseño canal de cátodo y ánodo para PEMFC básica

El tamaño de este canal es de 1x1 mm y 10 mm de longitud.

Los canales de refrigerante son de tamaño 0.61x0.3 mm y de 10 mm de longitud representándose según la Figura 36.



Figura 36] Diseño canal de refrigeración

• MODELO BASICO SIN REFRIGERACIÓN

En el caso de no tener refrigeración, la configuración de las placas bipolares se muestra en las Figuras 37 y 38 con medidas expresadas en mm.



Figura 38] Medidas placa bipolar para la PEMFC básica

Las otras partes son exactamente iguales que en el caso de placa bipolar con refrigeración.

MODELO FINAL

Por otro lado diseñaremos la pila principal objeto de este proyecto, la cual tiene una superficie de 64 cm^2 , decidiendo que, para que el comportamiento sea más similar al real, el canal que implementaremos será en serpentín. Este modelo no tendrá canales para refrigeración.



Primero se diseñará el canal, el cual adquiere la forma descrita en las Figuras 39 y 40.

Figura 39] Diseño canal para la pila PEMFC final

El área transversal de este canal es de 1x1.5 mm. Las dimensiones quedan especificadas en la siguiente imagen cuyas medidas se expresan en mm (Figura 40).



Figura 40] medidas canal para la pila PEMFC final

En cuanto a las placas bipolares, se implementan en Inventor de la misma forma que los anteriores.

Observándolo desde la parte inferior de la misma para poder extraer la máxima información posible como se muestra en la Figura 41.



Siendo su isométrica la reflejada en la Figura 42 y 43.



Figura 42] Diseño placa bipolar de la pila PEMFC final (vista isométrica)



Figura 43] Diseño placa bipolar de la pila PEMFC final (vista isométrica 2)



Esta posee unas medidas, expresadas en mm, que son las reflejadas en la Figura 44.

Figura 44] Medidas de la placa bipolar para la pila PEMFC final

Aquí se puede ver la implementación de las medidas de 13.86*4.62 cm. Tanto esta como la placa bipolar del cátodo poseen las mismas medidas y forma. En cuanto a las distintas capas intermedias como son las capas de difusión, capas de catalizador y la membrana las cuales tienen la forma descrita en las Figuras 45 y 46.



Figura 45] Diseño capas intermedias de la PEMFC final

Cuyas dimensiones, expresadas en mm, son las siguientes:



Figura 46] Medidas placas intermedias para la pila PEMFC final

En cuanto a los espesores depende de la parte que estemos tratando:

GDL ánodo	0.025 mm
Catalizador ánodo	0.0125 mm
Membrana	0.05 mm
Catalizador cátodo	0.0125 mm
GDL cátodo	0.025 mm

Tabla 4] Tamaño de las distintas capas de la pila final

Para el correcto funcionamiento en Ansys de los distintos elementos de las pilas, estos archivos se exportaran en formato .x_t característicos del programa Parasolid dedicado al diseño CAD.

8.2 IMPLEMENTACION EN ANSYS

El stack a simular está formado por varias monocelda de 48 V y 52A con una potencia de 2.5kW.

Como ya se ha demostrado a lo largo del estado del arte simular todas las celdas es una tarea altamente costosa computacionalmente, por lo que se ha decidido simular solo una celda, salvo una simulación de dos monocelda en el modelo básico para ver su comportamiento y poder explicar las bases del mismo.

ANSYS posee varios tipos de paquetes dentro del programa, dentro de los cuales elegiremos Fluid Flow (Fluent) [46].



Figura 47] Paquetes de ANSYS

Este tiene la siguiente forma dividida en secciones con sus programas internos definidos dentro del programa según se muestra en la Figura 48.

•		А	
1	3	Fluid Flow (Fluent)	
2	\bigcirc	Geometry	? 🖌
3	۲	Mesh	7
4	٢	Setup	? 🖌
5	ŵ	Solution	? 🖌
6	۲	Results	? 🖌
		Fluid Flow (Fluent)	

Figura 48] Secciones ANSYS FLUENT

Básicamente, para resolver cualquier tipo de geometría hay que seguir los siguientes pasos cada cual con sus funcionalidades, las cuales a lo largo del desarrollo de este proyecto se irán describiendo, usando como referencia las pilas a estudiar.

Los pasos a seguir para resolver un problema con ANSYS son los siguientes:

- 1. Definir los objetivos del modelo
- 2. Crear la geometría y la malla
- 3. Elegir los modelos físicos y de resolución
- 4. Resolver y monitorizar los resultados
- 5. Examinar los resultados
- 6. Considerar cambios a los diversos parámetros

El primer paso dentro del programa radica en el diseño y creación de la Geometría, la cual da comienzo a la implementación en el programa, dentro de este existen dos programas:

- Space Claim Direct Modeler
- DesignModeler

Para proceder a la importación de los elementos desde Inventor usaremos el DesignModeler.

Para implementar la geometría lo haremos de distintas formas, siendo diferenciables las siguientes:

- Pila básica y final
- Pila con refrigeración
- Pila de dos membranas.

• MODELO BÁSICO SIN REFERIGERACIÓN

La implementación se basa en la importación de los distintos archivos desde inventor con el formato elegido que en este caso es el .x_t.

Situando bien previamente los distintos elementos en inventor teniendo en cuenta la esquina inferior izquierda de la placa bipolar del ánodo se sitúa en las coordenadas 0,0, y a partir de estos situar los demás elementos, a la hora de situar los elementos no habrá ningún problema debido a que ya están preparados y previamente situados.

Para realizar la pila básica, importamos los 9 elementos que quedan situados en su correcta posición, y para su buen funcionamiento en el programa los añadiremos con las características mostradas en la Tabla 5.

ELEMENTO	METODO DE ADDICCIÓN	
Placa bipolar ánodo	Add Material	
Canal ánodo	Add Frozen	
Gdl ánodo	Add Frozen	
Catalizador ánodo	Add Material	
Membrana	Add Frozen	
Catalizador cátodo	Add Material	
Gdl cátodo	Add Frozen	
Canal cátodo	Add Frozen	
Placa bipolar cátodo	Add Frozen/Add Material	

Tabla 5] Formas de añadir en DM según elemento

La placa bipolar del cátodo para este caso es indiferente añadirla como Frozen o como material, siendo determinante en el caso de varios elementos (stack) para el cual habrá que añadirlo como Frozen.

Esta forma de introducir las piezas en el programa garantiza el correcto funcionamiento e interrelación entre partes dentro de la simulación.

Además de esto, tenemos que activar las opciones de cuerpos sólidos, superficie de los cuerpos y líneas de los cuerpos, para así poder establecer las zonas de contacto entre elementos.
Una vez hecho esto, tenemos que de cada elemento determinar el tipo de elemento que es quedando como se muestra en la siguiente Tabla 6.

ELEMENTO	METODO DE ADDICCIÓN
Placa bipolar ánodo	Solid
Canal ánodo	Fluid
Gdl ánodo	Fluid
Catalizador ánodo	Fluid
Membrana	Fluid
Catalizador cátodo	Fluid
Gdl cátodo	Fluid
Canal cátodo	Fluid
Placa bipolar cátodo	Solid

Es en esta sección donde puedes consultar información relativa en torno a las superficies, esquinas, vértices y volumen de cada elemento, siendo esto determinado por la propia geometría importada desde inventor.

Por último, y para poder ver las secciones de contacto seleccionamos todos los elementos y los unimos en una parte completa.

Esto para la pila básica queda de la forma indicada en la Figura 49.



Figura 49] Ensamblaje pila PEMFC básica

MODELO BÁSICO CON DOS MEMBRANAS

Para este caso sí que es necesario que la placa bipolar del cátodo se añada en forma de 'Frozen'.

Para formar una pila completa se usan varias mono celdas colocadas seguidamente una después de la otra como se aprecia en la Figura 50, ya que con solo una mono celda se alcanza bajos niveles de potencia [58].



Figura 50] Estructura de un stack [58].

Aparte de lo comentado anteriormente esta pila con dos membranas, sigue el mismo proceso que la pila básica (Tablas 5 y 6), la cual, una vez terminada seleccionamos la celda completa y creamos un patrón, sobre el plano normal con una distancia en este caso de 5,13 mm y procedemos a generarla.

Esto lo que hará, será crear una parte complementaria exactamente igual, situada de tal manera, que la tapa del ánodo de una, coincida con la tapa del cátodo de la contraria. El procedimiento seguido crea así el patrón usando como plano espejo el plano normal situado a 5,13 mm de la referencia. Este es un proceso que se puede realizar con cuantas copias desees, en este caso hemos decidido hacer una sola copia, es decir, dos membranas o dos celdas.



Esto nos coloca la pila con dos membranas de la forma descrita en la Figura 51.

Figura 51] Ensamblaje stack PEMFC de 2 membranas

MODELO BÁSICO CON REFRIGERACIÓN

Esta configuración tiene 6 canales de refrigeración además de los otros elementos los cuales se añaden según la Tabla 7.

ELEMENTO	METODO DE ADDICCIÓN
Placa bipolar ánodo	Add Material
Canal ánodo	Add Frozen
Gdl ánodo	Add Frozen
Catalizador ánodo	Add Material
Membrana	Add Frozen
Catalizador cátodo	Add Material
Gdl cátodo	Add Frozen
Canal cátodo	Add Frozen
Placa bipolar cátodo	Add Frozen
3 canales refrigeración ánodo	Add Frozen
3 canales refrigeración cátodo	Add Material

Tabla 7] Formas de añadir en DM por elemento en pila con refrigeración

Todos los elementos conservan su tipo (Tabla 6) y estos seis canales de refrigeración son todos de tipo fluido.



Figura 52] Ensamblaje pila PEMFC con refrigeración

En cuanto a las partes se engloban todos los elementos en una parte conjunta, salvo los canales de refrigeración que van separados, para el correcto funcionamiento del programa. De esta forma queda como una parte que la componen las placas bipolares, capas catalíticas, membrana, capas de difusión y canales, y por separado los 6 canales de refrigeración.

MODELO FINAL

Esta tiene una forma de implantación de la geometría en Ansys desde Inventor que es completamente similar a la descrita en la pila PEMFC básica (tabla 5 y 6), quedando finalmente como resultado la Figura 53.



Figura 53] Ensamblaje pila PEMFC final

8.3 MALLADO

Este apartado del programa se encarga de realizar la malla.

Primero procederemos a comprobar que todos los elementos cumplen lo establecido en la Tabla 6. Además, definiremos los elementos de todas las pilas de la forma de la Figura 54.



Figura 54] Elementos que componen una pila PEMFC

También a parte de estos elementos se definen los saltos porosos, los cuales corresponden a las zonas de contacto entre canal y capa catalítica tanto en ánodo como en el cátodo.

Por último, se definen el área de entrada y salida tanto del ánodo como del cátodo. Esto se hace para más tarde poder poner las condiciones de contorno.

Para el desarrollo de este proyecto se ha decidido que los flujos sean en contra corriente, es decir, el hidrógeno entrara en el canal del ánodo en un sentido y el aire entrara en el canal del cátodo en el sentido contrario. Esto se usa para determinar las entradas y salida de gases, y se podrá observar en la Figura 55.



Figura 55] Flujos de fluidos dentro de la PEMFC

MODELO BÁSICO

Para obtener el mallado usaremos elementos lineales con un formato de exportación estándar. Además de esto tendremos en cuenta los siguientes datos relacionados con el tamaño de la malla para este modelo básico (Figura 56).

-	Sizing	
	Use Adaptive Sizing	No
	Growth Rate	Default (1,2)
	Max Size	Default (5,e-004 m)
	Mesh Defeaturing	Yes
	Defeature Size	Default (1,25e-006 m)
	Capture Curvature	Yes
	Curvature Min Size	Default (2,5e-006 m)
	Curvature Normal Angle	Default (18,°)
	Capture Proximity	No
	Bounding Box Diagonal	1,1416e-002 m
	Average Surface Area	7,926e-006 m²
	Minimum Edge Length	1.4e-005 m

Figura 56] Características de tamaño de malla de la pila PEMFC básica

Además usaremos un objetivo de oblicuidad de 0.9, así como un suavizado medio. Esto lo que hace es evitar problemas con la malla a la hora de la simulación.

El tamaño y número de nodos y elementos se detallan en la siguiente Tabla 8.

Número de elementos	8000
Número de nodos	9594
Tamaño de los nodos	$2.5 * 10^{-4} \text{ m}$

La malla resultante de la monocelda básica, es la siguiente (Figura 57).



Figura 57] Mallado de la pila PEMFC simple

MODELO BÁSICO CON 2 MEMBRANAS

Para esta pila será igual salvo algunas restricciones en el tamaño de las mismas como muestra la Figura 58.

_	Sizing	
	Use Adaptive Sizing	No
	Growth Rate	Default (1,2)
	Max Size	Default (2,e-004 m)
	Mesh Defeaturing	Yes
	Defeature Size	Default (5,e-007 m)
	Capture Curvature	Yes
	Curvature Min Size	Default (1,e-006 m)
	Curvature Normal Angle	Default (18,°)
	Capture Proximity	No
	Bounding Box Diagonal	1,4466e-002 m
	Average Surface Area	7,926e-006 m²

Figura 58] Características de tamaño de malla de la pila PEMFC con 2 membranas

Esto nos da lugar a una malla con las características indicadas en la Tabla 9.

Tabla 9] Datos del mallado de la pila de dos membranas

Número de elementos	220000
Número de nodos	237552
Tamaño de los elementos	$1 * 10^{-4}$ m

Esto da lugar a un mallado que tiene la siguiente forma (Figura 59).



Figura 59] Mallado de pila PEMFC con dos membrana

MODELO BÁSICO CON REFRIGERACIÓN

Para este caso en concreto hay que definir también los seis canales de refrigeración que tiene nuestra pila, así como sus áreas de entrada y salida del mismo, teniendo todas la entrada por el mismo lado de la pila e igualmente con las salidas.

Estos canales serán alimentados en paralelo.

Sus características a la hora del cálculo de tamaño son las indicadas en la Figura 60.

-	Sizing	
	Use Adaptive Sizing	No
	Growth Rate	Default (1,2)
	Max Size	1,6665e-004 m
	Mesh Defeaturing	Yes
	Defeature Size	8,3355e-007 m
	Capture Curvature	Yes
	Curvature Min Size	Default (1,6665e-006 m)
	Curvature Normal Angle	Default (18,°)
	Capture Proximity	No
	Bounding Box Diagonal	1,1416e-002 m
	Average Surface Area	5,8787e-006 m²
	Minimum Edge Length	1,4e-005 m

Figura 60] Características de tamaño de malla de la pila PEMFC con refrigeración

Con esto la malla tendrá las siguientes características:

Tabla 10] Características de la malla de la pila con refrigeración

Número de elementos	28380
Número de nodos	35756
Tamaño de los elementos	$1.66 * 10^{-4}$ m

La malla correspondiente a este ensayo tiene la forma de la Figura 61.



Figura 61] Mallado pila PEMFC con refrigeración

MODELO FINAL

Esta seguirá el mismo procedimiento de la pila básica, pero con las siguientes características (Figura 62) de formación de la malla.

