UNIVERSIDAD DE GUANAJUATO

DIVISIÓN DE INGENIERÍAS, CAMPUS IRAPUATO-SALAMANCA

DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA MECÁNICA

XXX VERANO DE LA CIENCIA UG

PROYECTO:

GENERACIÓN DE ELECTRICIDAD VERDE CON APLICACIÓN A ELECTROMOVILIDAD

AUTORES:

JOSÉ EMMANUEL CU RANGEL

DIEGO ANDRÉS GONZÁLEZ URIBE

ASESOR:

DR. J. LUIS LUVIANO ORTIZ

MANUAL CFD PARA CELDAS DE COMBUSTIBLE PEMFC CON GEOMETRÍA MULTICANAL

Objetivo

El objetivo de este manual es proporcionar a estudiantes una guía técnica que facilite la simulación de una celda de combustible *PEMFC* en *ANSYS Fluent*, como un primer acercamiento al entorno *ANSYS* y al funcionamiento de las celdas de combustible, considerando que cuenta con un conocimiento básico previo.

Alcance y limitaciones

En este manual se hizo para la simulación de una configuración especifica de una celda de combustible *PEMFC* de canales rectos utilizando modelos predefinidos en *ANSYS Fluent*, es necesario ajustar los parámetros si se desea utilizar otro tipo de geometría.

Tabla de contenido

I. Introducción 3

II. Nombramiento de las secciones 3

III. Mallado de la geometría 9

IV. parámetros electroquímicos 14

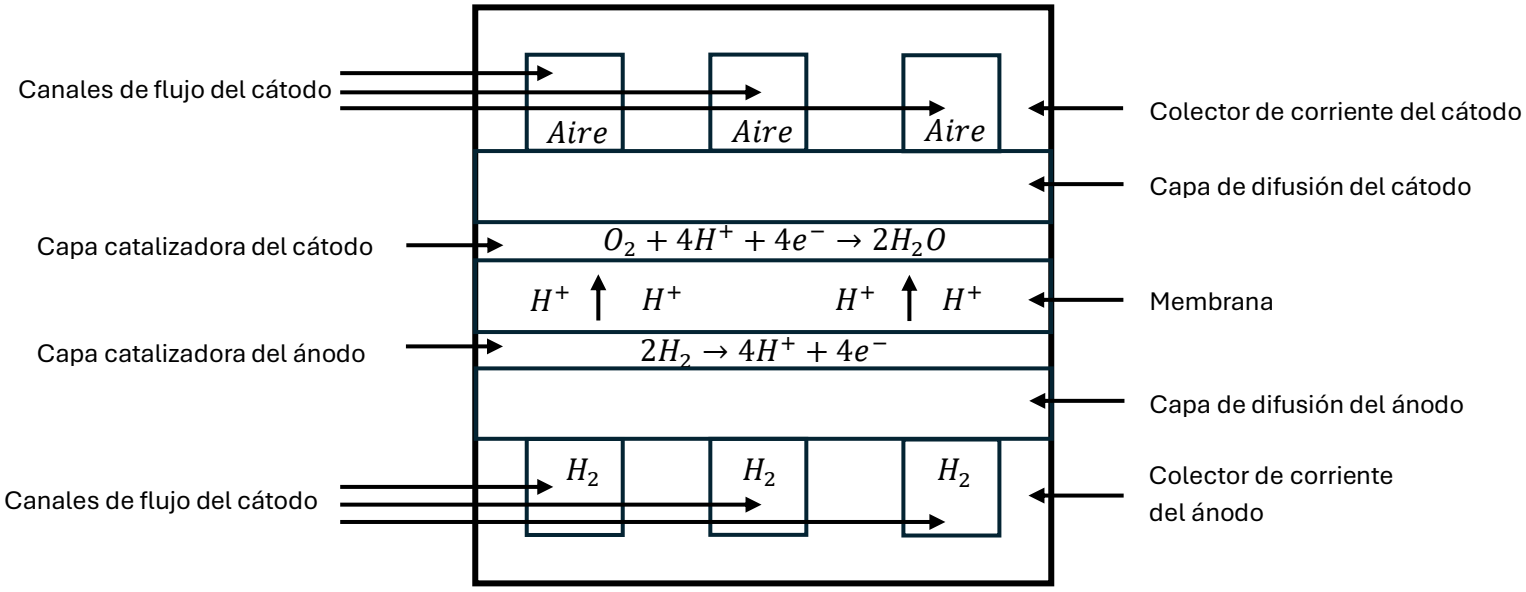
V. Condiciones de Operación y suposiciones 14

VI. Modelo Fluent 15

VII. Resultados 23

I. Introducción

En este manual se explica cómo realizar la simulación de una celda de combustible con múltiples canales rectos. Se detallan paso a paso los procesos: importar la geometría, hacer el mallado, configurar y resolver el modelo *PEMFC* en *FLUENT*, usando un arreglo con flujo en contracorriente.



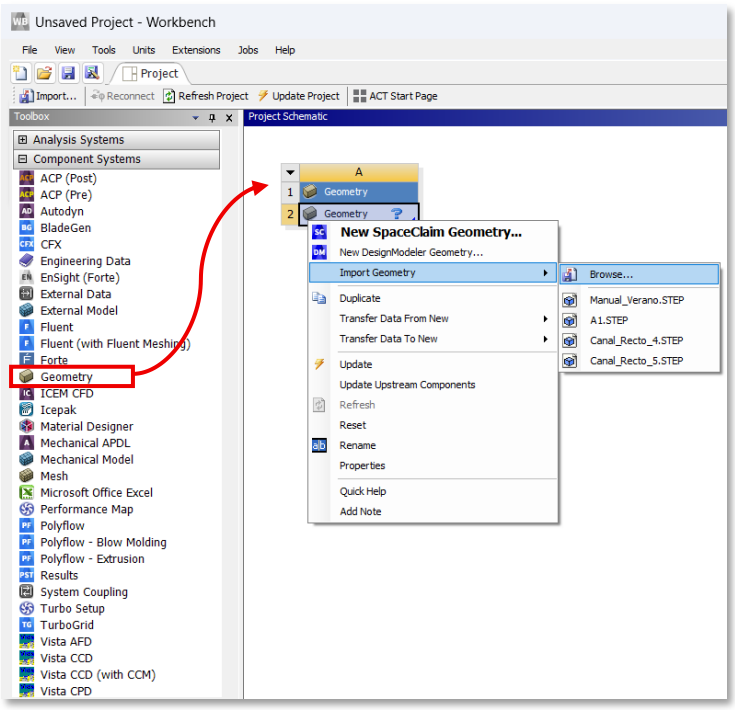
II. Nombramiento de las secciones

Importar la geometría:

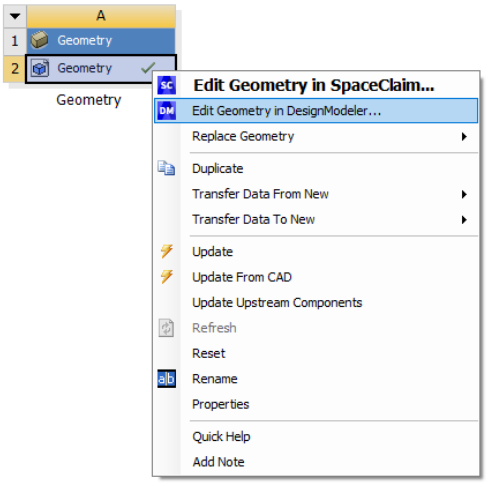
1. Una vez abierto ***ANSYS Workbench*** y con un archivo de proyecto nuevo creado, se debe arrastrar el módulo **"Geometry"** dentro del espacio de trabajo.

Este módulo se encuentra en la sección **"Component Systems > Geometry".**

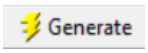
2. El procedimiento para importar la geometría es el siguiente:
   - **Geometry > Import Geometry > Browse**

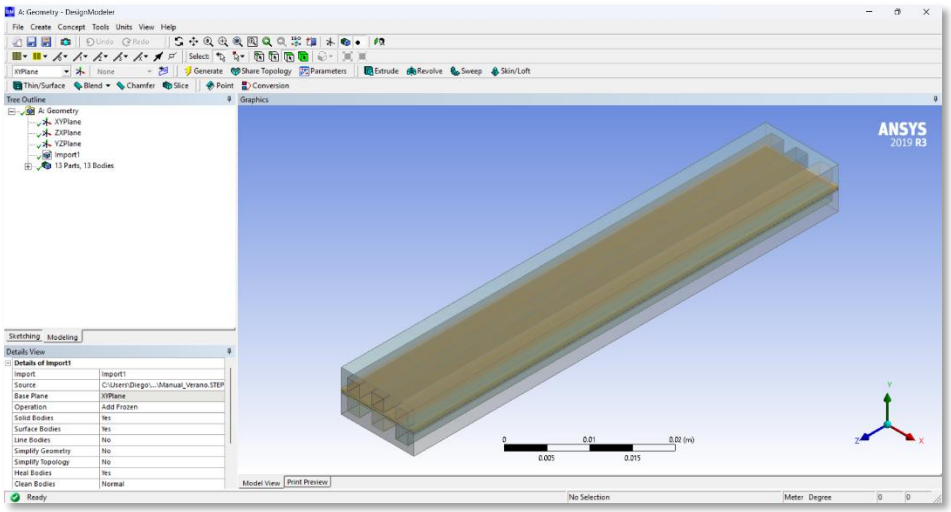


3. Una vez importada la geometría se debe acceder a **“DesignModeler”** para editar y crear las secciones nombradas de la geometría:
   - **Geometry > Edit Geometry in DesignModeler**



4. Dentro del entorno de **“DesignModeler”** se debe generar la geometría recién importada con el botón **“Generate”** o bien usando el comando **“F5”.**

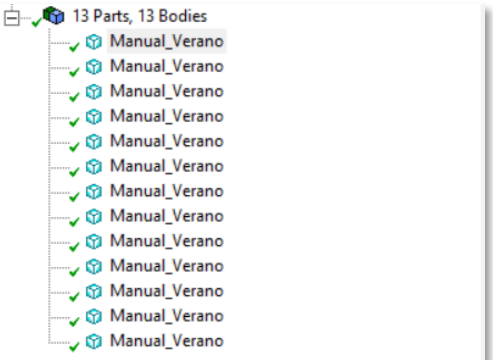




Este paso es fundamental, ya que cada vez que se realice una operación debe ejecutarse este comando.

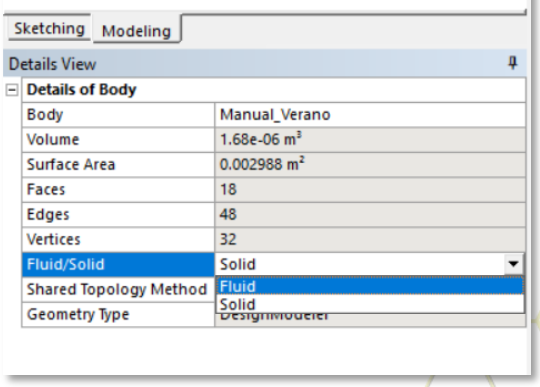
Una vez terminado el proceso, debería poder verse la geometría como se muestra en la siguiente imagen.