-	Sizing	
	Use Adaptive Sizing	No
	Growth Rate	Default (1,2)
	Max Size	Default (1,e-003 m)
	Mesh Defeaturing	Yes
	Defeature Size	Default (2,5e-006 m)
	Capture Curvature	Yes
	Curvature Min Size	Default (5,e-006 m)
	Curvature Normal Angle	Default (18,°)
	Capture Proximity	No
	Bounding Box Diagonal	0,14622 m
	Average Surface Area	4,1612e-004 m ²
	Minimum Edge Length	1,e-004 m

Figura 62] Características de tamaño de malla de la pila PEMFC final

Como en la básica, usaremos un objetivo de oblicuidad de 0.9, así como un suavizado medio. Esto lo que hace es evitar problemas con la malla a la hora de la simulación. Por otro lado, en cuanto a valores de inflación se usaran transiciones precisas con ratios de 0.27, de un máximo de 5 capas y un factor de crecimiento de 1.2.

Con esto la malla tendrá las características de la Tabla 11.

Tabla 11] Características de la malla de la PEMFC final

Número de elementos	1946888
Número de nodos	520740
Tamaño de los elementos	$5 * 10^{-4}$ m

La forma de la malla será la indicada en la Figura 63.



Figura 63] Mallado pila PEMFC final

8.4 DESARROLLO SIMULACIÓN

Primero para desarrollar la simulación, en el apartado de SETUP del programa ANSYS FLUENT, tendremos que seleccionar doble precisión, lo cual te permite usar la opción de PEMFC implementada en el programa [46].

Además, en el caso del desarrollo de este proyecto y teniendo en cuenta las características de mi ordenador usare 4 CPUs para usar más potencia computacional y que tarde menos tiempo en resolver a la vez que optimiza el método.

Ahora pasamos al apartado de solución, el cual es la base de la implementación en el programa, es en este apartado donde se introducirán las distintas condiciones de contorno y se podrá simular para obtener los resultados.

Primero remarcar que este estudio se realizará para estado estacionario, pero el programa también tiene la posibilidad de realizarla en transitorio.

Después, tenemos que activar por comando el modelo PEMFC en la consola.



Figura 64] Modelos de resolución Ansys Fluent

ANSYS Fluent posee una gran cantidad de modelos con los que poder realizar la simulación dentro de los cuales usaremos los siguientes:

- Energía
- Transporte de especies
- PEMFC

Además, determinaremos que lo distintos flujos que atraviesan la pila son laminares, para así simplificar el modelo.

El transporte de especies es necesario para poder cerrar correctamente los circuitos, y que las reacciones se puedan llevar a cabo dentro de la propia pila.

En cuanto al modelo PEM Fuel Cell activaremos las siguientes opciones:

- Perdidas Joule
- Calentamiento por reacción
- Fuentes electroquímicas
- Ratio Butler-Volmer
- Difusión multi componente
- Usar potencial de mitad de celda
- Modelo de partículas en el cátodo
- Fases liquidas

Usaremos como modelo W-Diff, el modelo correspondiente al implementado por Wu.

Como factores de relajación usaremos 0.5 para la eliminación de líquido en las GDL, 0.2 para las fuentes de líquidos y vapores y 1 en la fuente de arrastre osmótico.

En cuanto a los parámetros característicos dentro de este modelo relacionado con ánodo y cátodo, así como los globales son los indicados en la Figura 65.

Electrochemistry			Liquid Phase	Other Parameters
Anode	Cathode	Global	Expon't Diff_gas	Gas-Disv'ed Phase
J_ref (A/m2)	J_ref (A/m2)	I_leak (A/m2)	2.5	0.5
10000	10	0	Expon't J_ref	Mod. Coef. OSM_drag
C_ref (kmol/m3)	C_ref (kmol/m3)	Std. Temp. for U0(K)	2.5	1
1	1	298.15	Expon't K_rel	Eq. W. Cont. at a=1
Con. Exponent	Con. Exponent	Std. Press. for U0(Pa)	3	9.2
1	1	100000	Expon't Liq_coverage	Eq. W. Cont. at s=1
Exch. Coeff.(a)	Exch. Coeff. (a)		1	16.8
1	1		LiqDisv'ed Phase	
Exch. Coeff.(c)	Exch. Coeff. (c)		0.5	
1	1		Liquid Density	
Std. State E0(V)	Std. State E0 (V)		982	
0	1.22884		Liq. Thermal Cond.	
Entropy (j/kgmol-k)	Entropy (j/kgmol-k)		0.6	
0	-163300			

Figura 65] Parámetros característicos introducidos en el modelo PEMFC de ANSYS FLUENT

En este punto, comenzaremos a seleccionar dentro del módulo que parte de la malla es la correspondiente a cada parte determinando en cada una los distintos parámetros característicos tanto para ánodo como para cátodo, los cuales serán los mismos para las mismas partes:

• Placa bipolar (Current colector)

Se establece que será de Aluminio cuyas características son las indicadas en la Tabla 12.

Parámetro	Valor	
Densidad	2719 (kg/m ³)	
Cp.	871 (J/(kg*K))	
Conductividad térmica	202.4 (w/(m*K))	
Entropía en estado estándar	164448.1 (j/(kg*mol*K))	
Conductividad eléctrica	3.541* 10 ⁷ (siemens/m)	

Tabla 12] Características del Aluminio



Figura 66] Aluminio [59]

- Canal
- GDL

Tabla 13] Características GDL

Parámetro	Valor	
Porosidad	0.6	
Permeabilidad absoluta	$3*10^{-12} m^2$	
Angulo de contacto H-phobic	110º	
Coeficiente de eliminación de agua	5* 10 ⁻⁵ s/m	
Coeficiente a de la función Leverett	1.417	
Coeficiente b de la función Leverett	2.12	
Coeficiente c de la función Leverett	1.263	
Ratio de condensación	1* 10 ⁸	
Ratio de evaporación	1* 10 ⁸	

• Catalizador

Este contendrá Platino y contendrá las siguientes características:



Figura 67] Platino [60]

Tabla 14] Características del catalizador

Parámetro	Valor
Porosidad	0.2
Permeabilidad absoluta	$2*10^{-13}(m^2)$
Angulo de contacto H-phobic	95⁰
Ratio Superficie/Volumen	200000 (1/m)
Energía de activación para J_{reff}	8314340 (j/kmol)
Temperatura referencia para J_{reff}	343 К
Coeficiente a de la función Leverett	1.417
Coeficiente b de la función Leverett	2.12
Coeficiente c de la función Leverett	1.263
Ratio de condensación	1* 10 ⁸
Ratio de evaporación	1* 10 ⁸

Además, se especifica para el cátodo:

Tabla 15] Características extras para el catalizador del cátodo

Parámetro	Valor
Producción de O_2 (solubilidad y difusividad)	$1*10^{-8}$ (m^2 /s)
Radio de la partícula catalítica	5* 10 ⁻⁸ (m)
Resistencia ionométrica del cátodo	100 (s/m)

• Membrana

Tabla 16] Características de la membrana

Parámetro	Valor
Peso equivalente	1100 (kg/kmol)
Coeficiente de Conducción Protónica	1
Exponente de Conducción Protónica	1
Coeficiente de Difusividad del agua	1
Permeabilidad absoluta	$1* 10^{-18} m^2$

Aparte de todos estos datos también destacaremos la resistividad en los saltos porosos, los cuales tendrán un valor tanto en ánodo como en cátodo de 2e-6 ohm m^2 .

En el caso de tener refrigeración, se usará agua, cuya densidad de refrigerante será de 998.2 (kg/ m^3).

En el caso de no ser una monocelda habrá que dividirlo en las respectivas celdas, seleccionando todas las partes de cada una y agrupándolas.

También habrá que especificar el valor del área proyectada del electrolito, la cual tiene los valores de:

- 2 * 10⁻⁵ m^2 para todas las pilas básicas (stack, refrigeración y sin refrigeración).
- 64 cm^2 para la pila final.

Todos los parámetros anteriormente comentados son los mismos para todos los casos estudiados en el presente proyecto, teniendo en cuenta las particularidades comentadas a lo largo del apartado.

Estos parámetros comentados anteriormente si bien el fabricante no nos los ha facilitado, han sido elegidos ya que son los valores referencia para los distintos elementos a lo largo de la bibliografía.

8.4.1 CONDICIONES

En este apartado se comentara las distintas condiciones de las celdas, es decir que tipos de parámetros se tienen en cuenta en cada zona.

Teniendo en cuenta que:

- UDS-0 = Potencial eléctrico
- UDS-1 = Potencial protónico
- UDS-2 = Presión capilar
- UDS-3 = Contenido de agua
- UDS-4 = Saturación liquida en canales

Se usaran los UDS en las distintas zonas de la pila según la imagen siguiente:

Anode to Cathode	Zone Type	Electric Potential (UDS-0)	Protonic Potential (UDS-1)	Capillary Pressure (UDS-2)	Water Content (UDS-3)	Liquid Saturation in Channels (UDS-4)
Current Collector	Solid	yes				
Gas Channel	Fluid					yes
GDL	Fluid	yes		yes		
MPL	Fluid	yes		yes		
Catalyst Layer	Fluid	yes	yes	yes	yes	
Membrane	Solid		yes	yes	yes	
Catalyst Layer	Fluid	yes	yes	yes	yes	
MPL	Fluid	yes		yes		
GDL	Fluid	yes		yes		
Gas Channel	Fluid					yes
Current Collector	Solid	yes				

Figura 68] Zonas donde las UDS son resueltas en la PEMFC [54]

CONDICIONES DE CONTORNO

Primero estableceremos las condiciones de contorno globales a todos los sistemas, los cuales son las mostradas en la siguiente Tabla 17.

Tabla 17] Condiciones generales de la PEMFC

Presión	2atm=202650 Pa
Temperatura	353 K

Luego pasaremos a definir las distintas condiciones de contorno para los diferentes casos, las cuales son necesarias que sean definidas para la simulación basada en PEMFC.

Estos se desglosan en los siguientes:

- Entrada del ánodo
 - o Flujo másico
 - Temperatura
 - Especificación de la dirección del flujo
 - Fracciones másicas ($H_2 y H_2 0$)
 - Refrigerante 0 si no lo hay
 - Saturación en los canales de agua a 0 (UDS-4)

Entrada del cátodo

- o Flujo másico
- o Temperatura
- Especificación de la dirección del flujo
- Fracciones másicas (O_2 , $N_2 y H_2 O$)
- Refrigerante 0 si no lo hay
- Saturación en los canales de agua a 0 (UDS-4)
- Presión en las salidas
 - Usaremos presión atmosférica a la salida
- Terminal del ánodo
 - o **Temperatura**
 - Potencial eléctrico (UDS-0), se pone en voltaje 0 (tierra)
- Terminal del cátodo
 - o **Temperatura**
 - Potencial eléctrico (UDS-0), se pone en el voltaje correspondiente a la celda y a la pila.

En cuanto al caso de la pila con refrigeración hay que especificar para cada canal:

- o Flujo másico
- o **Temperatura**
- o Especificación de la dirección del flujo
- Fracciones másicas ($H_2 y H_2 0$)

Ahora procederemos a caracterizar las distintas condiciones de contorno para los distintos casos descritos en este proyecto.

MODELO BÁSICO

	Ánodo	Cátodo
Flow rate (kg/s)	$3 * 10^{-7}$	$2 * 10^{-6}$
Species H ₂	0.8	0.0
Species O_2	0.0	0.21
Species H_2O	0.2	0.15
Liquid saturation	0.0	0.0
Gauge Preasure (outlet)	0.0	0.0
Temperatura (K)	353	353
Resistivity porus jump	$2 * 10^{-6}$	2 * 10 ⁻⁶
Voltaje (V)	0	0.65

Tabla 18] Condiciones de contorno de la pila básica

• MODELO BÁSICO CON 2 MEMBRANAS

Tabla 19] Condiciones de contorno de la pila con 2 membranas

	Ánodo	Cátodo
Flow rate (kg/s)	$3 * 10^{-7}$	$2 * 10^{-6}$
Species H ₂	0.8	0.0
Species O_2	0.0	0.21
Species H_2O	0.2	0.15
Liquid saturation	0.0	0.0
Gauge Preasure (outlet)	0.0	0.0
Temperatura (K)	353	353
Resistivity porus jump	$2 * 10^{-6}$	$2 * 10^{-6}$
Voltaje (V)	0	1.3

Cabe destacar que la alimentación a este stack se realiza en paralelo, tanto por ánodo como por cátodo, es decir, se alimenta con la misma cantidad de oxígeno, hidrógeno y agua, y con el mismo caudal en los distintos ánodos por un lado y los distintos cátodos por otro lado.

MODELO BÁSICO CON REFRIGERACIÓN

	Ánodo	Cátodo	
Flow rate (kg/s)	3 * 10 ⁻⁷	2 * 10 ⁻⁶	
Species H ₂	0.8	0.0	
Species O ₂	0.0	0.21	
Species H ₂ O	0.2	0.15	
Liquid saturation	0.0	0.0	
Gauge Preasure (outlet)	0.0	0.0	
Temperatura (k)	353	353	
Resistivity porus jump	2 * 10 ⁻⁶	$2 * 10^{-6}$	
Voltaje (V)	0	0.65	
	REFRIGERANTE		
Temperatura (K)	300		
Flow rate (kg/s)	$2 * 10^{-6}$		
Gauge Preasure (outlet) 0.0			

Tabla 20] Condiciones de contorno pila con refrigerante

Todos los canales de refrigerante tienen la entrada de los mismos en la cara donde también lo tienen, además, como ya sucedía en el stack, todos los canales de refrigeración están colocados de una manera que la alimentación se realiza en paralelo (mismos flujos y mismas cantidades de refrigerante para cada canal).

MODELO FINAL

Tabla 21] Condiciones de contorno de la pila final

	Ánodo	Cátodo
Flow rate (kg/s)	$4.7 * 10^{-7}$	$2.6*10^{-6}$
Species H ₂	0.8	0
Species O_2	0	0.21
Species H_2O	0.2	0.15
Liquid saturation	0	0
Gauge Preasure (outlet)	0	0
Temperatura (K)	353	353
Resistivity porus jump	2 * 10 ⁻⁶	2 * 10 ⁻⁶
Voltaje (V)	0	0.75

8.4.2 SOLUCIÓN

Antes de llegar a los resultados como tal, para garantizar la convergencia del programa pondremos unos factores de relajación más bajos, los cuales toman incrementos más pequeños a la hora de realizar cada iteración. Esto lo que hace es evitar problemas de convergencia pero alargar el tiempo de computación de los resultados, aumentando la estabilidad del proceso, se basa en la siguiente formula.

$$\phi = \phi_{old} + \alpha * \Delta \phi \tag{46}$$

Siendo:

α el valor del factor de relajación.

Ø la variable.

Para estos casos hemos usado los siguientes:

Tabla 22] URF

Característica	Factor de relajación
Presión	0.7
Densidad	1
Body forces	1
Momento	0.3
H_2	0.9
02	0.9
H_2O	0.9
Energía	0.6
Potencial eléctrico	1
Potencial protónico	0.95
Presión capilar	0.9
Contenido de agua	0.95
Saturación liquida en canales	1

También para evitar problemas de compilación en los controles algebraicos de multired determinamos un número máximo de ciclos de 50, usando un arreglo de Gauss-Seidl.

Por otro lado usaremos unas terminaciones y unos métodos de estabilización según corresponda para mejorar la estabilidad del sistema.