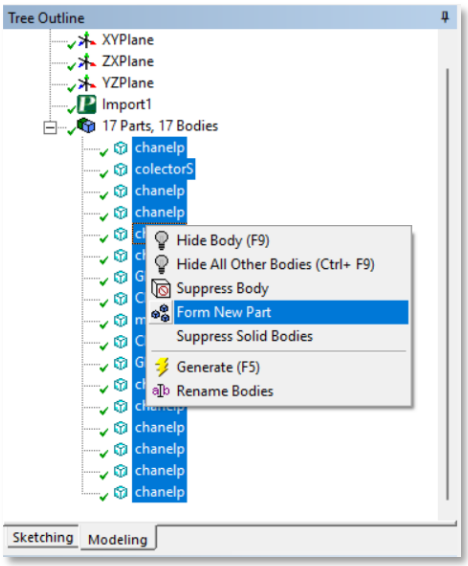
5. Primero se debe establecer para cada cuerpo si es sólido o fluido, para esto se sigue la siguiente secuencia de pasos:
   - **Geometry > 13 Parts, 13 Bodies > Body > Fluid/Solid > Fluido o Solido**



Esta operación debe repetirse para cada cuerpo de acuerdo con la siguiente lista:

- **Colectores como Sólido**
- **Canales como Fluido**
- **GDL como Fluido**
- **Capa Catalítica como Fluido**
- **Membrana como Fluido**

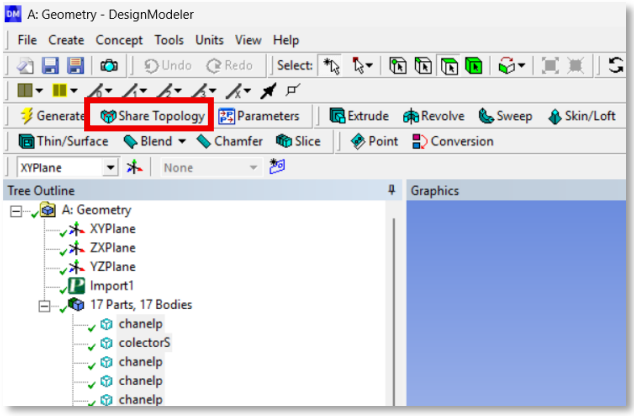


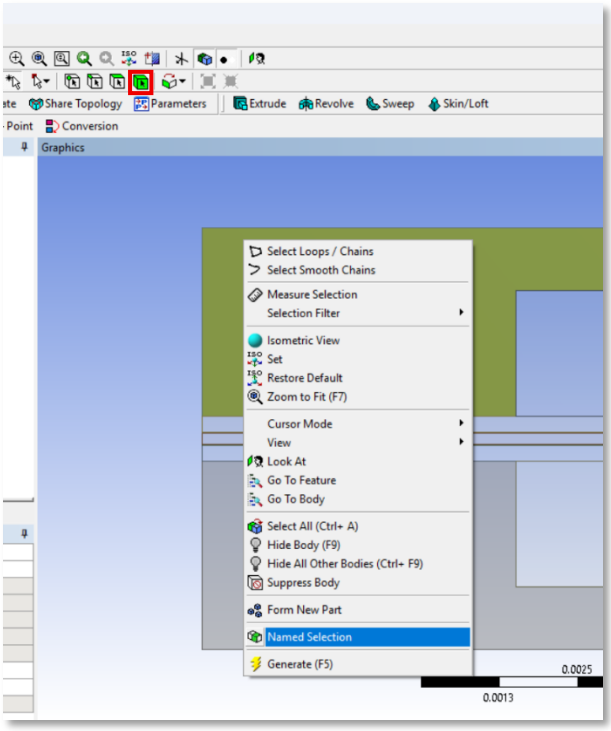


6. El siguiente paso es generar una sola parte, esto se consigue seleccionando todos los cuerpos desde el árbol de elementos y siguiendo la secuencia.

- **Clic Derecho > Form New Part**

7. Una vez que se tiene una sola parte, se debe aplicar un **“Share Topology”** para permitir el contacto y comunicación entre superficies al momento de mallar y de simular, para esto simplemente se debe hacer clic en el botón **“Share Topology”** ubicado junto a **“Generate”**.

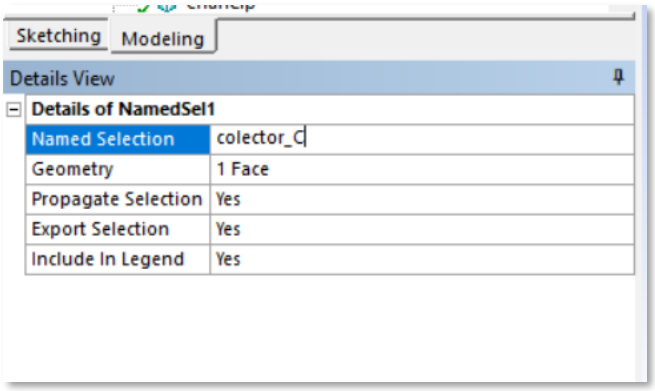




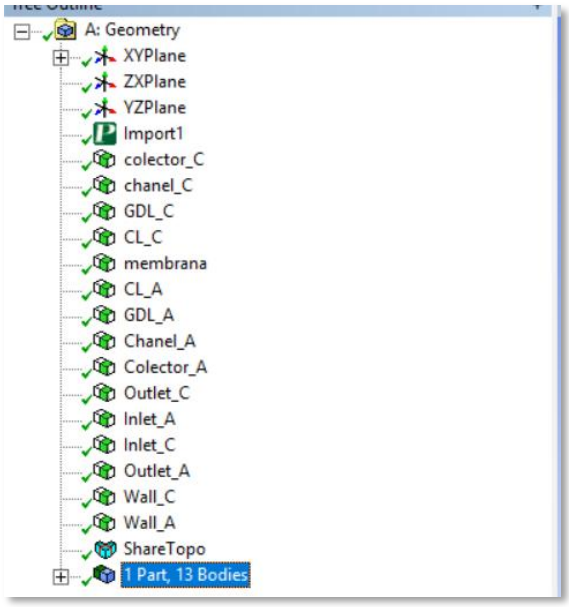
8. Para crear las **“Named Selections”** se debe de seleccionar el cuerpo deseado con la opción de selección de cuerpo y se debe seguir la secuencia:

- **Seleccionar Cuerpo > Clic Derecho > Named Selection**

La asignación de nombre se realiza desde el menú de detalles:

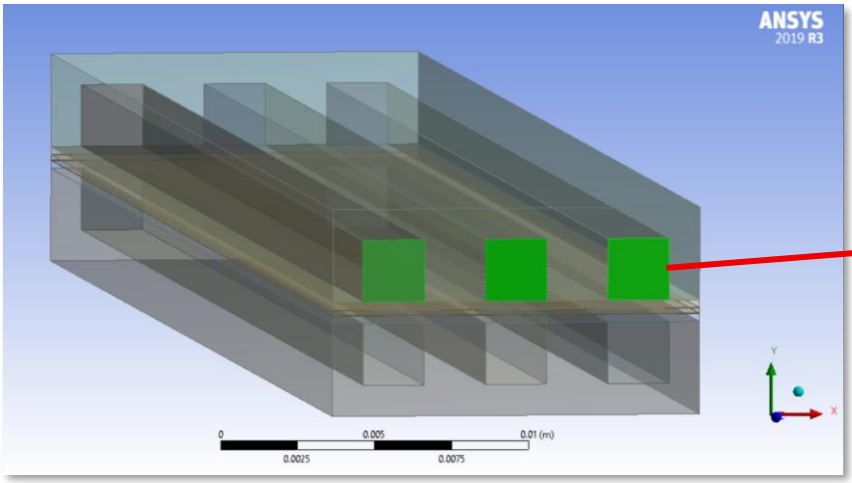


- **Details of Named Selection > Named Selection > Nombre del cuerpo>Generate**



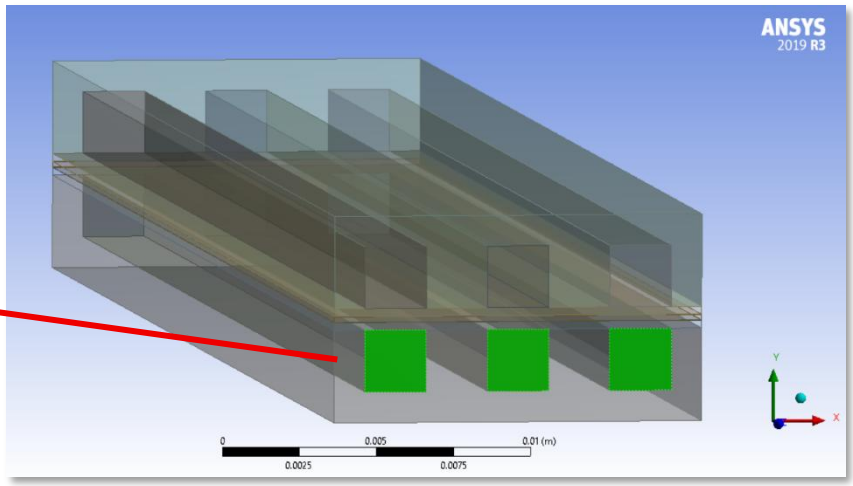
Se deben nombrar cada uno de los cuerpos siguiendo la estructura de la celda de combustible como se muestra en la siguiente imagen. Es importante que los canales del ánodo y del cátodo se agrupen cada uno en una única selección nombrada.

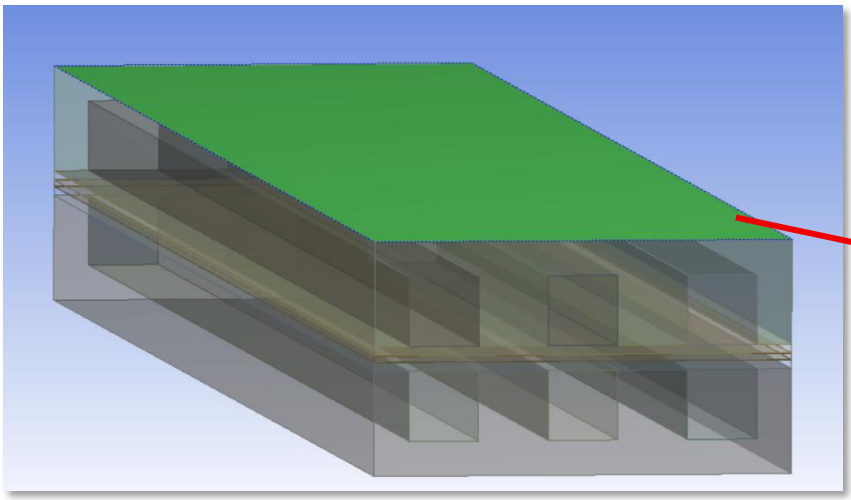
9. Con la herramienta de selección en el modo de selección de caras deben aplicarse **“Named Selections”** a las entradas y salidas de los canales, así como para las caras más grandes de los colectores tal como se muestra en las imágenes siguientes.