Característica	Terminación	Método de estabilización
Presión	0.1	ninguno
Densidad	0.1	ninguno
Body forces	0.1	ninguno
Momento	0.1	ninguno
H ₂	0.001	BCGSTAB
02	0.001	BCGSTAB
H ₂ O	0.001	BCGSTAB
Energía	0.1	ninguno
Potencial eléctrico	0.0001	BCGSTAB
Potencial protónico	0.0001	BCGSTAB
Presión capilar	0.1	ninguno
Contenido de agua	0.001	BCGSTAB
Saturación liquida en canales	0.001	BCGSTAB

Tabla 23] Criterios estabilización

El metodo BCGSTAB se basa en el método de estabilización conocido como método del gradiente biconjugado estabilizado, el cual, es un método iterativo propuesto por H. A. van der Vorst para la resolución numérica de los sistemas de ecuaciones lineales no simétricos [44].

Para llegar a una solución estableceremos todos los residuales en 0.001 salvo en energia el cual es 1e-6, esto lo que hace es establecer los criterios de convergencia y definir las condiciones de parada para el resolvedor.

Para las simulaciones que se van a llevar a cabo en este proyecto se usaran 500 iteraciones.

Estos residuales comenzaran altos y según el problema vaya convergiendo estos irán disminuyendo progresivamente como se muestra en la Figura 69.



Figura 69] Convergencia con las iteraciones

El primero de todos empieza tan arriba ya que la primera iteración se realiza para una velocidad de flujo en una dirección, y en nuestro caso tendremos dos direcciones, con lo que el error en las primeras iteraciones es alto pero se subsana según se itera.

8.5 RESULTADOS.

Estos los dividiremos según los distintos casos dados.

8.5.1 PILA PEMFC BÁSICA

CURVA DE POLARIZACIÓN

Una de las características principales de una pila de estas características es su curva de polarización la cual podemos observar en la gráfica de la Figura 70, obtenida con los datos de la tabla provenientes de la simulación de la pila ante diversos voltajes.

V	I (A/cm ²)	P (W/cm ²)
0.40	1.17	0.47
0,45	1,06	0.48
0,50	0,91	0.46
0,60	0,63	0.38
0,65	0,49	0.32
0,70	0,37	0.26
0,75	0,26	0.20
0,80	0,18	0.14
0,85	0,11	0.09
0,90	0,06	0.05
1.00	0,01	0.01







La curva verde de la Figura 70 corresponde a la curva de potencia de la pila y está asociada al eje secundario, mientras que la roja es la curva de polarización ideal y la azul la curva de polarización real. En este gráfico, se puede apreciar las dos primeras zonas de la curva de la polarización, la tercera no se llega a apreciar ya que en esta simulación en concreto no se llega a consumir todo el combustible por lo que esta no se llega a apreciar.

Para analizar este caso usaremos el voltaje V=0,65V

En esta Figura 71, observamos como efectivamente los fluidos entran a una determinada presión y salen a presión atmosférica (0), en este caso la entrada del hidrógeno se realiza por la izquierda y la del oxígeno por la derecha.



Figura 71] Presión estática en pila básica

La evolución del hidrógeno (H_2) se ve en la Figura 72 como va disminuyendo su cantidad en el ánodo a la vez que va aumentando la cantidad de H_2O (Figura 73) a lo largo del canal como se puede apreciar.







Figura 73] Fracción másica de H_2O en ánodo

Esta acumulación es necesaria en cierta medida para mantener la membrana húmeda, garantizando así su funcionamiento, pero una gran cantidad de agua puede impedir el correcto funcionamiento de la pila, para evitar esto existen, varios mecanismos, como por ejemplo el uso de una válvula de purga de exceso de agua que además puede eliminar las impurezas que se formen, lo que perjudica al rendimiento de la propia pila.

Otra cosa que podemos observar en estas imágenes es que para las condiciones de contorno dadas apenas se consume hidrógeno, ya que en este caso no requiere de tanto H_2 y esto se puede acometer de diversas formas:

- Reduciendo la fracción másica a la entrada del ánodo
- Almacenar el hidrógeno restante para otros usos
- Recircular este hidrógeno para volverlo a hacer entrar en la misma pila

Por otro lado, el contenido de H_2 en el canal del cátodo es nulo como se aprecia en la Figura 74.



Figura 74] Fracción másica de hidrógeno en los dos canales

Ahora analizaremos la evolución del O_2 en ambos canales para analizar el funcionamiento de la pila. En este caso, introduciremos aire, cuyo contenido es de 0.21 de O_2 y 0.15 de H_2 O.

En cuanto al canal del cátodo pasa lo mismo pero con O_2 en vez de H_2 pero en menor cantidad para las condiciones de contorno dadas.

El contenido de O_2 en el canal del ánodo es nulo.







En cuanto a las distribuciones de temperatura se da la situación mostrada en las Figuras 77 y 78, en las que se pueden apreciar que se aumenta la temperatura donde se realizan las reacciones.



Figura 77] Distribución de temperaturas en pila PEMFC básica en el plano longitudinal



Como podemos ver en las Figuras 77 y 78, se produce un aumento de temperatura en la zona de la membrana y donde se realizan las reacciones químicas, y se libera una parte de calor.

Por último, destacar la distribución de la corriente de flujo eléctrico, que tiene la siguiente forma indicada en la Figura 79.



Figura 79] Flujo de corriente eléctrica en pila básica

En la Figura 79 se puede observar cómo la electricidad va del cátodo al ánodo, es decir, del mayor al menor potencial, de ahí el signo negativo de las magnitudes de las flechas.

8.5.2 PILA PEMFC CON STACK DE DOS MEMBRANAS

Teniendo en cuenta que las condiciones de contorno son las mismas que en el caso básico, las evoluciones de hidrógeno, oxígeno y agua serán similares. Es por eso que nos centraremos en analizar las características que las hacen peculiares a la anterior.

Este es el caso de la temperatura, la cual analizamos a continuación.



Figura 80] Distribución de temperaturas en pila PEMFC con dos membranas

Como se puede apreciar en la Figura 80, las placas intermedias están sometidas a mayores temperaturas, que en este caso es en pequeños valores pero con otras condiciones se puede ver incrementado, por lo que en muchos casos es necesaria la homogenización de la temperatura a través de refrigeración.

Cambiando las condiciones de contorno para poder apreciar bien este fenómeno obtenemos lo mostrado en la Figura 81.



Figura 81] Distribución de temperaturas en pila PEMFC con dos membranas y nuevas condiciones de contorno

En este, con las nuevas condiciones de contorno, se aprecia mejor este fenómeno por el cual las placas y celdas intermedias alcanzan temperaturas mayores que las placas laterales, en las cuales la temperatura es menor. En la siguiente imagen (con las condiciones de contorno iniciales) se muestra la densidad de flujo de corriente en el stack obteniendo los resultados mostrados en la Figura 82.



Figura 82] Flujo de corriente eléctrica en pila con 2 membranas

En esta se aprecia que los valores máximos se encuentran en las zonas de la membrana y la MEA.

En cuanto a la curva de polarización nos quedara una curva muy similar a la del apartado anterior pero con un ligero aumento en la intensidad con respecto al anterior de en torno al 2%. En este caso, el potencial es el doble ya que son 2 pilas en vez de una monocelda.

V	I (A/ cm ²)	P (W/ cm ²)
0.8	1.19	0.95
0,9	1,08	0.97
1	0,93	0.93
1.2	0,65	0.77
1.3	0,50	0.65
1.4	0,37	0.52
1.5	0,27	0.40
1.6	0,18	0.29
1.7	0,11	0.19
1.8	0,06	0.11
2	0,01	0.01

Tabla 25] Curva de polarización pila con dos membranas

Curva de polarización



Figura 83] Curva de polarización pila con 2 membranas

Como en el caso anterior, para las condiciones de contorno dadas se puede apreciar las dos primeras zonas de la curva de la polarización. La tercera no se llega a apreciar ya que en esta simulación en concreto no se llega a consumir todo el combustible por lo que esta no se llega a apreciar. La curva verde de la Figura 83 corresponde a la curva de potencia de la pila, mientras que la roja es la curva de polarización ideal y la azul la curva de polarización real.

Para hacer que se consuma todo el combustible se podría alimentar los stacks en serie, es decir, usar la salida de hidrógeno del ánodo inferior para alimentar el ánodo superior.
8.5.3 PILA PEMFC CON REFRIGERACIÓN

Primero vamos a analizar su curva de polarización:

V	I (A/ cm ²)	P(W/ <i>cm</i> ²)
0.4	2.13	0.85
0,45	1,93	0.87
0,5	1,68	0.84
0,6	1,23	0.74
0,65	1,04	0.68
0,7	0,85	0.60
0,75	0,66	0.49
0,8	0,46	0.37
0,85	0,29	0.25
0,9	0,15	0.14
0.95	0,06	0.06
1	0,01	0.02

Tabla 26] Curva de polarización tabla de la pila con refrigeración



Figura 84] Curva de polarización de pila con refrigeración

Como podemos apreciar en esta curva de polarización en comparación con la otra esta funciona mucho mejor, llegando a aportar mayores intensidades para un determinado voltaje de la celda, con lo cual llegamos a la conclusión de que esta pila funciona mejor con refrigeración. Esto es debido a la mayor uniformidad de las temperaturas dentro de la misma. En esta simulación nos pasa igual que en las anteriores ya que detectamos dos de las tres partes de la gráfica, al no llegar a consumirse del todo los combustibles.

En las siguientes imágenes vamos a ver cómo afecta esto a las temperaturas dentro de la pila y a la distribución de flujo de corriente.



En cuanto a la distribución de temperaturas:

Figura 85] Distribución de temperaturas en pila con canales de refrigeración (vista longitudinal)



Figura 86] Distribución de temperaturas en pila con canales de refrigeración (vista frontal)

Como se puede observar en las Figuras 85 y 86, la temperatura máxima ahora será de 353 K, y a lo largo de los dos canales la temperatura va disminuyendo a medida que avanzan los fluidos, mientras que en los canales del refrigerante esto sucede completamente al revés, aumentando según avanza el refrigerante.

Al principio de los canales de refrigerante es donde se encuentran las distribuciones de temperaturas más bajas como podemos apreciar en la segunda imagen, mientras que las distribuciones más altas se localizan al final de los canales de refrigerante, como podemos ver en las imágenes.

En cuanto a la distribución de corriente obtenemos la Figura 87, representada en valores absolutos.



Figura 87] Distribución del flujo de corriente en la pila con canales de refrigeración

Como podemos observar en la Figura 87, estos valores son mayores que en los casos anteriores como ya podíamos intuir con la curva de polarización descrita anteriormente. Por último, en lo relacionado a las presiones estáticas tenemos la siguiente distribución, mostrada en la Figura 88, donde se ve como en todos los canales entra a una determinada presión y luego sale a presión atmosférica.



Figura 88] Evolución de las presiones en la pila con refrigeración

Esta refrigeración se puede realizar de numerosos métodos:

- Con difusores de calor
- Flujo de aire (ventiladores)
- Por líquido (como hemos observado en este ejemplo)
- Cambio de fase

Comparando las curvas de polarización del modelo básico sin refrigeración y con refrigeración, nos queda el siguiente gráfico.



Curva de polarización

Figura 89] Comparación curvas de polarización modelo básico, con y sin refrigeración.

La curva roja es la pila correspondiente al modelo básico sin refrigeración, y la curva azul se refiere al modelo básico con refrigeración. Como se puede observar en la Figura 89 la pila con refrigeración pese a tener una cinética más lenta debido a la menor temperatura de operación, esta se comporta mucho mejor. Este fenómeno se debe a una humedad en la membrana mucho más óptima para esta pila y estas condiciones dadas, demostrando así que este es un parámetro crítico en el correcto desempeño de la misma.

8.5.4 PILA PEMFC FINAL

En este apartado observaremos el desempeño de la pila final, observando las distintas características de la misma. Esta pila sigue los mismos principios desarrollados en las pilas anteriormente mencionadas.

Comenzaremos con el ánodo y su canal.



Figura 90] Fracción de hidrógeno en el canal del ánodo

En la Figura 90 se puede obserbar como ha ido evolucionando el hidrógeno a lo largo del canal del ánodo. Para verlo mejor cambiamos la escala en la Figura 91.



Figura 91] Evolución del hidrógeno en el canal del ánodo

Por otro lado, en la Figura 92 se observa que a la vez que se consume el hidrógeno se genera agua en el mismo lo que ayuda a mantener humeda la membrana, pero en exceso puede llegar a bolquear los canales, por lo que hay que tener cuidado con estos parametros y conseguir evacuar la cantidad necesaria de agua.



Figura 92] Fracción de H₂O en el canal del ánodo

Ahora, en la Figura 93 se observa como la presión se reduce hasta presión atmosférica a la salida como ya se determinó en la Tabla 22 de condiciones de contorno.



Figura 93] Evolución de la presión en el canal del ánodo

Por otro lado, en la Figura 94 se observa también la distribución de velocidades a lo largo del canal.



Figura 94] Velocidad en el ánodo

En cuanto al canal del cátodo, para las condiciones de contorno dadas, se obtiene lo dispuesto en la Figura 95 y 96.







Figura 96] Fracción de H₂O en el cátodo

En estas se ve cómo reacciona oxígeno, el cual se acaba estabilizando en un punto, y como se genera hidrógeno, como ya se había explicado anteriormente, debido a las diferentes reacciones que tienen lugar dentro de la misma pila PEMFC.

La evolución de la velocidad a lo largo del canal, la cual disminuye ligeramente a lo largo del canal debido a las curvas existentes en el canal, lo que provoca choques entre partículas y rozamientos, su representación es la dispuesta en la Figura 97.



Figura 97] Velocidad en el canal del cátodo

En cuanto a la temperatura esta se mantiene prácticamente constante en torno a los 353K siendo un poco mayor (354K) en las zonas intermedias (GDL, catalizador y membrana) que son donde se producen las reacciones químicas, y dentro de estas mayores en la zona centro.

Los datos de la curva de polarización serán los reflejados en la Tabla 27, y su representación gráfica es la correspondiente a la Figura 98.

V	I (A/ cm ²)	P (W/ cm ²)
0,4	1,25	0,50
0,45	1,18	0,53
0,5	1,08	0,54
0,55	0,97	0,54
0,6	0,86	0,52
0,65	0,75	0,49
0,7	0,64	0,45
0,75	0,51	0,40
0,8	0,41	0,33
0,85	0,30	0,26
0,95	0,12	0,11
1	0,07	0,07
1,05	0,02	0,02

Tabla 27] Curva de polarización pila final

Curva de Polarización



Figura 98] Curva de polarización pila PEM final

Su curva de potencia corresponde a la indicada en la Figura 99.



Figura 99] Curva de potencia de la Pila PEMFC final

Combinando ambas en la Figura 100.





Como se puede ver se sitúa en valores de I cercanos a 1,08 A/ cm^2 dando valor de potencia de en torno a 0,54 W/ cm^2 .

Por otro lado, la pila seleccionada es la correspondiente a la configuración de 48 V, 52 A y 2.5 kW, con lo que se proceder a analizar la relación con la pila simulada.

Para la parte de perdidas óhmicas de la pila esta describe una ecuación lineal que es la siguiente:

$$y = -0.46x + 0.99 \tag{47}$$

En esta se refieren la y al voltaje y la x a la densidad de corriente, por lo que usando la ley de ohm (4), la resistencia interna correspondiente a la monocelda de la pila de combustible es de 0,46 Ω , lo que nos deja una resistencia total de la pila de 44,16 Ω al tener la pila 96 monoceldas.

Hemos simulado para 0.75 V con los siguientes resultados obtenidos mostrados en la Tabla 28.