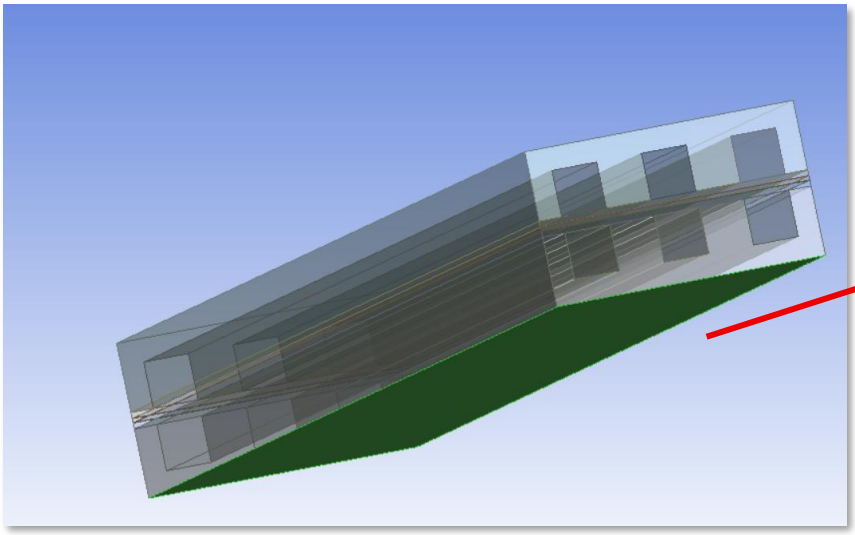
Outlet_C

Inlet_A



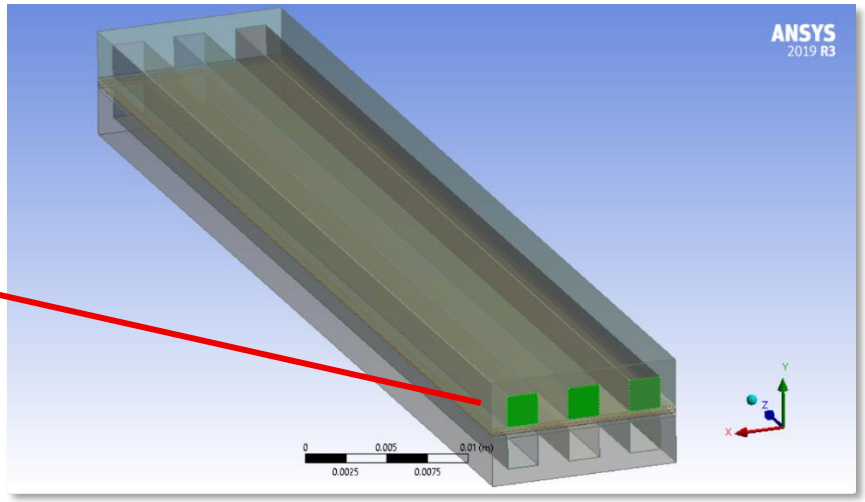


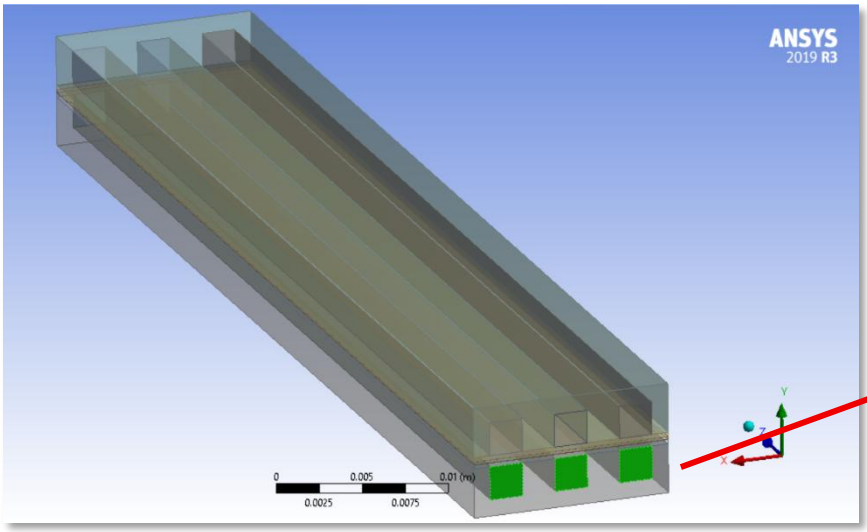
Wall_C



Wall_A

Inlet_C



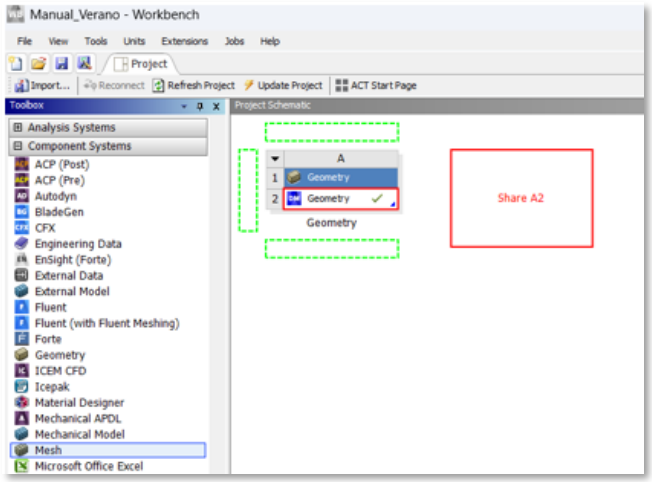


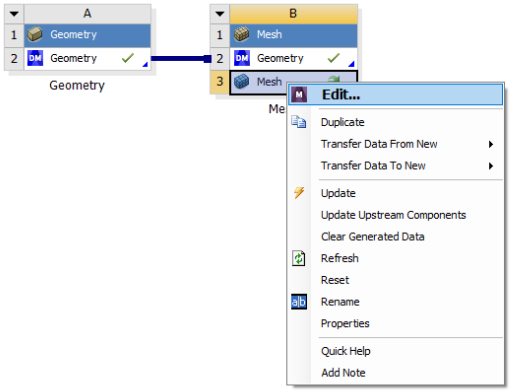
Outlet_A

Terminando con todas las **“Named Selections”,** se puede cerrar **“DesignModeler”.** Ahora se puede observar que el módulo de **“Geometry”** pasa a tener una marca que indica que está correcto.

III. Mallado de la geometría

10. A continuación, se debe agregar un módulo de **“Meshing”** vinculado al módulo de **“Geometry”** con la secuencia **“Component Systems > Mesh > Share A2”**. Esto genera que el módulo de **“Meshing”** importe de manera automática la geometría de la celda.



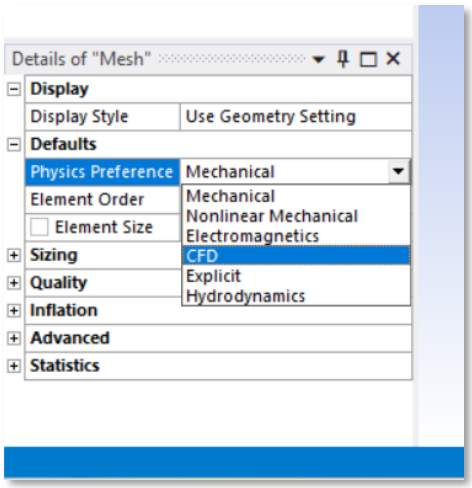


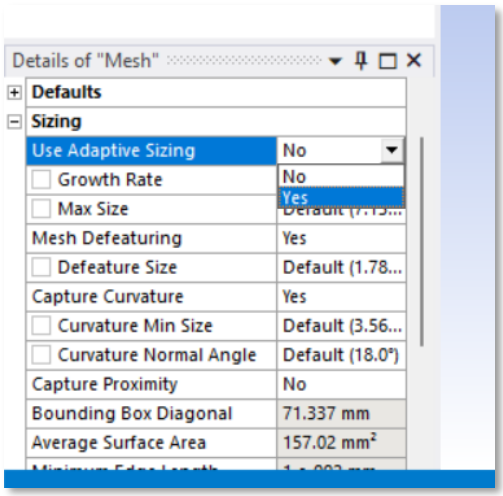
Para poder generar la malla de la geometría se debe dar clic derecho en **Mesh > Edit**.

11. Dentro del entorno de **“Meshing”** lo primero que se debe hacer es establecer los ajustes globales de la malla, para ello debemos realizar las siguientes secuencias:

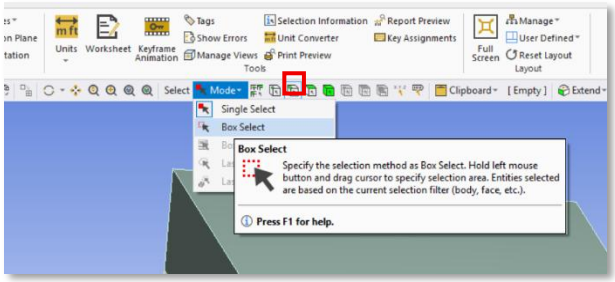
Mesh > Details of Mesh

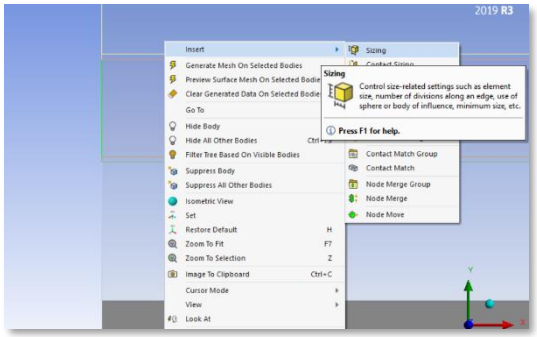
- **Default > Physics Preferences > CFD**
- **Sizing > Use Adaptive sizing > Yes**





12. El sigueinte paso es aplicar los **“Sizing”** para poder mallar, para ello se utiliza la herramienta de **“Box Select”** en modo de selección de aristas.