Tabla 28] Características de estudio de la pila

V	I (A/cm^2)	P (W/cm^2)
0,75	0,51	0,40

Siendo

$$P = V * I \tag{48}$$

Teniendo en cuenta que el número de celdas es de 96 y que el área de la membrana es de 64 cm^2 .

$$I_{monocelda} = 0,512812 \frac{A}{cm^2} * 64 \ cm^2 = 32.82A \tag{49}$$

Usando la ecuación (48) y teniendo en cuenta que son 96 monoceldas y la resolución de la ecuación (49).

$$P = 96 * V_{monocelda} * I_{monocelda} = 2363.03 W$$
(50)

Esto implica una diferencia de 136.97 W con la original, lo que representa un 5.48 %, lo cual se considera aceptable, debido a las variaciones con el funcionamiento en la vida real y la no idealidad de la pila en condiciones normales.

9. CONCLUSIONES

En el desarrollo de este proyecto se han podido extraer diversas conclusiones, dentro de las cuales se destacan las siguientes.

- Los modelos CFD son unos modelos muy útiles que obtienen una alta precisión en todos los puntos de la pila, pero que a su vez necesitan más tiempo de desarrollo para poder llegar a simular toda la pila entera ya que ahora mismo para poderlo hacer se requiere un alto poder computacional y la mayoría de estudios se centran en una monocelda o un pequeño número de celdas.
- La cantidad de agua dentro de la pila es un parámetro critico al cual hay que prestarle mucha atención ya que un exceso de agua en los canales provoca un bloqueo de los mismos y un poco cantidad impide que la membrana este húmeda con lo que se perjudica su comportamiento.
- El mejor funcionamiento de las pilas es con una temperatura uniforme en los mismos y con varias membranas. Esto se consigue en un stack correctamente refrigerado, a través de los distintos métodos, que mantenga las temperaturas uniformes en la pila dada.
- Las condiciones de contorno dadas indican que no se consume todo el hidrógeno con lo que se podrían tomar distintas medidas como pueden ser almacenar el sobrante comprimiéndolo o establecer un sistema de alimentación en serie, de manera que el hidrógeno sobrante a la salida del primer canal alimentara al segundo, hasta que se llegue a consumir.
- El hidrógeno es el elemento más abundante del universo, es renovable y al reaccionar en la pila no deja ningún residuo contaminante más allá del agua. Es por esto por lo que la tecnología de la pila de combustible PEMFC, se erige como una tecnología puntera con vistas a reducir el impacto sobre el medioambiente y como alternativa a los combustibles fósiles no renovables.

10. BIBLIOGRAFÍA

[1]: Ministerio para la Transición Ecológica y el Reto Demográfico, <<Plan nacional integrado de energía y clima (PNIEC) 2021-2030>>, 2020.

[2]: Ministerio para la Transición Ecológica y el Reto Demográfico, <<Hoja de ruta del hidrogeno>>, 2020.

[3]: Centro Nacional de Experimentación de Tecnologías de Hidrógeno y Pilas de Combustible (CNH2), <<Hidrógeno>>. [En línea] Avaliable: https://www.cnh2.es/elhidrogeno/.

[4]: Asociación chilena de Hidrogeno, <<Producción del hidrógeno>>. [En línea] Avaliable: https://www.h2chile.cl/produccion-del-h2.

[5]: Centro Nacional de Experimentación de Tecnologías de Hidrógeno y Pilas de Combustible (CNH2), <<Pilas de Combustible>>. [En línea] Avaliable: https://www.cnh2.es/pilas-de-combustible/.

[6]: Grove, W. R., << Voltaic Series and the Combination of Gases by Platinum>>, London and Edinburgh Philosophical Magazine and Journal of Science, Series 3, 14, pp. 127-130- 420, 1839.

[7] Bossel, U., The Birth of the Fuel Cell 1835-1845 , in European Fuel Cell Forum, Obehrdorf, Switzerland, 2000.

[8] Jesus García Martin, <<Pilas de Combustible. Parte 1. Conceptos y estado tecnológico>>, Escuela de Organización Industrial, 2014.

[9] Nernst, W., <<Über die elecklytische leitung fester köper bei sehr hohen temperature>>, Z. Elektochem., 6(2), 41-3, 1899.

[10] Smithsonian, <<PEM fuel cells being installed in a Gemini 7 spacecraft>> (Source: Smithsonian Institution, Institution Science Service Historical Images Collection, General Electric.

[11]: A. Lozano y F. Barreras, «Hidrógeno. Pilas de combustible de tipo PEM,» 2012.

[12] Nadal, M. and F. Barbir, <<Development of a Hybrid Fuel Cell/Battery Powered Electric Vehicle>>, in D. L Block and T. N. Veziroglu (editors). Hydrogen Energy Progress X, Vol. 3 (International Association for Hydrogen Energy, Coral Gables, FL, 1994) pp. 1.427-1.440.

[13]: Wikipedia Images, <<Honda FCX Clarity>>, [En Linea]. Available: https://es.wikipedia.org/wiki/Honda_FCX_Clarity .

[14]: Enciclopedia Britannica Shutterstock, << Esquema PEMFC >>, 2010. [En línea]
 Avaliable: https://www.shutterstock.com/es/editorial/image-editorial/education 2556599a.

[15]: Javier Almarza Cano, << Diseño y Fabricación de una Pila de Combustible de Hidrógeno de Baja Potencia>>, Universitat Politècnica de Catalunya, 2010

[16]: Wikipedia Images, << Nafion >>, [En Linea]. Available: https://en.wikipedia.org/wiki/Nafion.

[17]: Iñigo Rojas Blasco, << Modelización de una pila de combustible PEMFC y desarrollo de interfaz de usuario para su incorporación a librería Matlab existente>>, Universidad de Sevilla

[18] Eon Soo Lee, << Water transport in two-phase fuel cell microchannels>>, Conceptual sketch of an electrochemical reaction at a catalyst layer of a PEM fuel cell, S.W. Cha (2003), p 4.

[19]: OpenPR Worldwide Public Relations, << Global Fuel Cell Gas Diffusion Layer (GDL) Market 2019 Industry Statistics on Key Trends, Growth and Opportunities to 2024, 2020 >>, 2020. [En línea] Available: https://www.openpr.com/news/1902684/globalfuel-cell-gas-diffusion-layer-gdl-market-2019-industry.

[21] Moosa Balali Osia, S. J. Hosseinipour, << Forming Metallic Micro-Feature Bipolar Plates for Fuel Cell Using Combined Hydroforming and Stamping Processes >>, iranica journal of energy and environment, 2013.

[22] Schunk Carbon Technology, << Placas bipolares>>, [En línea] Available: https://www.schunk-carbontechnology.com/es/productos/produkt-detail/placasbipolares.

[23] Hernández Zárate, Nayeli Itzel, << Emulación de una celda de combustible tipo PEM>>, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, 2018.

[24] M. M. Mench, << Fuel Cell Engines, vol. 1 >>, United States, John Wiley & Sons, 2008.

[25] E. R. González, E. A. Ticianelli, H. M. Villullas, <<Electroquimica y electrocatálisis, vol 1b.>> Ciudad Educativa, Arfentina, 2003.

[26] M. M. Mench, Chao-Yang Wang and S. T. Thynell, << Joule Transport Phenom>> 3:151, 2001.

[27] EG&G Services Parsons, << Fuel Cell Hand Book (5 Edition)>>, 2004.

[28] José Antonio Salva Aguirre, <<Modelado y validación experimental de una monocelda y un stack de una pila de combustible tipo PEM>>, Universidad de Sevilla, 2015.

[29] Adrián López Salas, <<Estudio eléctrico de pilas de combustible tipo PEM>>, Escuela Técnica Superior de Ingeniería ICAI.

[30] Roman Frey, <<Que es el hidrogeno verde o renovable>>, 2021, [En línea], Available: https://www.glpautogas.info/es/hidrogeno-verde-renovable.html.

[31] Omar Z. Sharaf, Mehmet F. Orhan. << An overview of fuel cell technology: Fundamentals and applications>>, Renewable and Sustainable Energy Reviews.

[32] Clara Fernández-Bolaños Badía, <<Energética del Hidrógeno: contexto, estado actual y perspectiva de futuro>> Capitulo 3.5 Aplicaciones del Hidrógeno, Universidad de Sevilla, 2005.

[33] José Ignacio San Martín, Inmaculada Zamora, José Javier San Martín, Victor Aperribay, Garikoitz Buigues. << Aplicaciones estacionarias de las pilas de combustible>> Departamento de Ingeniería Eléctrica -Universidad del País Vasco (UPV/EHU).

[34] International Journal of Hydrogen Energy. <<The wind/hydrogen demonstration system at Utsira in Norway: Evaluation of system performance using operational data and updated hydrogen energy system modeling tools>>.

[35] M.H. Westbrook. <<The Electric Car: Development and Future of Battery, Hybrid and Fuel-Cell Cars>>, Institution of Electrical Engineers, London, 2005.

[36] S. Shimpalee, M. Ohashi, J. W. Van Zee, C. Ziegler, C. Stoeckmann, C. Sadeler, and C. Hebling, "Experimental and numerical studies of portable PEMFC stack," *Electrochim. Acta*, vol. 54, no. 10, pp. 2899–2911, Jan. 2009.

[37] Bernadi, D.M.; Verbrugge, M.W. AIChE <<Mathematical model of a gas diffusion electrode bonded to a polymer electrolyte>> J. 1991, 37(8), 1151-1163.

[38] Bernadi, D.M.; Verbrugge, M.W. J. Electrochem. << A Mathematical Model of the Solid-Polymer-Electrolyte Fuel Cell >> Soc. 1992, 139(9), 2477-2491.

[39] V.Gurau, <<Two dimensional model for proton exchange membrane fuel cells>> AlChE Journal, vol.44, pp. 2410-2422, 1998.

[40] Nguyen <<Computational model of a PEM fuel cell with serpentine gas flow channel>> Journal of Power sources, vol 130, pp 149-157, 5/3 2004.

[41] Z. Liu, Z. Mao, C. Wang, W. Zhuge, and Y. Zhang, <<Numerical simulation of a mini PEMFC stack>> *Spec. issue Incl. Sel. Pap. Present. Int. Work. Molten Carbonate Fuel Cells Relat. Sci. Technol. 2005 together with Regul. Pap.*, vol. 160, no. 2, pp. 1111–1121, Jun. 2006.

[42]H. Meng and C.H. Wang <<Large-scale simulation of polymer electrolyte fuel cells by parallel computing>> Chemical Engieneering Science, vol 59, pp 3331-3343, 2004.

[43] C. Siegel, <<Review of computational heat and mass transfer modeling in polymerelectrolyte-membrane (PEM) fuel cells>> *Energy*, 2008.

[44] H. A. van der Vorst. <<Bi-CGSTAB: A fast and smoothly converging variant of Bi-CG for the solution of nonsymmetric linear systems>>. SIAM J. Sci. Stat. Comp., 13(2):631–644, 1992.

[45] A. Iranzo, M. Muñoz, J. Pino, and F. Rosa, <<Update on numerical model for the performance prediction of a PEM Fuel Cell>> *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 36, no. 15, pp. 9123–9127, 2011.

[46] A. Iranzo, M. Muñoz, J. Pino, and F. Rosa, <<Update on numerical model for the performance prediction of a PEM Fuel Cell>> *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 36, no. 15, pp. 9123–9127, 2011.

[47] B. R. Sivertsen and N.Djilali. <<CFD-based modelling of proton exchange membrane fuel cells>> Journal of Power Sources, vol.141, pp. 65-78, 2/16/2005.

[48] X. Yu, B. Zhou, and A. Sobiesiak. <<Water and thermal management for Ballard PEM fuel cell stack>> *J. Power Sources*, vol. 147, no. 1–2, pp. 184–195, Sep. 2005.

[49] Y. Shan and S.-Y. Choe, <<A high dynamic PEM fuel cell model with temperature effects>> *J. Power Sources*, vol. 145, no. 1, pp. 30–39, Apr. 2005.

[50] M. Noorkami, J. B. Robinson, Q. Meyer, O. a. Obeisun, E. S. Fraga, T. Reisch, P. R. Shearing, and D. J. L. Brett, << Effect of temperature uncertainty on polymer electrolyte fuel cell performance>> *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 39, no. 3, pp. 1439–1448, 2014.

[51] F. Barbir, <<*PEM Fuel Cells. Theory and Practice.*>> ELSEVIER, 2005.

[52] X. Li, L. Cao, Z. Liu, and C. Wang, << Development of a fast empirical design model for PEM stacks>>, 2008 Int. Hydrog. Forum (HyForum2008), 2008 Int. Hydrog., vol. 35, no. 7, pp. 2698–2702, 2010.

[53] Zehra Ural, Muhsin Tunay Gencoğlu and Bilal Gumus. << Dynamic Simulation of a Pem Fuel Cell System>>.

[54] Users guide ANSYS FLUENT.

[55] Theory Guide ANSYS FLUENT.

[56] Inventor Logo. [En línea] Available: https://www.autodesk.es/products/inventor/

[57] Ansys Fluent Logo. [En línea] Available: https://www.ansys.com/products/fluids/ansys-fluent.

[58] Nikhil Jain, Anurag Roy, Rajat jain, N. C. Karmakar. <<Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cells: Alternative to fosil fuels for power supply to Heavy Earth Moving and Allied Machinery in Mining and Civil Engineering Industry>> Fig. 3: Exploded view of PEM fuel cell stack. 2013.

[59] Tabla periódica.

[60] Joyería Plaor, <<El Platino. Características físicas, usos y aleaciones>> 2016.