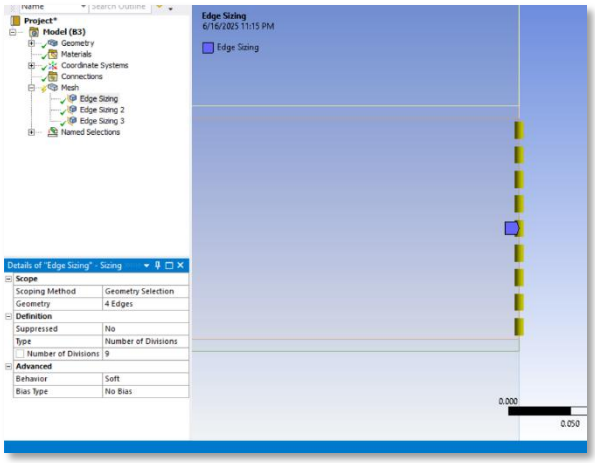


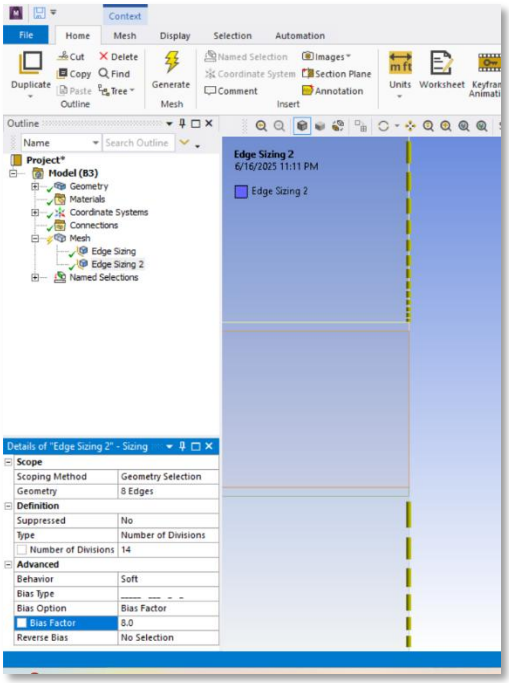
El primer **“Sizing”** a aplicar es en la membrana, para esto se deben seleccionar las aristas verticales de la misma y una vez resaltadas se debe seguir la siguiente secuencia:

- **Clic Derecho > Insert > Sizing**

Dentro de la configuración del **“Sizing”** se deben realizar las siguientes secuencias:

- **Definition > Type > Number of Divisions**
- **Definition > Number of Divisions > 9**

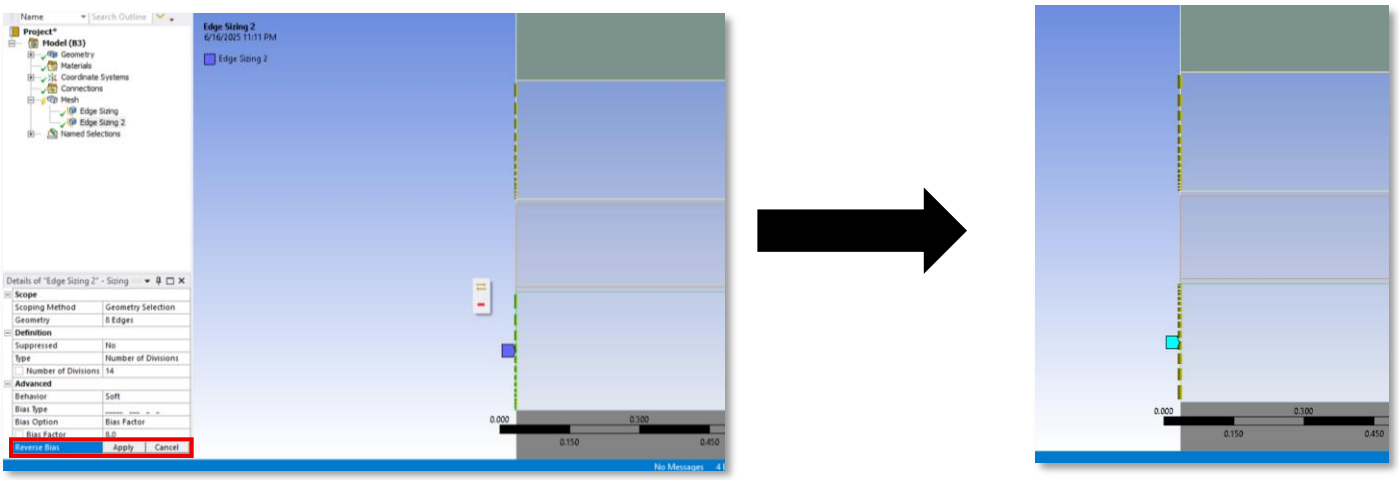




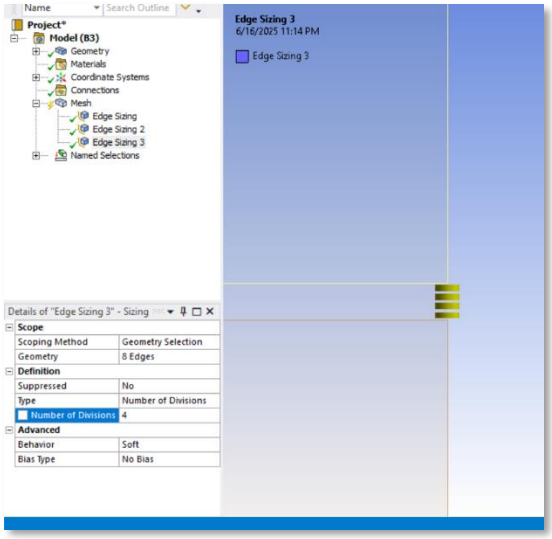
13. Para el segundo **“Sizing”** seleccionamos las aristas verticales de ambas GDL y las configuramos con las siguientes indicaciones:

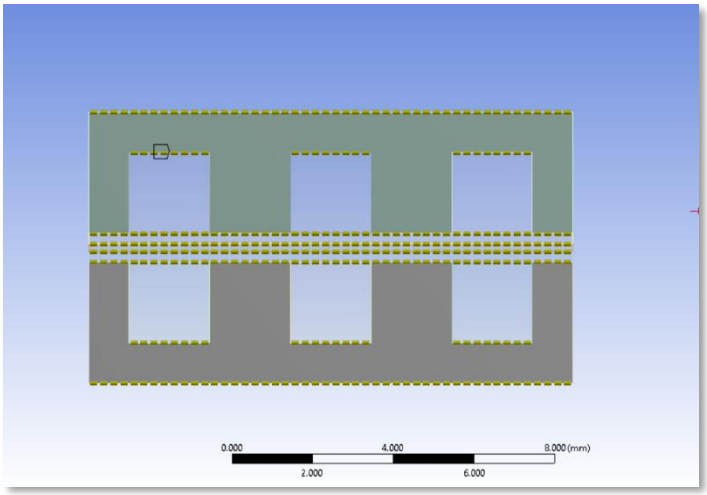
- **Definition > Type > Number of Divisions**
- **Definition > Number of Divisions > 14**
- **Advanced > Bias Type > — — - -**
- **Advanced > Bias Factor > 8.0**

Si la dirección del decremento debido al **“Bias”** es opuesta a la deseada, se debe seleccionar ese borde o bordes y utilizar la opción de **“Reverse Bias”**.



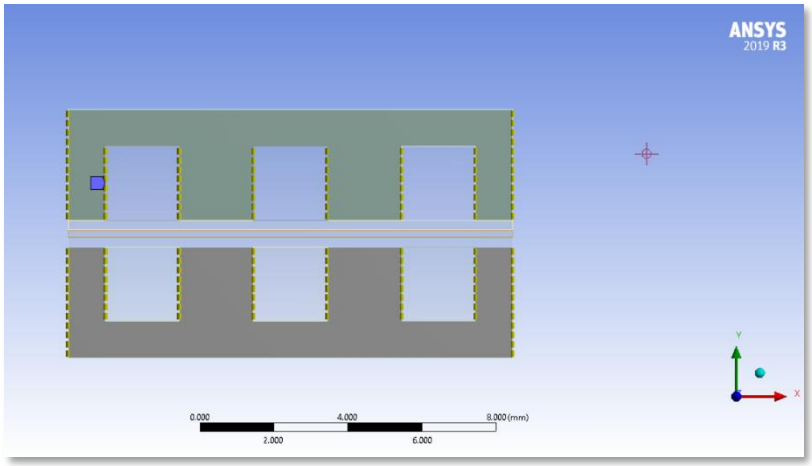
14. Para el tercer **“Sizing”** seleccionamos las aristas verticales de ambas capas catalizadoras y las configuramos con las siguientes indicaciones:
    - **Definition > Type > Number of Divisions**
    - **Definition > Number of Divisions > 4**



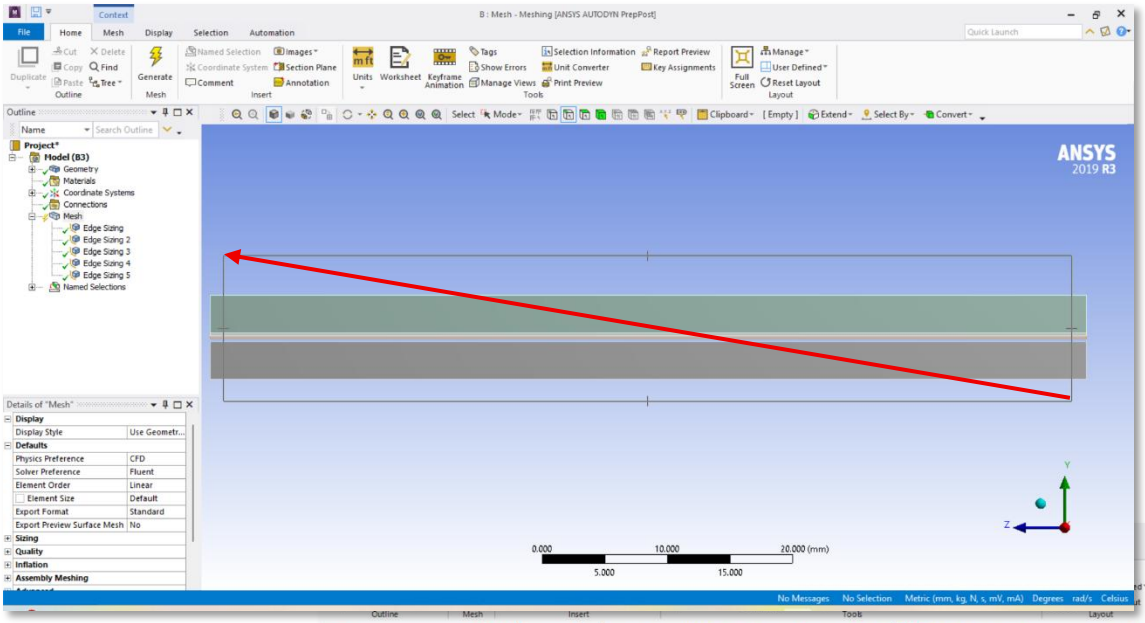


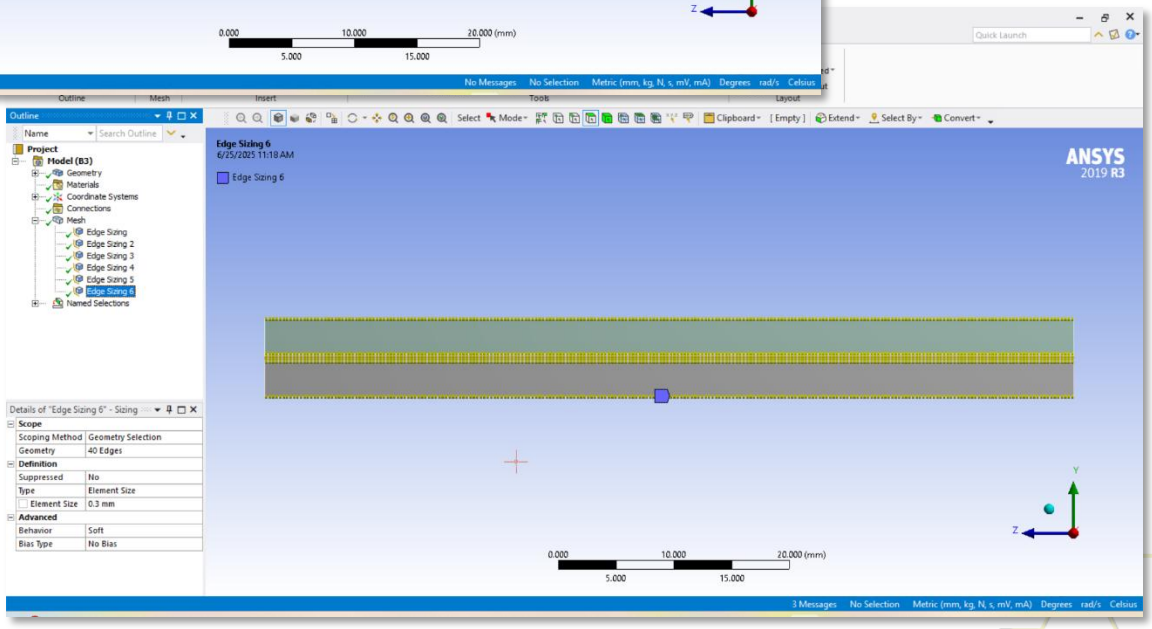
15. Para el cuarto **“Sizing”** se seleccionan las aristas horizontales de la celda vista desde el **“plano XY”** y se configuran con las siguientes indicaciones:
    - **Definition > Type > Element size**
    - **Definition > Element size > 0.25 mm**