ANEXOS

PLANOS









HOJA DE SEGURIDAD



FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Número de FDS: 067A

HIDROGENO

SECCIÓN 1: Identificad	ción de la sustancia o la mezcla y de la sociedad o la empresa
1 1 Identificador del producto	
Nombro comorcial	· HIDROCENO
Nombre comercial	
Descripcion Química	Hidrogeno :1333-74-0 :215-605-7 :001-001-00-9
Número de registro	Figura en la lista del Anexo IV / V de REACH, exento de solicitud de registro.
Fórmula química	: H2
1.2. Usos pertinentes identificados	
de la sustancia o de la mezcla v	
usos desaconseiados	
lisos anlicables identificados	: Industrial y profesional — Llevar a cabo evaluación de riesgo antes de usar
0303 apricables facilitados	Cas de ansulo / gas de calibrade
	das de clisayo / gas de calibrado.
	Discretification (Cristian)
	Reacción Química (Sintesis)
	Gas laser.
	Usar como un combustible.
	Gas de proteccion en procesos de soldadura.
	Usar para la fabricación de componentes electronicos/fotovoltaicos.
	Para mayor información sobre su uso contactar al suministrador.
Usos desaconseiados	No inflar, globos para fiestas
1.3 Datos del proveedor de la	
ficha da datas da soguridad	
Identificación de la Commeñia	
Identificación de la Compania	PRAXAIR ESPANA, S.L.U.
	Orense, 11 - 5ª Planta
	28020 Madrid
Dirección email (persona	: contact_espana@praxair.com
competente)	
1.4. Teléfono de emergencia	
Teléfono (persona competente)	: (+34)914533000
Teléfono de emergencia en	: (+34)915974453
Transporte Líquido (24 h)	
Teléfono de emergencia en	: (+34)002213000
Telefolio de ellergencia ell	• (+5+)502215000
Installaciones (24 h)	1 (+ 24)017052422
Telefono de emergencia en Gases	• (+34)917863432
Especiales (24 h)	
SECCIÓN 2: Identificad	ción de los peligros
2.1. Clasificación de la sustancia o	
de la mezcla	
Clase y categoría de riesgo,	:
Código de Normativa CE	
1272/2008 (CLP)	
Peligros físicos	: Gases inflamables - Categoría 1 - Peligro - (CLP : Flam, Gas 1) - H220

Clasificación 67/548 CE o 1999/45 : Clasificación CE : F+; R12 2.2. Elementos de la etiqueta Normativa de Etiquetado CE : 1272/2008 (CLP) • Pictogramas de peligro : • Indicación de peligro : • Palabra de advertencia : Peligro : • Indicación de peligro : • Prevención : • Prevención : • Prevención : • Prevención : • Palabra de advertencia : • Prevención : • Prevención : • Prevención : • Palabra de advertencia : • Prevención : • Prevención : • Prevención : • Prevención : • Palabra de advertencia : • Prevención : • Prevención : • Prevención : • Palabra de advertencia : • Prevención : • Provención : • Palabra de advertencia : • Prevención : • Prevención : • Provención : • Palabra de advertencia : • Prevención : • Provención : • Provención : • Palabra de grudencia : • Prevención : • Palabra de peligro : • Palabra de advertencia : • Prevención : • Palabra de advertencia : • Prevención : • Provención : • Palabra de peligro : • Provención : • Provención : • Palabra de peligro : • Palabra de peligro : • Provención :		Gases a presion - Gases comprimidos - Atencion - (CLP : Press. Gas) - H280
Clasificación CE : F+; R12 2.2. Elementos de la etiqueta Normativa de Etiquetado CE 1272/2008 (CLP) : • Pictogramas de peligro : • GH502 GH504 • Palabra de advertencia : Peligro • Indicación de peligro : H220 : Gas extremadamente inflamable. H280 : Contiene gas a presión; peligro de explosión en caso de calentamiento. • Consejos de prudencia : • Prevención : P210 : Mantener alejado de fuentes de calor, chispas, llama abierta o superficies calientes. – No fumar. • Respuesta : P377 : Fuga de gas en llamas: No apagar, salvo si la fuga puede detenerse sin peligro. P381 : Eliminar todas las fuentes de ignición si no hay peligro en hacerlo. - Almacenamiento 2.3. Otros peligros : Ninguno. SECCIÓN 3: Composición / información sobre los componentes 3.1.Sustancia / Mezcla : Sustancia. Hidrógeno Nº CAS : 1333-74-0 Nº EC Nº Endice : 001-001-00-9	Clasificación 67/548 CE o 1999/45 CE	
2.2. Elementos de la etiqueta Normativa de Etiquetado CE 1272/2008 (CLP) • Pictogramas de peligro Image: GHS02 GHS02 GHS02 GHS04 • Palabra de advertencia • Indicación de peligro • H220 : Gas extremadamente inflamable. H280 : Contiene gas a presión; peligro de explosión en caso de calentamiento. • Consejos de prudencia • Prevención • P210 : Mantener alejado de fuentes de calor, chispas, llama abierta o superficies calientes. – No fumar. • Respuesta • P311 : Eliminar todas las fuentes de ignición si la fuga puede detenes es in peligro. • P381 : Eliminar todas las fuentes de ignición si no hay peligro en hacerlo. • Almacenamiento • 2.3. Otros peligros Información general • Ninguno. SECCLÓN 3: Composición/información sobre los componentes 3.1.Sustancia / Mezcla Nº CAS 1333-74-0 Nº Endice 100 % Nº Endice 1001-00-9	Clasificación CE	• F+; R12
 Pictogramas de peligro Pictogramas de peligro 	2.2. Elementos de la etiqueta Normativa de Etiquetado CE 1272/2008 (CLP)	:
 Palabra de advertencia Indicación de peligro H220 : Gas extremadamente inflamable. H220 : Contiene gas a presión; peligro de explosión en caso de calentamiento. Consejos de prudencia Prevención P210 : Mantener alejado de fuentes de calor, chispas, llama abierta o superficies calientes. – No fumar. P377 : Fuga de gas en llamas: No apagar, salvo si la fuga puede detenerse sin peligro. P381 : Eliminar todas las fuentes de ignición si no hay peligro en hacerlo. Almacenamiento P403 : Almacenar en un lugar bien ventilado. 2.3. Otros peligros Información general Ninguno. SECCIÓN 3: Composición / información sobre los componentes Sustancia / Mezcla Sustancia. Nombre del componente Hidrógeno Contenido 100 % Nº CAS 215-605-7 Nº Indice 001-00-9 	 Pictogramas de peligro 	GHS02 GHS04
 Indicación de peligro H220: Gas extremadamente inflamable. H280: Contiene gas a presión; peligro de explosión en caso de calentamiento. Consejos de prudencia Prevención P210: Mantener alejado de fuentes de calor, chispas, llama abierta o superficies calientes. – No fumar. P377: Fuga de gas en llamas: No apagar, salvo si la fuga puede detenerse sin peligro. P381: Eliminar todas las fuentes de ignición si no hay peligro en hacerlo. Almacenamiento P403: Almacenar en un lugar bien ventilado. 2.3. Otros peligros Información general Ninguno. SECCIÓN 3: Composición/información sobre los componentes Sustancia / Mezcla Sustancia. Hidrógeno Contenido 100 % Nº CAS 215-605-7 Nº Indice 001-001-00-9 	 Palabra de advertencia 	: Peligro
 Consejos de prudencia Prevención P210 : Mantener alejado de fuentes de calor, chispas, llama abierta o superficies calientes. – No fumar. Respuesta P377 : Fuga de gas en llamas: No apagar, salvo si la fuga puede detenerse sin peligro.	 Indicación de peligro 	: H220 : Gas extremadamente inflamable. H280 : Contiene gas a presión; peligro de explosión en caso de calentamiento.
 Prevención P210 : Mantener alejado de fuentes de calor, chispas, llama abierta o superficies calientes. – No fumar. P377 : Fuga de gas en llamas: No apagar, salvo si la fuga puede detenerse sin peligro. P381 : Eliminar todas las fuentes de ignición si no hay peligro en hacerlo. P403 : Almacenariento P403 : Almacenarie en un lugar bien ventilado. SECCIÓN 3: Composición/información sobre los componentes Sustancia / Mezcla Sustancia / Mezcla Sustancia. Hidrógeno Contenido 100 % SeCC 215-605-7 Nº Indice 001-001-90-9 	• Consejos de prudencia	
 Respuesta : P377 : Fuga de gas en llamas: No apagar, salvo si la fuga puede detenerse sin peligro. P381 : Eliminar todas las fuentes de ignición si no hay peligro en hacerlo. Almacenamiento : P403 : Almacenar en un lugar bien ventilado. 2.3. Otros peligros Información general : Ninguno. SECCIÓN 3: Composición/información sobre los componentes 3.1.Sustancia / Mezcla : Sustancia. Nombre del componente : Hidrógeno Contenido : 100 % Nº CAS : 215-605-7 Nº Indice : 001-001-90-9 	- Prevención	P210 : Mantener alejado de fuentes de calor, chispas, llama abierta o superficies calientes. – No fumar.
- Almacenamiento : P403 : Almacenar en un lugar bien ventilado. 2.3. Otros peligros Información general Información general : Ninguno. SECCIÓN 3: Composición/información sobre los componentes 3.1.Sustancia / Mezcla : Sustancia. Nombre del componente : Hidrógeno Contenido : 100 % Nº CAS : 1333-74-0 Nº EC : 215-605-7 Nº Indice : 001-00-9	- Respuesta	• P377 : Fuga de gas en llamas: No apagar, salvo si la fuga puede detenerse sin peligro.
- Almacenamiento - P405 : Almacenar en un lugar bien ventilado. 2.3. Otros peligros Información general Información general : Ninguno. SECCIÓN 3: Composición/información sobre los componentes 3.1.Sustancia / Mezcla : Sustancia. Nombre del componente : Hidrógeno Contenido : 100 % Nº CAS : 1333-74-0 Nº EC : 215-605-7 Nº Indice : 001-00-9	Al	P381 : Eliminar todas las ruentes de ignición si no nay peligro en nacerio.
Información general : Ninguno. SECCIÓN 3: Composición/información sobre los componentes 3.1.Sustancia / Mezcla : Sustancia. Nombre del componente : Hidrógeno Contenido : 100 % Nº CAS : 1333-74-0 Nº EC : 215-605-7 Nº Indice : 001-00-9	- Almacenamiento	· P403 : Almacenar en un lugar bien ventilado.
SECCIÓN 3: Composición/información sobre los componentes 3.1.Sustancia / Mezcla : Sustancia. Nombre del componente : Hidrógeno Contenido : 100 % Nº CAS : 1333-74-0 Nº EC : 215-605-7 Nº Indice : 001-001-00-9	2.3. Otros peligros	1 Minerare
SECCIÓN 3: Composición/información sobre los componentes 3.1.Sustancia / Mezcla : Sustancia. Nombre del componente : Hidrógeno Contenido : 100 % Nº CAS : 1333-74-0 Nº EC : 215-605-7 Nº Indice : 001-001-00-9	Información general	• Ninguno.
3.1.Sustancia / Mezcla : Sustancia. Nombre del componente : Hidrógeno Contenido : 100 % Nº CAS : 1333-74-0 Nº EC : 215-605-7 Nº Indice : 001-00-9	SECCIÓN 3: Composició	n/información sobre los componentes
Nombre del componente : Hidrógeno Contenido : 100 % Nº CAS : 1333-74-0 Nº EC : 215-605-7 Nº Indice : 001-00-9	3.1.Sustancia / Mezcla	· Sustancia.
Contenido : 100 % Nº CAS : 1333-74-0 Nº EC : 215-605-7 Nº Indice : 001-001-00-9	Nombre del componente	: Hidrógeno
N° CAS : 1333-74-0 N° EC : 215-605-7 N° Indice : 001-001-00-9	Contenido	: 100 %
N° EC : 215-605-7 N° Indice : 001-001-00-9	Nº CAS	: 1333-74-0
Nº Indice : 001-001-00-9	Nº EC	: 215-605-7
	Nº Indice	: 001-001-00-9

N^o Reach

: Nota1



Página: 2 / 6

Versión: 2 Fecha de Emisión: 10/02/2011

Fecha de Revisión: 13/11/2013

Número de FDS:

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

067A

HIDROGENO

Clasificación	: F+; R12
• • • • • • • • •	Flam. Gas 1 (H220) Press. Gas Compressed (H280)
Información general	 No contiene otros componentes o impurezas que puedan influir en la clasificación del producto. Taxto completo de Frasee-R. vázec confutul 6.
	Texto completo de declaraciones-H, véase capítulo 16.
SECCIÓN 4: Primeros	nuvilios
SECCIÓN 4. Frimeros a	IUAIIIUS
4.1. Descripción de los primeros	
- Inhalación	: Retirar a la víctima a un área no contaminada llevando colocado el equino de respiración autónoma. Mantener a la
Indución	víctima caliente y en reposo, Llamar al doctor. Aplicar la respiración artificial si se para la respiración.
- Contacto con la piel	: No se esperan efectos adversos de este producto.
- Contacto con los ojos	No se esperan efectos adversos de este producto.
- Ingestión	: La ingestión no está considerada como una vía potencial de exposición.
4.2. Principales síntomas y efectos,	
agudos y retardados	
Información general	A elevadas concentraciones puede causar asfixia. Los sintomas pueden incluir la perdida de la consciencia o de la movilidad. La víctima puede no haberse dado cuenta de la asfixia.
4.3.Indicación de toda atención	
medica y de los tratamientos	
especiales que deban dispensarse	
Información general	: Ninguno
	- miguio.
SECCION 5: Medidas d	e lucha contra incendios
5.1. Medios de extinción	
- Medios de extinción adecuados	Agua en spray o en nebulizador.
Madiaa da autincián inadacuadaa	Polvo seco.
- Meulos de extinción madecuados	 No usar agua a presion para extinguino. Diáxida de carbono
5.2. Peligros específicos derivados	
de la sustancia o la mezcla	
Peligros específicos	: La exposición al fuego puede causar la rotura o explosión de los recipientes.
Productos de combustión	: Ninguno.
peligrosos	
5.3. Recomendaciones para el	
personal de lucha contra incendios	· Ci as posible detener la fuga de producte
Metodos específicos	 Is les posible decerter la ruga de producto. Itilizar medidas de control de incendios aproniadas con el incendio circundante. La exposición de los envases de cas al
	fuego y al calor nuede provocar su runtura. Enfriar los envases dañados con chorro de aqua nulverizada desde una
	posición protegida. No vaciar el agua contaminada por el fuego en los desagües.
	No extinguir una fuga de gas inflamada si no es absolutamente necesario. Se puede producir la reignición espontánea
	explosiva. Extinguir los otros fuegos.
	Usar agua en spray o en nebulizador para disipar humos de incendios.
Equipo de protección especial para	En espacios confinados utilizar equipos de respiración autónoma de presión positiva.
extinción de incendios	Vestimenta y equipo de protección standard (aparato de respiración autonoma) para bomberos.
	stariuaru EN 137-mascara de cara completa que incluya un aparato de rspiración autonomo de aire comprimido en
	uncuno apreno. EN 469: Vectimenta protectora para homberos EN 659: Guantes de protección para homberos
	en rost resumenta protectora para bomberosten ossi daantes de protección para bomberos.
SECCIÓN C. Medidas e	n caso do vortido accidental

6.1. Precauciones personales, equipo de protección y procedimientos de emergencia	
Información general	 Intentar parar el escape/derrame. Evacuar el área. Utilizar equipos de respiración autónoma cuando entren en el área a menos que esté probado que la atmósfera es segura. Asegurar la adecuada ventilación de aire. Téngase en cuenta el riesgo de atmósferas explosivas. Eliminar las fuentes de ionición.
6.2. Precauciones relativas al medio ambiente	
Información general 6.3. Métodos y material de contención y de limpieza	: Intentar parar el escape/derrame.
Información general 6.4. Referencia a otras secciones	: Ventilar la zona.
Información general	: Ver tambien las Secciones 8 y 13.

SECCION 7: Manipulación y almacenamiento

7.1. Precauciones para una manipulación segura



Página:	3/6
---------	-----

Versión: 2 Fecha de Emisión: 10/02/2011

Fecha de Revisión: 13/11/2013

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Número de FDS:

067A

HIDROGENO

Uso seguro del producto	Solo personas experimentadas y debidamente entrenadas deben manejar gases sometidos a presión. La sustancia debe ser manipulada de acuerdo con los procedimientos de buena higiene industrial y seguridad. Utilizar solo equipo específicamente apropriado para este producto y para su presión y temperatura de suministro, en caso de duda contacte con su suministrador.
	Iomar medidas de precaución contra descargas electrostaticas.
	ruiga el ane del sistema antes de indicidudir el gas. Mantener leios de fuentes de indición incluyendo descarga estática
	No fume cuando se manipule el producto.
	Tener en cuenta el riesgo de una posible atmosfera susceptible de eplotar y la necesidad de disponer de un equipo que pruebe la explosión.
	Considerar el uso de herramientas que no emitan chispas.
	Comprobar que el conjunto del sistema de gas ha sido, o es con regularidad, revisado antes de usarse respecto a la posibilidad de escapes.
Maninulación segura del envase	Considerar los instrumentos de reducciones de la presión en las instalaciones de gás
del gas	beb prevenirse la filtración de aqua al interior del recipiente.
5	No permitir el retroceso hacia el interior del recipiente.
	Proteger las botellas de los daños materiales, no arrastrar,ni rodar, deslizar ó dejar caer. Si mueve botellas, incluso en pequeños recorridos, use una carretilla (mecanica, manual,etc) diseñada para transportar botellas.
	Mantener colocada la caperuza de la valvula hasta que el envase quede fijo contra una pared, un banco ó situado en una plataforma , y ya dispuesto para su uso.
	Si el usuario aprecia cualquier problema en una valvula de una botella en uso, termine su utilización y contacte al suministrador.
	Nunca intentar reparar ó modificar las valvulas de los depositos ó los mecanismos de sguridad. Las valvulas que estan dañadas deben ser inmediatamente comunicadas al suministrador.
	Mantener los accesorios de la valvula del deposito libre de contaminantes, especialmente aceites y agua. Reponer la caperuza de la valvula ó del depósito si se facilitan por el suministrador , siempre que el envase quede
	desconectado del equipo. Cierre la valvula del del deposito despues de su uso y cuando quede vacio, incluso si aún esta conectado al equipo.
	No intentar nunca trasvasar gases de una botella/envase a otro. No utilizar nunca mecanisnos con llamas ó de calentamiento electrico para elevar la presión del deposito.
	No quitar ni desfigurar las etiquetas facilitadas por el suministrador para identificar el contenido de las botellas .
7.2. Condiciones de almacenamiento seguro, incluidas posibles incompatibilidades	
Información general	 Mantener el contenedor por debajo de 50°C, en un lugar bien ventilado. Separa de los gases oxidantes o de otros materiales oxidantes durante el almacenamiento. Los contenedores ser almacenados en posición vertical y debidamente asegurados para evitar su caida. Los contenedores almacenados deben ser comprobados periodicamente respecto a su estado general y a posibles fugas
	Las protecciones de las valvulas y las caperuzas deben estar colocadas . Almacenar los contenedores en un lugar libre del reisgo y lejos de fuentes de calor e ignición. Todos los equipos electricos en las areas de almacenamiento deben ser compatibles con el riesgo de una posible atmosfera explosiva. Observar todas las regulaciones y los requerimientos locales relativos al almacenamiento de contenedores. Los contenedores no deben ser almacenados en condiciones que favorezcan la corrosión . Mantener alejado de materiales combustibles.
7.3. Usos específicos finales	t Ningung
SECCION 8: Controles	de exposición/protección individual
8.1.Parametros de control 8.2. Controles de la exposición	
Controles técnicos apropiados	: Los sistemas sujetos a presión deben ser regularmente comprobados respecto a fugas.
	Detectores de gases deben de ser usados siempre que gases/vapores inflamables pueden ser emitidos. Proporcionar ventilación adecuada, general y local, a los gases de escape.
	Considerar un sistema de permisos de trabajo p.ej para trabajos de mantenimiento.
Equipo de protección personal	Un analisis de riesgos debe ser realizado y formalizado en cada area de trabajo para evaluar los riesgos relacionados con el uso del producto y para determinar el PPE que provoca un riesgo relevante. Estas recomendaciones deben ser tenidas en cuenta. DEC sus aumenta los estas deses recomendados por EN/ICO deben estas recomendaciones deben ser tenidas
• Proteccion para el ojo/cara	 usar gafas con de seguridad con protecciones laterales. Chandrad EN 166. Proteccione para el cio.
• Protección para la piel	Stanuaru Liv 100- Protectioni para ei 0ju.
- Protección de las manos	Usar guantes de trabajo al manejar envases de gases.
-	Standard EN 388- guantes que protegen contra riesgos mecanicos.
- Otras	Usar zapatos de seguridad mientras se manejan envases. Considerar el uso de prendas de seguridad resistentes a llama antiestatica. Standard EN ISO 20345 - Equipos de protección personal-zapatos de seguridad
	Estándar EN ISO 14116- Materiales que limitan la difusión de llamas.
	Standard EN ISO 1149-5- Ropa de protección: Propiedades electrostaticas.
 Protección de las vias respiratorias Peligros térmicos 	No necesaria. No necesaria.



Pác	jina:	4	/ 6	

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Número de FDS:

067A

HIDROGENO

Controles de exposición medioambiental : No se requieren especificas medidas de gestión distintas de los procedimientos de buena higiene industrial y seguridad.

SECCIÓN 9: Propiedades físicas y químicas

9.1. Información sobre	
propiedades físicas y químicas	
básicas	
Apariencia	Gas.
Estado físico a 20°C / 101.3kPa	Gas.
Color	: Incoloro.
Olor	: Inoloro.
Valor de pH	: No aplica.
Masa molecular [g/mol]	:2
Punto de fusión [°C]	:-259
Punto de ebullición [°C]	: -253
Temperatura crítica [°C]	:-240
Punto de inflamación [°C]	: No es aplicable a gases ni a mezcla de gases.
Velocidad de evaporación (éter=1)	: No es aplicable a gases ni a mezcla de gases.
Rango de inflamabilidad [% de	: 4 - 77
volumen en aire]	
Presión de vapor [20°C]	: No aplica.
Densidad relativa del gas (aire=1)	: 0.07
Densidad relativa del líquido	: 0.07
(agua=1)	
Solubilidad en agua [mg/l]	: 1.6
Coeficiente de reparto	: No es aplicable a gases inorganicos.
n-octanol/agua [log Kow]	
Temperatura de auto-inflamación	: 560
[°C]	
Viscosidad a 20°C [mPa.s]	No aplica.
Propiedades explosivas	: No aplica.
Propiedades comburentes	: Ninguno.
9.2 Información adicional	
Otros datos	: Se guema con una llama invisible.

SECCIÓN 10: Estabilidad y reactividad

	···· , · ·····
10.1. Reactividad	. Circuitana da una tinidad askus la surunanda en la sub sansien una adalanta
10.2. Estabilidad guímica	· Sin riesgo de reactividad salvo lo expresado en la sub-sección mas adelante.
Información general	: Estable en condiciones normales.
10.3. Posibilidad de reacciones peligrosas	
Información general	Puede formar mezclas explosivas con el aire.
	Puede reaccionar violentamente con materias oxidantes.
10.4. Condiciones que deben evitarse	
Información general	: Manténgase alejado de fuentes de calor, chispas, llama abierta o superficies calientes. – No fumar.
10.5. Materiales incompatibles	
Información general	: Aire, Oxidante.
	Para información complementaria sobre su compatibilidad referirse a la ISO 11114.
10.6. Productos de descomposición peliarosos	
Información general	: Productos con riesgo de descomposición no se deben producir por en condiciones normales de almacenamiemto y uso.
SECCIÓN 11: Informa	ación toxicológica
11.1. Información sobre los efectos toxicológicos	
Toxicidad aguda	: No se conocen los efectos toxicológicos de este producto.

electos toxicologicos		
Toxicidad aguda	: No se conocen los efectos toxicológicos de este producto.	
Corrosión o irritación cutáneas	: Se desconocen los efectos de este producto.	
Lesiones o irritación ocular graves	: Se desconocen los efectos de este producto.	
Sensibilización respiratoria o	: Se desconocen los efectos de este producto.	
cutánea		
Carcinogénesis	: Se desconocen los efectos de este producto.	
Mutagenicidad	: Se desconocen los efectos de este producto.	
Toxicidad para la reproducción	: Se desconocen los efectos de este producto.	
Toxicidad específica en	: Se desconocen los efectos de este producto.	
determinados órganos (STOT) –		
exposición única		
Toxicidad específica en	: Se desconocen los efectos de este producto.	
determinados órganos (STOT) –		
exposición repetida		
Peligro de aspiración	: No es aplicable a gases ni a mezcla de gases.	
SECCIÓN 12: Información ecológica		
12.1. Toxicidad		
Información general	: Este producto no causa daños ecológicos.	



Página:	5	/	6
-			

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Número de FDS:

	U6/A
	HIDROGENO
12.2. Persistencia y	
degradabilidad Información general	· Este producto no causa daños esclégicos
12.3. Potencial de bioacumulación	
Información general	Este producto no causa daños ecológicos.
Información general	: Este producto no causa daños ecológicos.
12.5. Resultados de la valoración	
Información general	• No se clasifica como PBT o vPvB.
12.6. Otros efectos adversos	
Efectos sobre la capa de ozono	• Ninguno.
Produce efectos en el	: Se desconocen los efectos de este producto.
	aionas valativas a la aliminación
SECCION 13: Considera	iciones relativas a la eliminación
13.1. Métodos para el tratamiento de residuos	
Información general	• No descargar en áreas donde hay riesgo de que se forme una mezcla explosiva con el aire. El gas residual debe ser
	quemado a traves de un quemador adecuado que disponga de antirretroceso de llama. No descargar dentro de ningún lugar donde su acumulación pudiera ser peligrosa.
	Referirse al codigo de practicas de EIGA Doc 30/10 Eliminacion de gases accesible en http://www.eiga.org para mayor
	información sobre metodos adecuados de vertidos. Asegurarse de no superar los limites de emisión establecidos en regulaciones locales.
Lista de residuos peligrosos	: 16 05 04: Contenedores de gases a presión (incluido halones) que contienen sustancias peligrosas.
Información general	: Ninguno.
SECCIÓN 14. Informac	ión relativa al transporte
Número ONU	: 1049
14.2. Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas	
Designación oficial	: HIDRÓGENO COMPRIMIDO
14.3. Clase(s) de peligro para el transporte	
Clase(s) de peligro para el	:
transporte	
14.4. Grupo de embalaje	2.1 : Gases inflamables
Código de clasificación	:1
14.5. Peligros de contaminación	F
Peligros para el medio ambiente	: Ninguno.
IMDG-Marine pollutant 14.6 Precauciones particulares	: No
para los usuarios	······································
Información general	Evitar el transporte en los vehículos donde el espacio de la carga no esté separado del compartimiento del conductor. Asegurar que el conductor está enterado de los riesgos potenciales de la carga y que conoce que hacer en caso de un
	accidente o de una emergencia.
	Antes de transportar las botellas : - Asegurar una ventilación adecuada.
	- Asegúrese de que los recipientes están ben fixados.
	 Asegurarse que las valvulas de las botellas estan cerradas y no tugan. Asegurarse que el tapón del acoplamiento de la válvula (cuando exista) está adecuadamente apretado.
147 Transmarka da ananal as da	- Asegurarse que la caperuza de la válvula o la tulipa, (cuando exista), está adecuadamente apretada.
anexo II del tratado MARPOL	
73/78 y según código IBC	' No anlica
SECCION 15: Informac	ion regiamentaria
15.1. Reglamentación y legislación en materia de seguridad, salud v	
medio ambiente específicas para	
ıa sustancıa o Ia mezcla Legislación UE	:
Restricciones	Ninguno.
Seveso directiva 96/82/EC Legislación Nacional	i Higura en la lista.

: Asegúrese que se cumplen las normativas nacionales y locales.

Información general



Página:	6	/	6

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Número de FDS: 067A

HIDROGENO

15.2.Evaluación de la seguridad				
Información general	El CSA (Análisis de Seguridad Química) no debe de realizarse para este producto.			
SECCIÓN 16: Otra información				
Enumeración de los cambios Consejos relativos a la formación	 Hoja de datos de seguridad revisada de acuerdo con la regulación de la Comisión (UE) Nº453/2010. Asegurarse que los operarios conocen el riesgo de inflamabilidad. El riesgo de asfixia es a menudo despreciado y debe ser recalcado durante la formación de los operarios. 			
Etiquetado 67/548 CE o 1999/45 CE	:			
• Símbolo(s)	Et : Extremadamente inflamable			
• Frase(s) R	: R12 : Extremadamente inflamable.			
• Frase(s) S	 S9 : Consérvese el recipiente en lugar bien ventilado. S16 : Conservar alejado de toda llama o fuente de chispas - No fumar. S33 : Evítese la acumulación de cargas electroestáticas. 			
Lista del texto completo de Frases-R en la sección 3	R12 : Extremadamente inflamable.			
Origen de la información Notas	 La presente Ficha de Datos de Seguridad está establecida de acuerdo con las Directivas Europeas en vigor . Nota 1: Figura en la lista del Anexo IV / V de REACH, exento de solicitud de registro. Nota 2: No ha expirado el plazo límite de solicitud de registro. Nota 3: No exige su registro.Sustancias fabricadas o importadas<1t/y. 			
Otras advertencias	 Antes de utilizar el producto en un nuevo proceso o experimento, debe llevarse a cabo un estudio completo de seguridad y de compatibilidad de los materiales. Los detalles dados son ciertos y correctos en el momento de llevarse este documento a impresión. A pesar de que durante la preparación de este documento se ha tomado especial cuidado, no se acepta ninguna responsabilidad por las lesiones o los daños resultantes. 			
Responsabilidades	Estas instrucciones han sido elaboradas por Praxair sobre la base de las informaciones disponibles a la fecha de las mismas y cubren las aplicaciones más habituales, sin garantizar que su contenido sea suficiente en todos los casos y situaciones. Su observancia no excluye el cumplimiento de la normativa vigente en cada momento.			
Descripción de cambios	· Adaptacion a la normativa vigente.			

Fin del documento
HOJA DE CARACTERISTICAS DEL EQUIPO



FCM-802/804 User Manual

This User Manual is intended as a general guidance only and does not purport to address the specific situations that could potentially arise from the use of fuel cell systems and their usage in connection with all stationary and portable power applications. The recipient is responsible for ensuring that all personnel have read and understood this User Manual before being allowed to handle, operate, install and store any equipment supplied by Intelligent Energy.

The recipient must ensure that any personnel responsible for operating fuel cell stationary and portable power applications are suitably trained and certified in compliance with any applicable local, state and federal laws and regulations and good industry practice. The recipient is responsible for complying with any relevant health and safety policies and procedures that may apply to the operation of stationary and portable power applications and use and storage of hydrogen on any sites.

Intelligent Energy warrants to the recipient and it will repair and replace any defective equipment resulting from the authorised use of the equipment provided. Notwithstanding the above, Intelligent Energy, to the fullest extent permitted by law, accepts no liability (including liability in respect of any error or defects in the fuel cell system) for any damage caused as a result of Recipient's unauthorised use of the equipment provided. The recipient acknowledges that the manner in which the equipment is stored, used or operated is not under the control of Intelligent Energy Limited.

Intelligent Energy has made every effort to ensure that this User Manual is accurate and disclaims liability for any inaccuracies or omissions that may have occurred.