16. Para el quinto **“Sizing”** se seleccionan las aristas verticales de la celda vista desde el **“plano XY”** y se configuran con las siguientes indicaciones:
    - **Definition > Type > Element size**
    - **Definition > Element size > 0.25 mm**

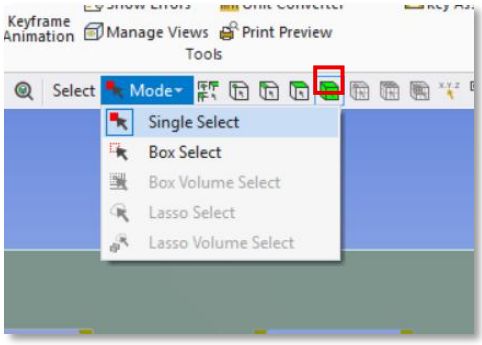


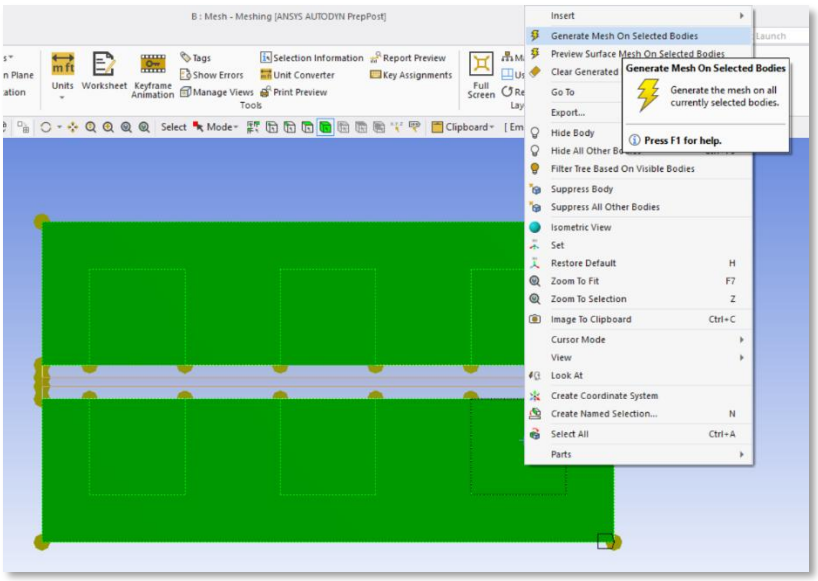
17. Para el último **“Sizing”** se seleccionan con una caja de derecha a izquierda toda la celda vista desde el **“plano YZ”** y se configuran con las siguientes indicaciones:
    - **Definition > Type > Element size**
    - **Definition > Element size > 0.3 mm**



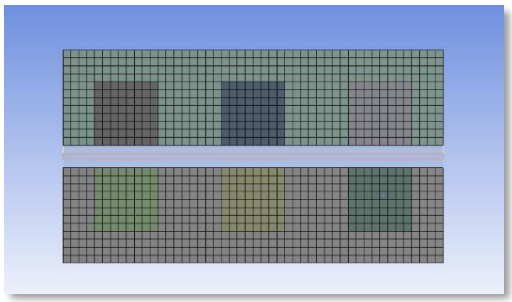


18. Por último, utilizamos la selección de cuerpos y el modo **“Single Select”** para seleccionar los colectores y canales, con clic derecho se usa la opción **“Generate Mesh On Selected Bodies”**.

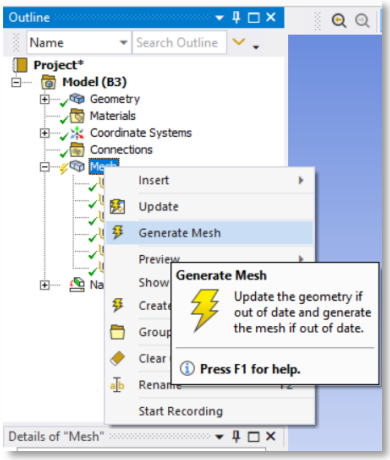


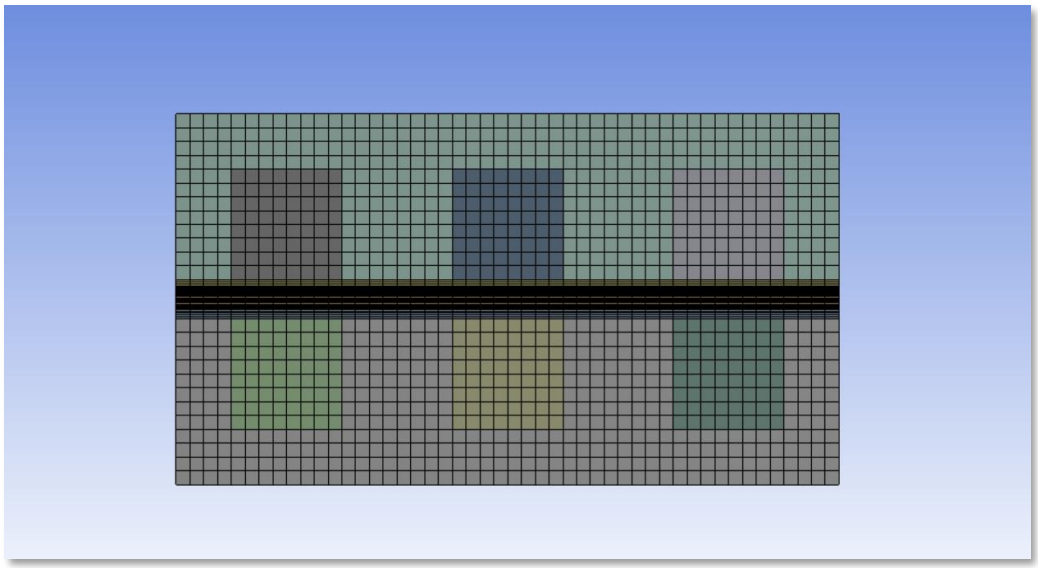


Nos queda esta malla como resultado:



19. Para finalizar el mallado, hacemos clic derecho sobre **“Mesh”**, damos clic en **“Generate Mesh”**, la malla resultante se muestra a continuación:





Una vez hecho esto ya podemos cerrar **“Meshing”**.

IV. Parámetros electroquímicos

Parámetros.	Unidades	Valores
Conductividad eléctrica del colector.	S/m	$1.25x10^{-5}$
Conductividad eléctrica de la capa de difusión.	S/m	53
Porosidad de la capa de difusión.	S/m	53
Porosidad del catalizador.	-	0.112
Porosidad de la capa de difusión.	-	0.4
Densidad de corriente de referencia del Ánodo.	A/m^2	$10x10^3$
Densidad de corriente de referencia del Cátodo.	A/m^2	3
Difusividad de referencia del Hidrogeno.	m^2/s	$1.1x10^{-4}$
Difusividad de referencia del Oxígeno.	m^2/s	$3.2x10^{-5}$
Difusividad de referencia del agua.	m^2/s	$7.35x10^{-5}$
Difusividad de referencia de otras especies.	m^2/s	$1.81x10^{-5}$
Voltaje de circuito abierto.	V	1.09
Temperatura de operación.	K	343
Estequiometria del Ánodo.	ζa	1.5
Estequiometria del Cátodo.	ζc	2
Presión de operación.	Pa	202650

Se enlistan las condiciones de frontera a las cuales fueron sometidas las celdas PEMFC.

Parámetros	Unidades	Valores
Fracción másica del Hidrogeno en la entrada del Ánodo	-	0.38
Fracción másica del Agua en la entrada del Ánodo	-	0.62
Fracción másica del Oxígeno en la entrada del Cátodo	-	0.21
Fracción másica del Agua en la entrada del Cátodo	-	0.79
Presión de salida del Ánodo	Pa	0
Presión de salida del Cátodo	Pa	0

V. Condiciones de operación y suposiciones

La celda de combustible opera bajo las siguientes condiciones:

• Gases puros e ideales de hidrógeno y oxígeno con una humedad relativa del 100 % a la entrada de los canales.

• Temperatura constante de 343 K en toda la celda.

• Presión total de 2 atm.

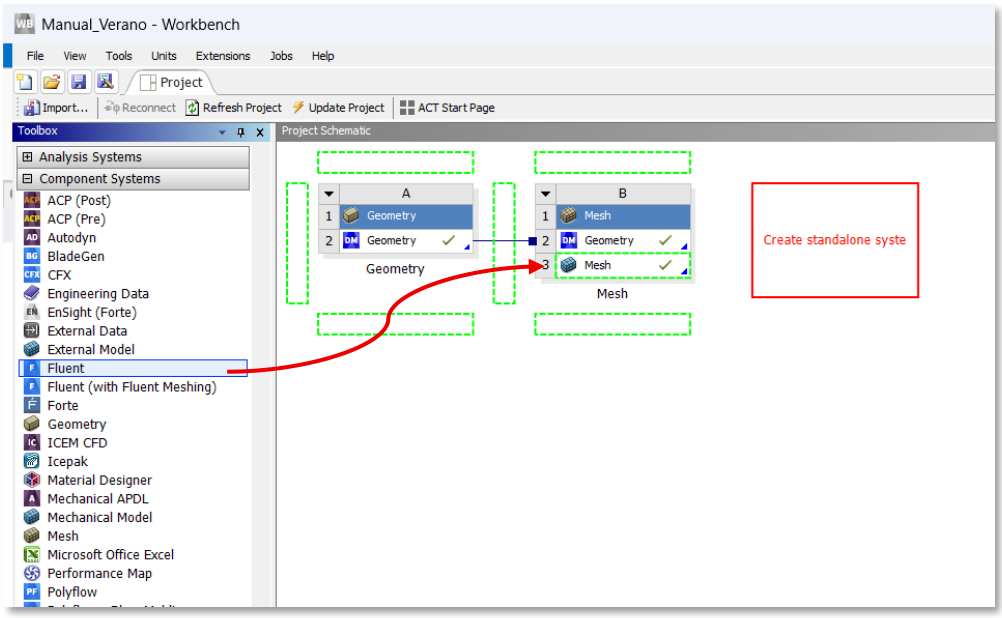
• Flujo laminar en los gases.

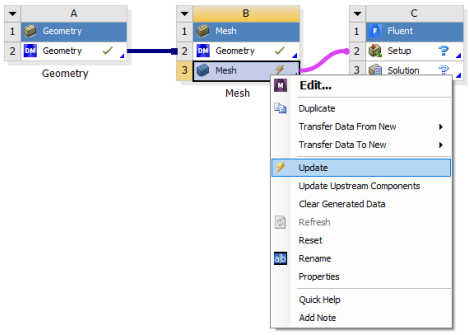
• Elementos porosos se tomaron con propiedades homogéneas y anisotrópicas.

• Voltaje de la celda a circuito abierto de 1.09 V.

VI. Modelo Fluent

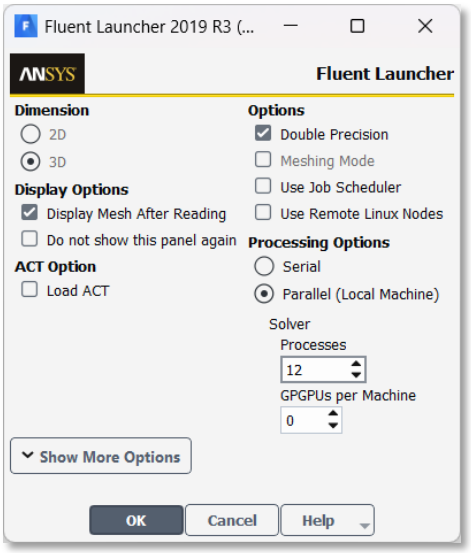
20. Ubicamos el componente de **“Fluent”** dentro de la pestaña de **“Component Systems”**. Arrastramos el componente **“Fluent”** y lo soltamos al lado de **“Mesh”**.





Es necesario recargar la malla antes de poder iniciar el modelo en *FLUENT*.

- **Clic derecho sobre Mesh > update**

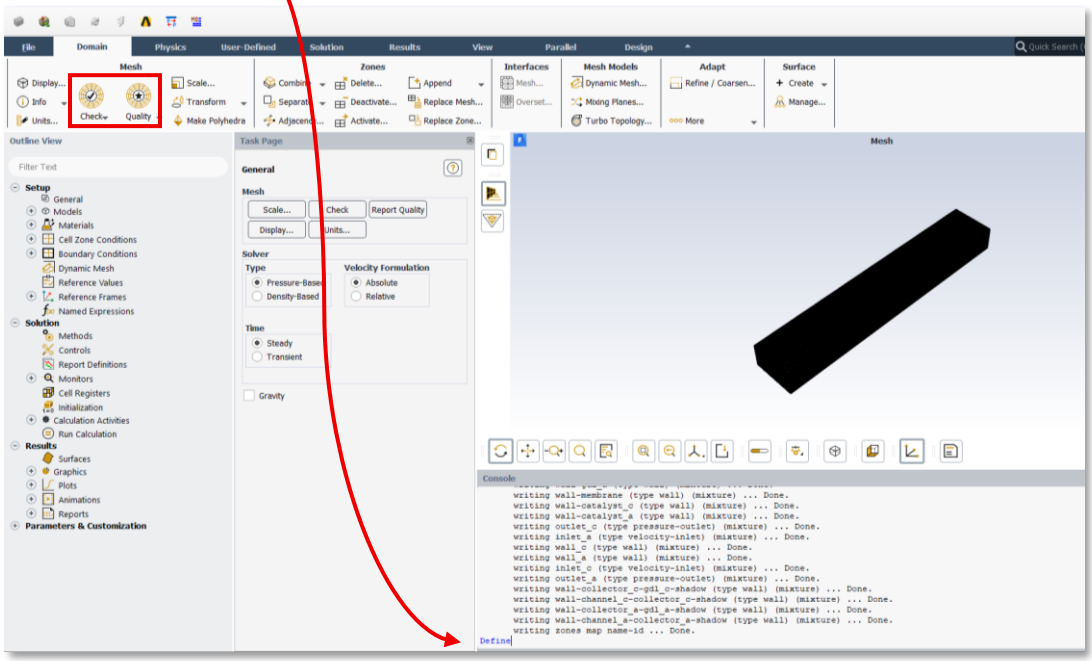


Iniciamos el modelo **“Fluent”.**

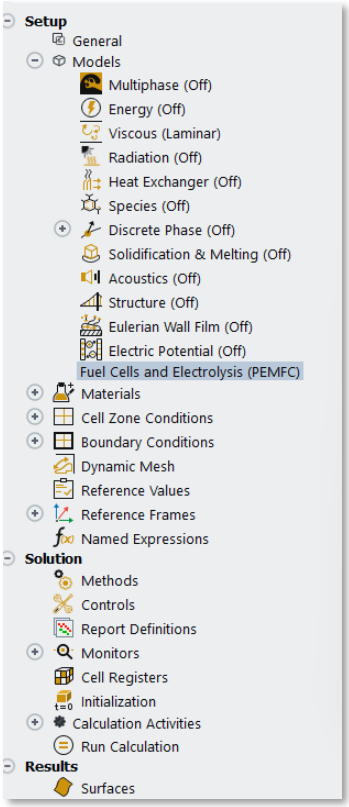
21. Activamos en **“Options> Double Precision”** y en **“Processing Options >Parallel (Local machine)”**, en **“Processes”** especificamos la cantidad de núcleos que utilizaremos para nuestra simulación.

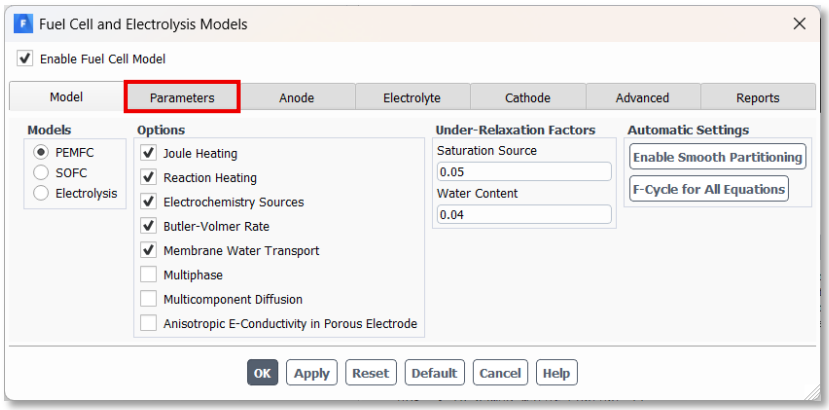
22. Verificamos la malla haciendo clic en **“Check”** y en **“Report Quality”** con el fin de detectar algún problema en el mallado. Es necesario activar el modelo *PEMFC* mediante de comandos. Escribimos en la consola el siguiente comando:

- **define>models>add>3**

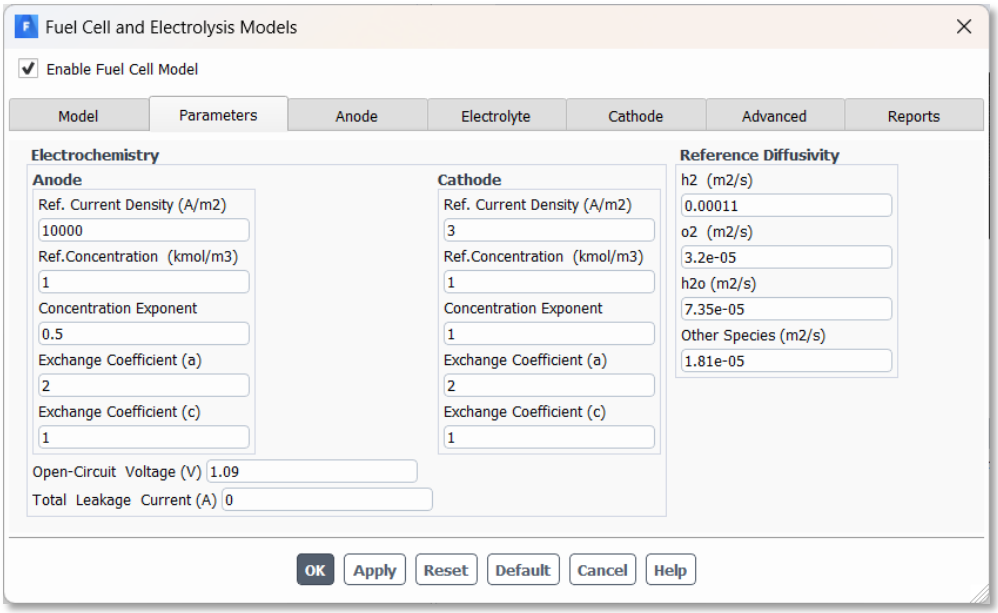


Una vez hecho esto nos saldrá el modelo de *PEMFC*, abrimos el módulo y nos saldrá una ventana, no es necesario modificar nada, por consiguiente, abriremos la sección **“Parameters”**.