Contents

1	Safety and warnings	4		
2	oduct specification 6			
3	ts of the FCM-802/804 7			
4	Product interface	8		
5	FCM-802/804 overview	8		
6	Connections	9		
	 6.1 Electrical configuration 6.2 Electrical isolation and over-current protection 6.3 Air supply 6.4 Hydrogen fuel 6.5 Hydrogen connection 6.6 Communication connection 6.7 CAN connection 6.8 Potential free contacts 			
7	FCM commands and status	12		
	7.1 Module enable 7.2 Module run 7.3 FCM-802/804 status 7.4 FCM-802/804 software states			
8	Operation of FCM-802/804	14		
	 8.1 Overview FCM 802/804 8.2 Anode Purge 8.3 Fan Pulse 8.4 Standby State 8.5 Fault State 			
9	Faults	15		
	9.1 Procedure to reset the fault			
10	Installation and set up 10.1 Mechanical mounting points 10.2 Mechanical protection and covers 10.3 Mechanical connection to the power terminals 10.4 Mechanical connection to the Ground terminal 10.5 Vibration and shock loads 10.6 Air supply and ventilation 10.7 Hydrogen connection 10.8 Hydrogen fuel physical requirements	15		
11	Maintenance procedures	19		
	11.1 User maintenance11.2 Contact Intelligent Energy Product Support Team			
12	Trouble-shooting guide	19		
	 Possible causes of faults Check for fuel leak Fuel check procedure Electrical system check procedure Stack temperature check procedure Filter change procedure 			
13	Control parameters and standard factory setting	24		
	13.1 Power setup configuration (802)13.2 Power setup configuration (804)			
14	Spare parts, storage and disposal	26		
	 14.1 Spare parts 14.2 Disposal 14.3 Storage 14.4 Transportation 			
15	Declaration of Conformity	27		
-				



1.1 In case of an emergency

- Stop power generation from the fuel cells by disconnecting the FCM enable pin
- Isolate the DC supply (application specific)
- · Isolate the fuel supply (application specific)

1.2 Warning: Fire or explosion hazard

Failure to follow safety warnings exactly could result in serious injury, death or property damage.

- Do not store or use gasoline or other flammable vapours and liquids in the vicinity of the FCM(s)
- Installation and service must be performed by a qualified installer, service agency or gas supplier

The Fuel Cell Modules (FCM) 802 and 804 use hydrogen gas to provide electrical DC power. They must only be used by personnel who have been trained for the safe use of the products by Intelligent Energy.

The FCM is designed for heavy industrial applications. The safety assessment applied to this product considers its use to be limited to non-essential / non-critical applications or where it is the back-up to another form of power supply rather than being the primary source.

This is an important distinction and particularly in the systems response to failure, in this case the response to failure is to shut down the output, normally by isolating the hydrogen supply. This course of action would not be appropriate where it is intended as the single source of supply or in the provision of critical supplies to, for example medical equipment, emergency lighting, interlocking, etc.

Where the intended use is outside that assessed by Intelligent Energy, the customer must assess and design their system appropriately with regard to this limitation.

1 Safety and warnings



- · High current electrical hazard is present
- · Risk of electric shock, be aware of consequential injury
- · There is a risk of residual voltage on live component after shutdown
- Do not electrically overload the FCM-802/804
- · Pressurised hydrogen present, highly flammable!
- · Ensure hydrogen supply can be isolated in case of an emergency
- · Unit must be inspected for damage and leak checked prior to use
- · Fault diagnosis must be carried out by trained and competent personnel only
- Do not use this fuel cell if any part has been underwater. A flood damaged fuel cell is potentially dangerous. Attempts to use the fuel cell can result in fire or explosion No naked flames in the vicinity of hydrogen operation area
- · Do not remove the air filter while operating
- · Do not remove the external covers
- · Keep operational area free from combustible materials
- · Do not obstruct air flow to inlet or exhaust
- · The terminal cover must always be fitted except during installation and maintenance
- · For use in a ventilated indoor environment, or
- For use in a weather protected outdoor environment; must protect from wind and rain ingress
- · Environmental protection required from snow, excessive dust and vegetation
- · Do not use FCM if there is water visible on it
- Do not install equipment above FCM that could release flammable/corrosive material
 on the module e.g. batteries
- Do NOT electrically overload the FCM-802/804. Overloading will lead to excessive load being drawn from the battery. Drawing excessive load may lead to a shutdown of the fuel cell and load not being supported
- When the FCM-802/804 is running it will stay live if the power cables are disconnected
- EVEN when the FCM802/804 is NOT running the cables may still be powered from the load side battery or external power source
- · Do not use the power ground as a reference for the communications and vice versa
- · Ensure communication cables are not more than 3m long
- During installation and maintenance, the FCM must be off and the load side battery or external power supply must be made safe

Product specification 2

Performance	Rated net power ¹	48V: 2.4kW (FCM-802) 4.0kW (FCM-804) 24V: 1.92kW (FCM-802) 2.88kW (FCM-804)
	Output voltage regulation	to ETS 300-132-2
	Rated current	48V: 50A (FCM-802) 80A (FCM-804) 24V: 80A (FCM-802) 120A (FCM-804)
	Emissions	Water vapour
Fuel	Fuel type	Hydrogen gas
	Fuel pressure	650mbar.g ±150mbar.g
	Fuel consumption	Less than 70g per kWh ²
	Fuel storage	External storage available separately Compatible with reformer technology or compressed hydrogen gas
	Fuel composition	99.9% gaseous hydrogen or better ³
Operations and	User interface	Options available 4,9
maintenance	Start-up time	Less than 10s
	Automatic start/stop	Standard
	Manual start/stop	Available
	IP rating	IP20 ⁹
Safety and health monitoring	Certification Health monitoring	Designed in accordance with CE requirements ⁵ Options available ^{6,9}
Physical	Mass	~18kg (FCM-802) ~20kg (FCM-804)
	Max dimensions	448mm (W) \times 306mm (H) \times 473mm (D) $^{\rm 10}$
	Connections, gas	G1/8 parallel BSP threaded port with face seal, female
	Connections, electrical	Power studs 2 × M10, GND Stud 1 × M10, 1 × FCM run input, 1 × FCM enable input, 1 × CAN hi/low/GND, 1 × 30mA driver (status), 4 × PFC
Normal operating	Altitude	0 – 4000m ^{7,9}
conditions	Operating ambient temperature range	+5°C to +40°C
	Relative humidity	10% to 90% ^{8,9}
	Storage temperature	-40°C to +70°C

1 >95% duty cycle

2 Achieved at 25°C, beginning of life

3

According to quality specified in BS 14687-3:2014(E) CAN interface can be provided, see section 6.5 4

5 For details see Declaration of Conformity 6 Options available for continuous health monitoring

7 Rated power to 1500m. Power de-rate commences above 1500m

8 Rated power from 30%. Power de-rate commences below 30%

9 Please contact Intelligent Energy to discuss your requirements

10 Allow space for power cables and hydrogen connection to rear

3 Parts of the FCM-802/804

The key components of the FCM-802/804 are:



4 Product interface

Performance	Function	Specification
Hydrogen inlet 500mbar.g – 800mbar.g	Fuel supply	G1/8 parallel thread, with face seal
Air inlet 0-16 Sm³/min 5–40°C	Ambient air filtration and supply	510 × 240mm duct
Exhaust air 0-16 Sm³/min 5–60°C	Air exhaust to ambient	3 × 140mm dia. duct
Power connection 15.0–56.0V	Connection to DC bus	M10
Communication port See section 6.5	Operational commands & diagnostics	D type 9 way

4.1 Interface specification

5 FCM-802/804 overview

This manual sets out an operating overview for Intelligent Energy's 802 and 804 FCMs. The 802 and 804 FCMs are part of the 800 Series products, which also feature a FCM 801 which can provide power up to 1.2kW.

The FCM-802/804 provides regulated DC at nominal output voltage, which can be defined by the user at a nominal 24V or 48V. The FCM-802/804 will hold the DC output at the nominal voltage while connected to an external battery or power supply so that the system will act as a hybrid system. In the hybrid system, the battery is used to provide power whilst the fuel cell starts, supports the load during the fuel cell Performance Optimisation Cycle (POC) and in the standby state. Hydrogen gas must be provided at a regulated pressure to the module inlet. The FCM-802/804 will generate power when it is given both Enable and Run signals (see Section 7.1 & 7.2).

During normal operation, the FCM-802/804 will conduct a POC where power delivery is briefly interrupted. In this period, the fuel cell will hybridise with the external battery (see Section 8.3 Performance Optimisation Cycle (POC)). If during normal operation the load drops to a low level (less than 6A, as default for FCM-804), the fuel cell will enter a standby state (see Section 8.4 Standby State). This is designed to optimise fuel consumption. If the DC Bus voltage then dips below a pre-set voltage, the fuel cell will restart.

During normal operation, the FCM-802 or 804 will periodically conduct an optimisation cycle which improves the performance of the fuel cell. Power production is reduced or suspended for up to 12 seconds during the cycle so an external power source may be needed to briefly provide power to the load, for more details see section 8.3.

The FCM-802/804 must be set up in a well-ventilated environment with consideration given to the precautions of hydrogen safety.

6.1 Electrical configuration

The FCM-802/804 is supplied with studs which are M10 threads. These must be connected in a star configuration as shown in the figure below.



- Warning: Do NOT electrically overload the FCM-802/804. Overloading will lead to excessive load being drawn from the battery. Drawing excessive load may lead to a shutdown of the fuel cell and load not being supported.
 - **Note:** System can be set up for positive ground applications in the factory, please contact Intelligent Energy if this is a requirement.

Cable sizing needs to consider the maximum output current of the unit, acceptable cable voltage drop, cable length, cable grouping and thermal loading etc. The cable runs should be as short and direct as practicable. The isolator should be rated for the maximum power deliverable in the installed application. See table below:

Description	Max current Deliverable	Conductor Area	AWG
FCM-802	80Amps	26.7mm ²	3
FCM-804	120Amps	53.5 mm ²	0

These values are for guidance and must be checked they are suitable for the proposed application.

- **Note:** Do NOT disconnect the main power leads with the enable signal present.
- Warning: When the FCM-802/804 is running it will stay live if the power cables are disconnected.
- **Warning:** EVEN when the FCM802/804 is NOT running the cables may still be powered from the load side battery or external power source.
 - **Note:** The battery pack must provide power at the desired voltage. The battery pack must be capable of powering the load during module performance optimisation cycle (see section 8.3). For description of the command and signal connections see Section 6.5.

6.2 Electrical isolation and over-current protection

Suitable means of isolation must be provided by the installer to isolate both wires between the FCM 802/804 and the external battery/load. Suitable over-current protection (fuses or circuit breakers) must be provided by the installer between the FCM 802/804 and the external battery load.

The battery and associated isolation and over-current protection must conform to:

EN IEC 62485-2:2018. Safety requirements for secondary batteries and battery installations. Stationary batteries.

6.3 Air supply

To produce electrical power, the FCM-802/804 requires an unobstructed air supply which must not be recirculated between the exhaust and inlet.

- · Ensure that the air inlet cannot be blocked
- · Ensure that the air exhaust cannot be blocked
- · Do not recirculate the exhaust to the inlet

The air must be free of the following contaminants:

- · Sulphur
- · Hydrocarbons
- · Carbon Monoxide
- · Ammonia

6.4 Hydrogen fuel

The FCM-802/804 must be set up in a well-ventilated environment with consideration given to the precautions of hydrogen safety. The hydrogen supply needs to be regulated to 650mbar.g (±150mbar.g), and maintain the pressure during rapid changes of flow rate.

When installing and operating hydrogen systems, hydrogen general safety guidance must be considered:

- The hydrogen must be at least 99.9% pure and comply with the specification:
- · ISO 14687-3:2014 grade E category 3
- · ISO/TR 15916 basic considerations for the safety of hydrogen systems

6.5 Hydrogen connection

The hydrogen connection to the system is at the rear of the module just above the communication port (see Section 2 Product Interface). The hydrogen supply is connected via a female G1/8 parallel BSP thread with a face seal. It is required that this is then connected via an appropriate mating connection.

The hydrogen pipework must be checked periodically for leaks, particularly when connectors have been re-connected, such as cylinder exchange or installation.

6.6 Communication connection

To operate FCM-802/804, communications need to be provided through the D-type connector. The pins of the connector have the following functions:

Performance	Function	Specification
1	Enable	Provides power to the FCM
2	Enable Positive	Power source for the Enable signal
3	CAN high	CAN pin
4	CAN low	CAN pin
5	CAN return	CAN reference
6	Run	Starts the fuel cell
7	Run Positive	Power for the start command
8	Status	Status indicator
9	Isolated ground	Ground pin

Warning: Do not use the power ground as a reference for the communications and vice versa.

Warning: Ensure communication cables are not more than 3m long.

6.7 CAN connection

The pins for the connector are as follows:



The CAN connection can be used to communicate with the FCM-802/804 using Intelligent Energy's proprietary CAN protocol. CAN in J1939 configuration can be provided, please contact Intelligent Energy to discuss this requirement.

```
11
```

6.8 Potential free contacts

There are four potential free contacts (PFC) for auxiliary signals to and from the FCM. The PFCs are setup to be one output and three inputs. These are software configurable by Intelligent Energy. The signals are shown in the following table:

Description	Pins
Input 1	1, 2
Output 1	3, 4
Output 2	5, 6
Output 3	7, 8

7 FCM commands and status

7.1 Module enable

To enable the FCM, the Enable pin needs a signal. To provide the signal, a connection must be made between pins 1 and 2.

7.2 Module run

To produce power, the Run pin needs a signal. To provide the signal, a connection must be made between pins 6 & 7 (N.B: Enable must also be present). When the signal is received, the FCM will start and maintain the battery voltage. If the current draw is at a low level (less than 6 Amps as default, for FCM-804) the FCM will go to standby state. The battery voltage will be monitored. If it drops below the nominal battery voltage (user defined Delay Start Under Voltage, see 13 Control Parameters), the fuel cell will then switch back to running mode.

7.3 FCM-802/804 status

A continuous FCM-802/804 status signal, via the Communication Connection, will be present whilst the fuel cell is running with no fault present and the unit has not moved to standby.

If the Enable is off there is no status signal. If the Enable is on but there is no Run signal, then there will be no status signal present. If the Enable and Run signals are present and there is no FCM status signal then the FCM is in Standby or Fault.

7 FCM commands and status

7.4 FCM-802/804 software states

The FCM-802/804 has five possible states:

- · Off
- · Inactive
- · Running
- Standby
- Fault



Please note the following points:

- 1 The small circle in each state box indicates the condition of the FCM-802/804 status pin. This is low (black: ●) in all states apart from fuel cell running where it is high (white: ○).
- 2 In all states, removing the Enable signal returns the FCM-802/804 to the module controller off state.
- 3 If the FCM-802/804 enters a fault condition the fault is latched. The Enable line must be cycled to clear it.
- 4 For start and stop criteria see section 13 Control parameters and standard factory setting.

8 Operation of FCM-802/804

8.1 Overview FCM 802/804

The FCM-802/804 provides regulated DC at nominal 24V or 48V output to a battery bus. The DC bus will be held at nominal voltage by a battery or external supply to act as a hybrid system. In the hybrid system, the battery is used to provide power whilst the fuel cell starts. It supports the load during the fuel cell performance optimisation cycle and while the system is in the standby mode. The nominal operating voltage is factory settable upon request.

The hydrogen pressure must be provided in a regulated state to the module inlet. The FCM-802/804 will generate power when it is given both 'Enable' and 'Run' signals and detects DC bus and fuel pressure are present.

8.2 Anode purge

As the fuel cell operates, it is necessary to remove water and any impurities from the anode (the hydrogen side of the fuel cell). This is done by exhausting a small amount of hydrogen to the coolant air stream. The hydrogen is mixed with the air stream so that, as the mixture exhausts the module, the concentration is low enough that it will not sustain a flame. There is no impact on power production during anode purge.

8.3 Performance Optimisation Cycle (POC)

During normal operation, the FCM-802 or 804 will periodically conduct an optimisation cycle which improves the performance of the fuel cell. Multiple cycles are triggered in rapid succession at start-up. Cycles occur less than 15 times an hour during running. Power production is reduced or suspended for up to 12 seconds during the cycle so an external power source may be needed to briefly provide power to the load.