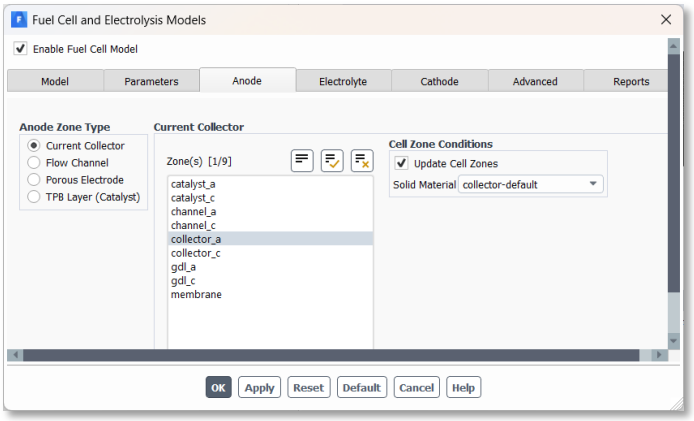


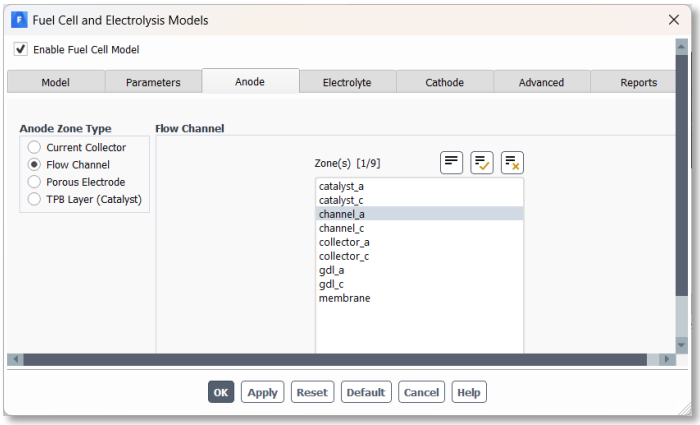


23. Aquí vamos a definir las propiedades electroquímicas:

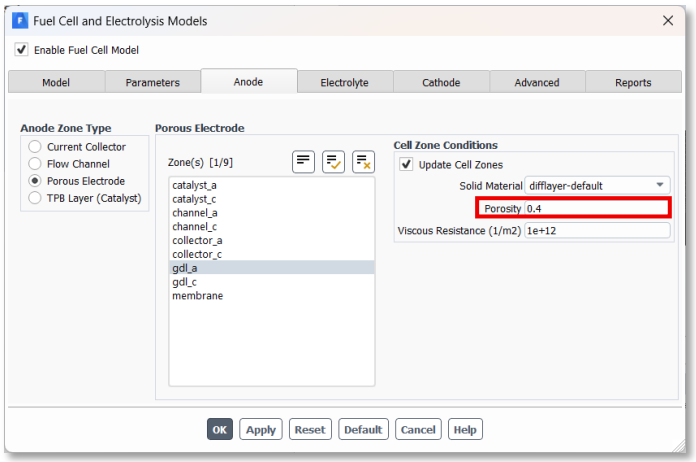


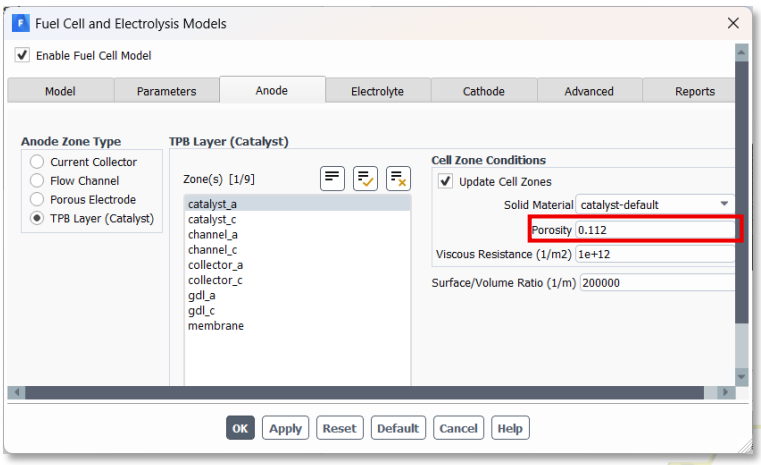
24. En la sección de **“Anode”** se debe elegir el cuerpo y la zona asociada.



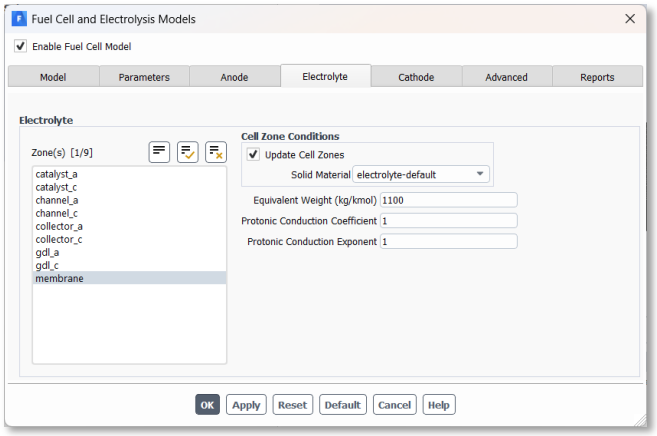


Para **“Porous Electrode”** se debe especificar una porosidad de 0.4 y para **“TPB Layer”** una porosidad de 0.112.



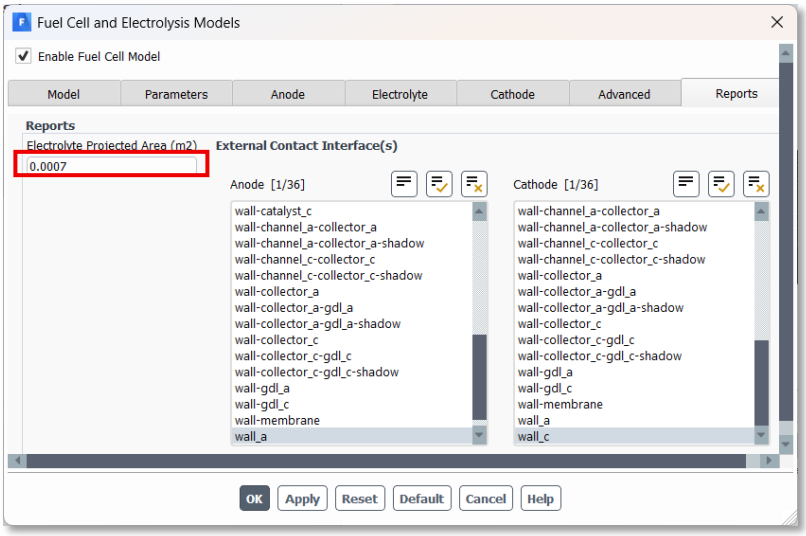


25. En la sección **“Electrolyte”** seleccionamos la membrana.



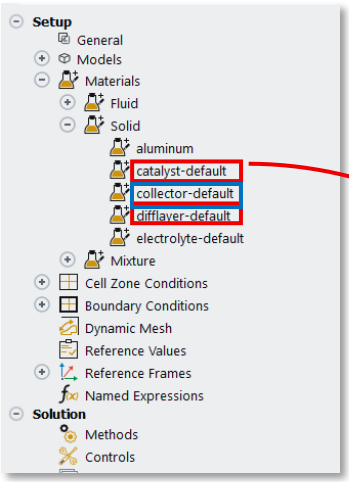
Para definir la sección de **“Cathode”** se usarán los mismos valores que la sección **“Anode”**.

26. En la ventana de **“Reports”** especificaremos los bordes de la celda y en **“Electrolyte Projected Area”** se define su sección transversal.

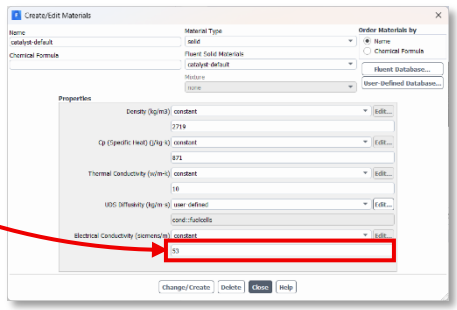


Si el procedimiento fue exitoso, se mostrará el mensaje en la consola:

```
Note: Enabling energy equation as required by material density method.
```



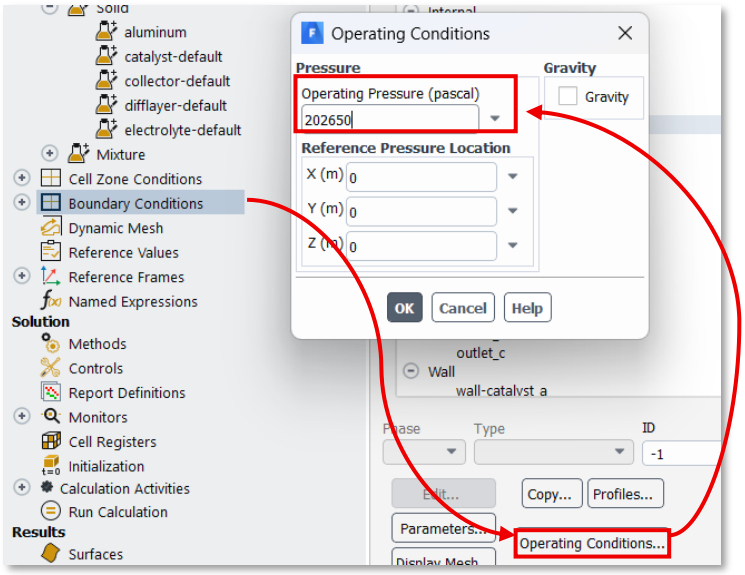
27. Modificaremos la conductividad eléctrica de los materiales sólidos, **“Difflayer-default”** y **“Catalyst-default”** a un valor de 53 S/m y el de **“Collector-default”**: 1.25x10^5 S/m

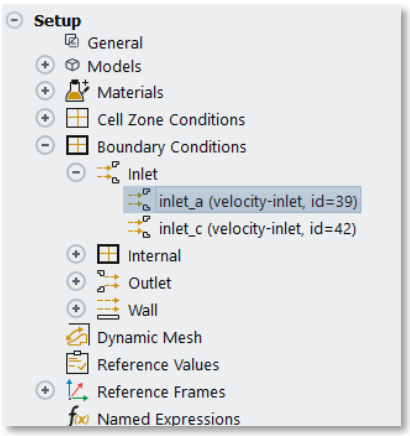


28. La presión de operación utilizada es de 2 atm o 202650 Pa.

Seleccionamos de la siguiente forma:

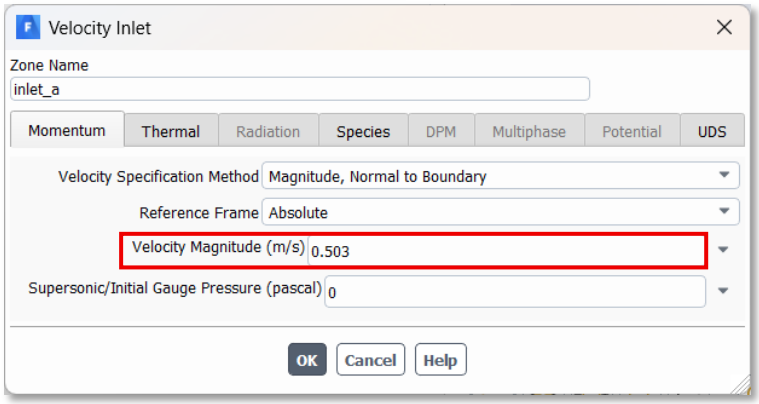
- **Boundary conditions >Operating conditions**