8.4 Standby state

As a fuel saving measure the FCM-802/804 will stop producing power if the load drops below 6A, default for FCM-804 (see Delay Stop Under Current, 13 Control Parameters) for more than a minute; below this point, the ancillary equipment compromises the fuel cell efficiency. The load will then be provided by the battery.

The FCM-802/804 will continue to monitor the battery and, if its voltage drops below the nominal voltage, it will restart (See Delay Start Under-Voltage in Section 12). When the fuel cell is running, it will power the load (if present) and float the battery voltage to the nominal set-point. This feature is designed to achieve the maximum useful energy from the fuel available.

8.5 Fault state

If the parameters of the FCM-802/804 leave the normal operational range then a fault is triggered. When a fault has been triggered the controller will latch. To clear the fault, the controller needs to be turned off via the Enable signal. For reset instructions see Section 9.

9 Faults

9.1 Procedure to reset the fault

If the FCM-802/804 has a fault it will disconnect the internal DC-DC converter and stop providing power. To reset a fault, follow the procedure below:

- · Check that the load is disconnected
- · Switch the Enable signal to 'Off'
- · Wait for five seconds
- · Return the Enable signal to 'On'
- · Set the Run signal to 'On'
- · Return the load to required setting
- **Note:** The safety case of the overall installation must consider the fault condition of the fuel cell as part of its analysis of the full function of the system.

10 Installation and set up

10.1 Mechanical mounting points

The FCM-802/804 must be installed as a standard 19" rack unit. This should then be mounted on a flat surface with four retaining points, these must be tightened to a torque not exceeding 25Nm. When installing the FCM, inspect it and do not install if there is visible damage to the unit. Any surfaces in contact with the FCM must not be above +50°C. The FCM is 473mm deep (+45mm for the connection terminals) Allow at least 50mm to the rear of the FCM for the cables/pipes to run in. It is recommended to mount on a shelf with front and rear access for maintenance activity, as shown below:



Number 10009655. A1

10 Installation and set up

10.2 Mechanical protection and covers

The FCM-802/804 must be mounted with protection from weather and the elements. The FCM-802/804 has been designed to comply with IP20 rating, it must be mounted within an enclosure which is at least IP24 if used outside.

The covers of the unit must not be removed by unauthorised personnel. The unit contains live electrical components which could be hazardous, even when not operating. The covers and the installation must protect the FCM-802/804 from precipitation and vegetation ingress. The covers must consider the need for maintenance.

- Warning: Do not remove the lid.
- Warning: Do not remove terminal cover during operation.

10.3 Mechanical connection to the power terminals

It is important to use the correct procedure to connect the power terminals. Incorrect procedure could damage the unit if excessive torque is used. Excessive load may distort the internal busbars.

- **Warning:** During Electrical maintenance/installation the FCM must be off and the load side battery or external power supply must be made safe.
 - 1 Two spanners (13mm).
 - 2 One to hold first nut to prevent it from rotating. Note: There is a lock nut at the back holding the stud in place, which must not be adjusted.
 - 3 The other to tighten the second nut to secure cable/conductor terminal against first nut.

10.4 Mechanical connection to the Ground terminal

As standard the FCM 802/804 is provided negatively earthed. Positive earth version is available as a factory configurable feature. The Ground terminal is located between the two power terminals and should be used to earth the unit. The cable should be sized to provide protection to the unit during operation and in foreseeable fault conditions.

10.5 Vibration and shock loads

The mounting of the FCM-802/804 must ensure that it is not exposed to shock or vibration loads. Ensure that the FCM-802/804 is stationary while it is operating.

Note: If the FCM has been stressed due to vibration or shock, return to Intelligent Energy for investigation.

10 Installation and set up

10.6 Air supply and ventilation

The FCM-802/804 requires a free supply of clean air to deliver power output. The unit will require up to 16 Sm³ /min of unrestricted air flow. The operator must consider the air flow required for the environmental conditions expected. The enclosure must not unduly restrict the air flow. The covers must be designed such that the exhaust gas cannot be recirculated into the air inlet.

As part of the design, the main air flow is also used to manage the risk of a hydrogen build-up. The hydrogen purge gas is routed into the air flow such that it is diluted to below the low flammability limit at the point of exit from the unit; therefore, the installer must take care not to restrict the exhaust stream. Also, this gas stream will contain hydrogen, this is at a concentration where it is not flammable. However, the air exhaust design must consider the hydrogen risk.

The FCM-802/804 must be provided with free venting air in the range of +5 to +40°C, it must not be operated outside this range. The installation of the FCM 802/804 must considered other equipment near FCM 802/804 may elevate the local ambient temperature during their operation. A local increase of ambient temperature may affect the performance of the fuel cell. Do not use if the air has contaminants such as smoke, volatile organics or corrosive gas present.

Warning: Hot air that that is generated by other equipment within 0.6m of the inlet of the FCM 804 is of concern and should be limited to 5% of expected operating power of the FCM 802/804 in order to limit the ingestion of hot air.

The FCM802/804 consumes oxygen as it operates it is therefore minimum air ventilation requirement must be observed at all time to ensure safety of personnel in the room:

- · Rooms of less than 5m³ must have a permanent vent area of 100cm²
- Rooms between 5 and 10m³ must have a permanent vent area of 50cm²
- · Rooms greater than 10m³ do not require a permanent vent

The above is applicable only if openable windows (or equivalents such as grilles or louvre panels) are also present. Extraction must be provided in cases where the above does not apply. This covers case such as internal rooms without windows. If the extraction is adjacent to the fuel cell system the rate must be at least 30l/s. If the extraction is elsewhere in the room the rate must be at least 60l/s.

10 Installation and set up

10.7 Hydrogen connection

The FCM-802/804 requires hydrogen to fuel the electro-chemical reaction. Connection of the hydrogen fuel will be at the rear of the module. The connection type is a female **G1/8 parallel BSP thread** with a face seal, this must be connected via an appropriate mating connector.

At installation the external hydrogen pipework must be bled of air or inert gas before operation. The hydrogen pipework must be checked periodically for leaks.



10.8 Hydrogen fuel physical requirements

The FCM-802/804 requires regulated fuel pressure to feed hydrogen into the cell. The inlet pressure for operation must be:

500mbar.g to 800mbar.g

The FCM-802/804 will consume a less than 70g/kWh at rated power. This is equivalent to 34slpm (FCM-802) and 56slpm (FCM-804) at rated power. It must be noted that the flow will spike high during hydrogen purges, which, if poorly regulated, can lead to a low pressure fault of the FCM.

It is required that the external system has an automatic shut-off valve as part of the hydrogen feed line. This allows the hydrogen to be isolated at source if required.

11 Maintenance procedures

11.1 User maintenance

The user can perform the following maintenance on the FCM-802/804:

- · Monthly filter inspection
- · Filter change
- · Troubleshooting (see below)

Not performing these basic checks will reduce unit efficiency. For all other maintenance tasks, contact Intelligent Energy Ltd.

11.2 Contact Intelligent Energy Product Support Team

In the event of a fault with the FCM-802/804, please contact the Intelligent Energy Product Support Team. Either contact your local representative or email:

servicing@intelligent-energy.com

Please have the part number of your product and the serial number (on the name plate). The part numbers are:

802: 10004360

804: 10004361

12 Trouble-shooting guide

12.1 Possible causes of faults

Fault	Cause	Action
	No command to start	Verify that the module is in Enable and Run modes (see section 6.5 Communications)
No power from the	Hydrogen leak	See 12.2 Check for fuel leak
module	Incorrect hydrogen pressure	See 12.3 Fuel check procedure
	No power provided	See 12.4 Electrical system check procedure
	Fuel cell is over temperature	See 12.5 Stack temperature check procedure





No power from FCM Check that the hydrogen source Refuel the hydrogen source no has pressure available (application specific) yes Check the hydrogen supply Open the hydrogen supply is fully open between the no (application specific) source and the 800 unit yes ¥ Check that the regulator Increase pressure to no pressure is >500mbar.g 650mbar.g ±150mbar.g yes ¥ Check that the regulator Reduce pressure to no pressure is <800mbar.g 650mbar ±150mbar yes ¥ Check that the fuel pressure is maintained during a purge yes Ŵ Ensure that the stored Has the tank been purged gas is at the correct no with hydrogen? The purity concentration must be >99.9% hydrogen yes ¥ Provide details of hydrogen Does the fuel supply meet no quality specification to IE -1 the fuel requirements? Product Support Team yes ¥ Restart FCM

12.3 Fuel check procedure

Isolate hydrogen source, contact IE Product Support Team

12.4 Electrical system check procedure



12.5 Stack temperature check procedure



12.6 Filter change procedure

- 1 Switch off the Enable and Run signals.
- 2 Isolate hydrogen supply.
- 3 Wait 15 minutes.
- 4 Remove two quarter turn thumb screws from the frame on the front of FCM-802/804.
- 5 Remove the retaining clamp.
- 6 Pull top of frame forward. **Note**: Take care not to touch the fuel cell. Potentially live components
- 7 The dirty filter can be lifted out.
- 8 Discard dirty filter.
- 9 Place clean filter in front of FCM-802/804 and refit frame and screws.

Do not touch the fuel cell stack during this procedure

13 Control parameters and standard factory setting

The FCM 800 series configuration is factory settable. If there is a need to adjust the configuration after installation contact Intelligent Energy Product support.

13.1 Power Setup Configuration (802)

Parameter	Unit	Range	Factory Setting (24V)	Factory Setting (48V)
Target Output Voltage	V	15.0 to 56.0	26	52
Delayed Start Under-Voltage	V	0.0 to 60.0	24	48
Delayed Start Qualification Time	S	0 to 14400	60	60
Immediate Start Under-Voltage	V	0.0 to 60.0	22	46
Delayed Stop Over-Voltage	V	0.0 to 60.0	32	54
Delayed Stop OV Qualification Time	S	0 to 3600	60	60
Delayed Stop Under-Current	А	0.0 to 120.0	4	4
Delayed Stop UC Qualification Time	S	0 to 3600	20	20
Deny Start Under-Voltage	V	0.0 to 50.0	20	40
System Index	-	1 to 8	1	1
Output Voltage Rise Rate	V/s	0.017 to 2000.00	0.017	0.017
Minimum Output Voltage	V	0.0 to 60.0	24	48
Output Current Limit	А	0.0 to 80.0	60	80
Hard Set Output Voltage	-	0 or 1	0	0
Output Power Limit	W	0 to 2400	1920	2400
Restart Delay	S	0 to 3600	20	20

13.2 Power Setup Configuration (804)

Parameter	Unit	Range	Factory Setting (24V)	Factory Setting (48V)
Target Output Voltage	V	15.0 to 56.0	26	52
Delayed Start Under-Voltage	V	0.0 to 60.0	24	48
Delayed Start Qualification Time	S	0 to 14400	60	60
Immediate Start Under-Voltage	V	0.0 to 60.0	22	46
Delayed Stop Over-Voltage	V	0.0 to 60.0	32	54
Delayed Stop OV Qualification Time	S	0 to 3600	60	60
Delayed Stop Under-Current	А	0.0 to 120.0	6	6
Delayed Stop UC Qualification Time	S	0 to 3600	20	20
Deny Start Under-Voltage	V	0.0 to 50.0	20	40
System Index	-	1 to 8	1	1
Output Voltage Rise Rate	V/s	0.017 to 2000.00	0.017	0.017
Minimum Output Voltage	V	0.0 to 60.0	24	48
Output Current Limit	А	0.0 to 120.0	105	120
Hard Set Output Voltage	-	0 or 1	0	0
Output Power Limit	W	0.0 to 4000	2880	4000
Restart Delay	S	0 to 3600	20	20

14 Spare parts, storage and disposal

14.1 Spare parts

The customer changeable spare part list is:

Air filter	10004602
Terminal cover	10005293

Only use Intelligent Energy approved parts.

14.2 Disposal

When the FCM-802/804 reaches end of life, please contact Intelligent Energy Product Support or your local representative for support with reconditioning or disposal.

14.3 Storage

The FCM-802/804 must be stored as follows:

- The FCM-802/804 must be stored level, resting on the base
- · The FCM-802/804 must be stored in a sealed plastic bag
- · Do not place desiccant inside the plastic bag
- The FCM-802/804 can be stored in temperatures between -40°C and +70°C
 However, the ideal temperature for storage is between +10°C and +25°C
- · The FCM-802/804 must be protected from moisture and dust during storage
- · The FCM-802/804 hydrogen inlet port must be protected during storage

14.4 Transportation

For transport, follow the guidance for storage taking care that:

- · The FCM-802/804 must be transported in a level orientation
- The FCM-802/804 must not be subjected to mechanical shocks where possible
- The FCM-802/804 must be protected from moisture and dust during transport
- · The FCM-802/804 hydrogen inlet port must be protected during transport

15 EU Declaration of Conformity In accordance with EN ISO 17050-1:2010

This Declaration of Conformity is issued under the sole responsibility of the manufacturer:

Intelligent Energy Limited

of

Charnwood Building, Holywell Park, Ashby Road, Loughborough, Leicestershire, United Kingdom, LE11 3GB

In accordance with the following Directive(s):

- 2006/42/EC The Machinery Directive
- 2014/30/EU The Electromagnetic Compatibility Directive
- 2014/34/EU The ATEX Directive
- · 2011/65/EU The RoHS 2 Directive
- · Intelligent Energy Limited hereby declares that:
- · FCM 802 2.5kW Standalone Stationary Power Fuel Cell Module (Negative Earth)
- · Part Number: 10004360

and

- · FCM 804 4kW Standalone Stationary Power Fuel Cell Module (Negative Earth)
- · Part Number: 10004361

Are in conformity with the applicable requirements of the Directives set out above and the following standards documents:

EN 62282-3-100:2012	Fuel cell technologies – Stationary fuel cell power systems – Safety
EN 60204-1:2006+A1:2009	Safety of machinery – Electrical equipment of machines – General requirements
EN 60079-10-1:2015	Classification of areas – Explosive gas atmospheres
EN 61000-6-2:2005	Electromagnetic compatibility (EMC) – Generic standards – Immunity for industrial environments
EN 61000-6-4:2007+A1:2011	Electromagnetic compatibility (EMC) – Generic standards – Emission standard for industrial environments
EN 62061:2005	Emission standard for industrial environments – Safety of machinery – Functional safety of safety- related electrical, electronic and programmable electronic control systems

Signed for and on behalf of Intelligent Energy Limited: Dr Chris Dudfield Chief Technical Officer Intelligent Energy Limited, Charnwood Building, Holywell Park, Ashby Road,

Loughborough, Leicestershire, United Kingdom, LE11 3GB

19th December 2018

© Intelligent Energy Limited 2018. All Rights Reserved.

The information contained herein must be held in strict confidence and properly safeguarded by the recipient at all times. It may not be copied or reproduced, or disclosed to any other party, except with the prior written authorisation of Intelligent Energy.

The information contained in this publication is intended only as a guide and is subject to change as a result of the constant evolution of Intelligent Energy's business and its technology. This publication and its contents do not include all details which may be relevant to particular circumstances and should not be regarded as being a complete source of Information. To the fullest extent permitted by law, Intelligent Energy offers no warranty as to the accuracy of the content of this publication, shall not be liable for the content of this publication and no element of this publication shall form the basis of any contractual relationship with a third party. Printed December 2018 (FCMUM_DH_1118).

Published by: Intelligent Energy Ltd, Charnwood Building, Holywell Park, Ashby Road, Loughborough LE11 3GB. Tel: 01509 271271

(Registered in England with company number: 03958217).