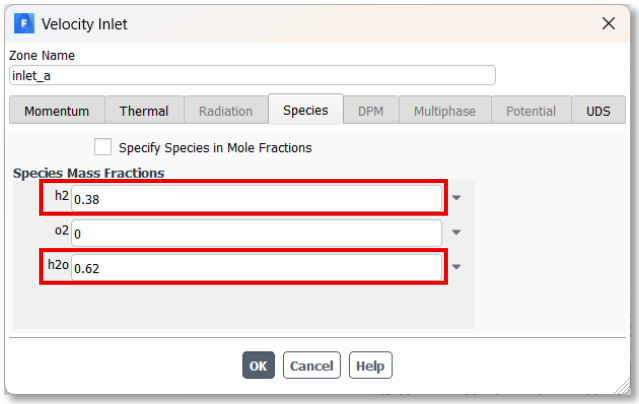


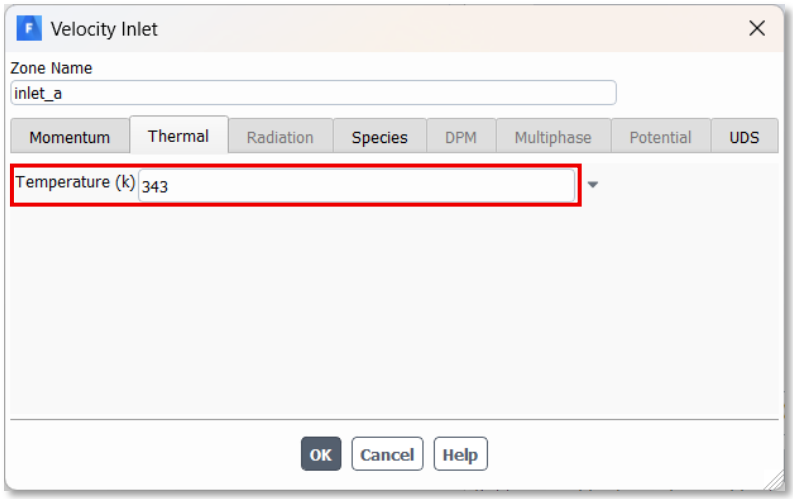


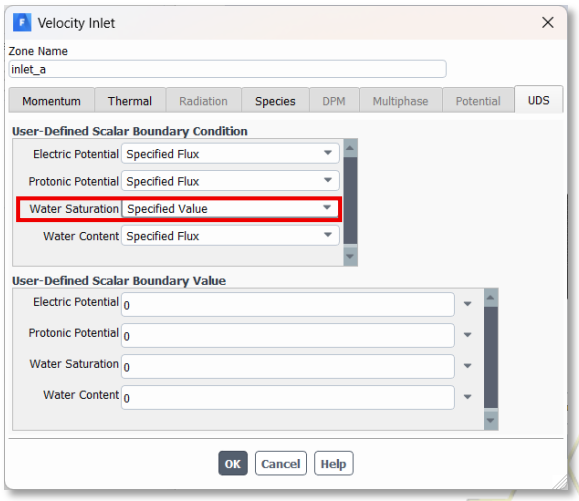
29. En el apartado **“Inlet”** se definirá **“Inlet_a”** con los siguientes valores:

- Velocidad: 0.503 m/s
- Especies: H2 (0.38) y H2O (0.62)
- Temperatura: 343 K
- Saturación de agua: 0



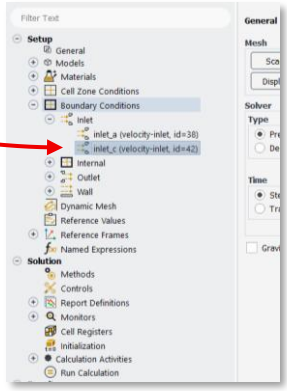


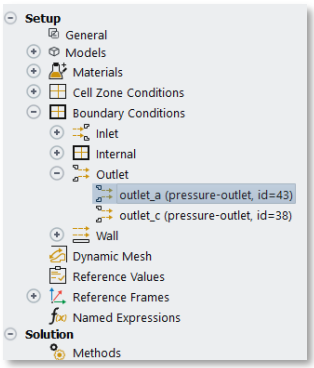




30. Se define **“Inlet_C”** con los siguientes valores:

- Velocidad: 0.607 m/s
- Especies: O2 (0.21) H2O (0.79)
- Temperatura: 343 K
- Saturación de agua: 0

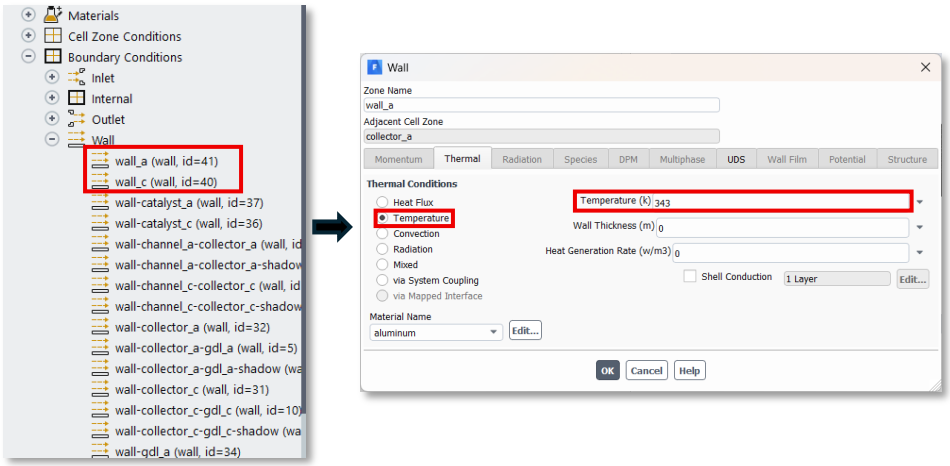




31. **“outlet_a”** y **“outlet_c”** se verifica que ambos sean **“pressure-outlets”**, solo vamos a cambiar la temperatura a 343 K.

32. **“wall_a”** se configura con estos valores:

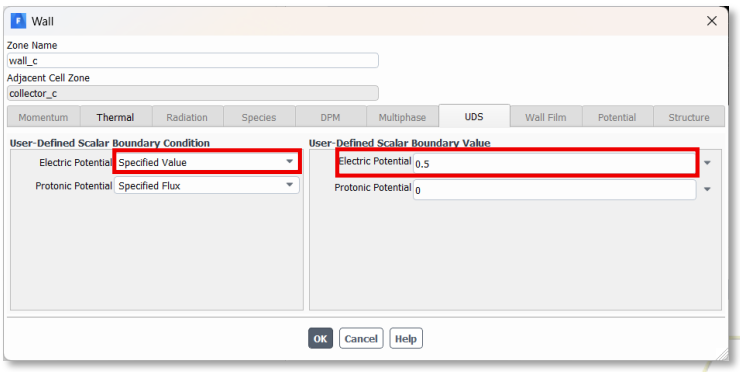
- Temperatura: 343 K
- Potencial eléctrico: 0 V



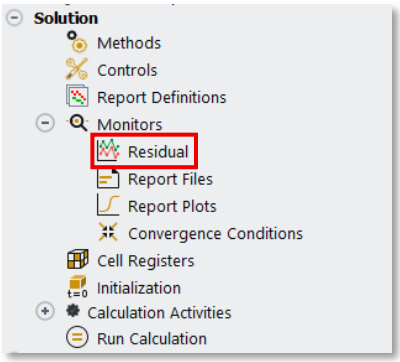
También se configura **“wall_c”** con:

- Temperatura: 343 K
- Potencial eléctrico: 0.9 – 0.1 V

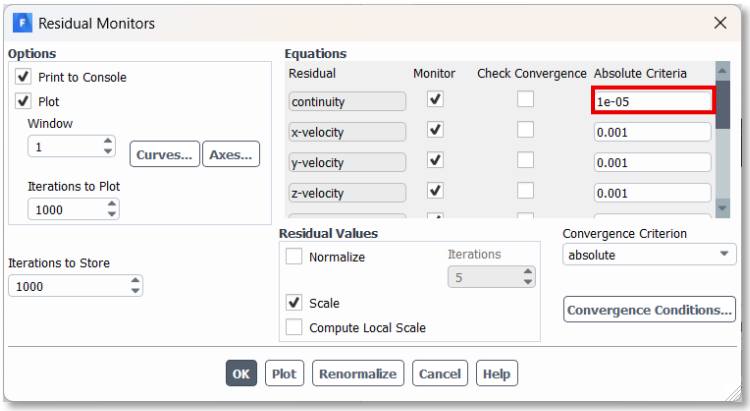
El potencial eléctrico se va a modificar en intervalos de 0.1 V para obtener la curva de polarización, se hará una simulación para cada voltaje.



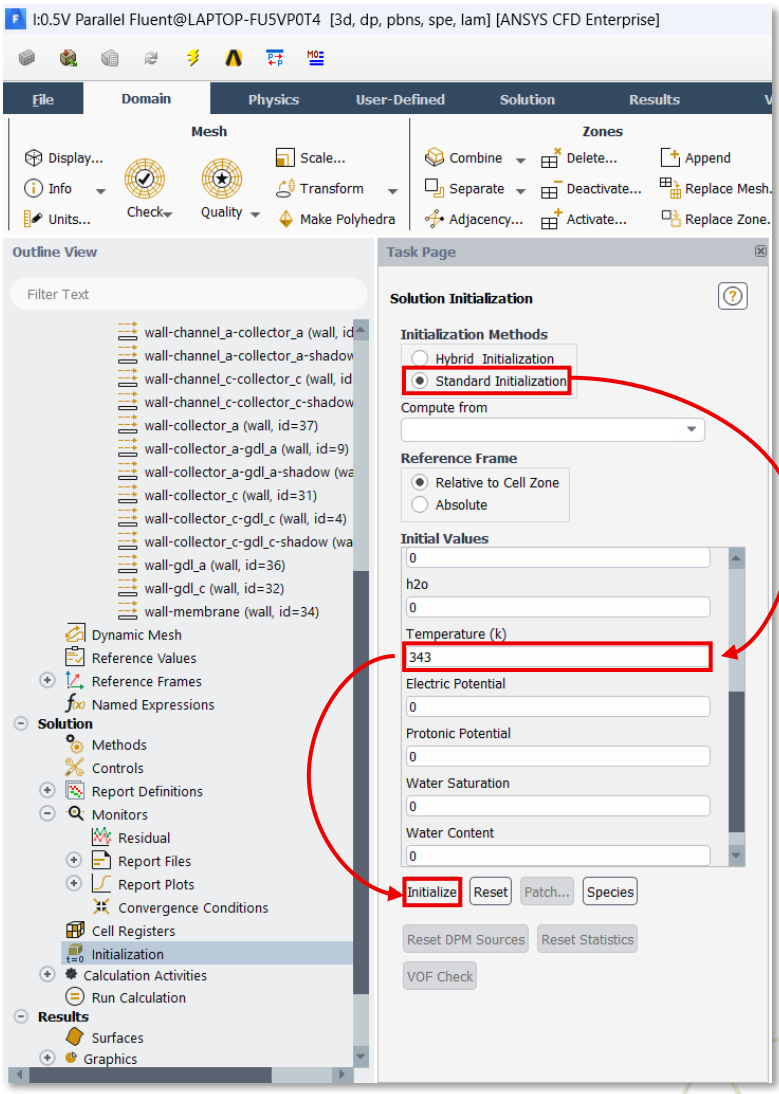
33. En la ventana **“Residual Monitors”** debemos activar los residuales de convergencia ya que el módulo PEMFC los desactiva.



• La convergencia se debe aumentar de 0.001 a 0.0001.

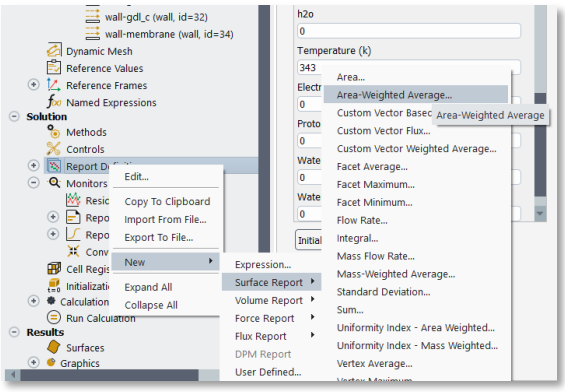


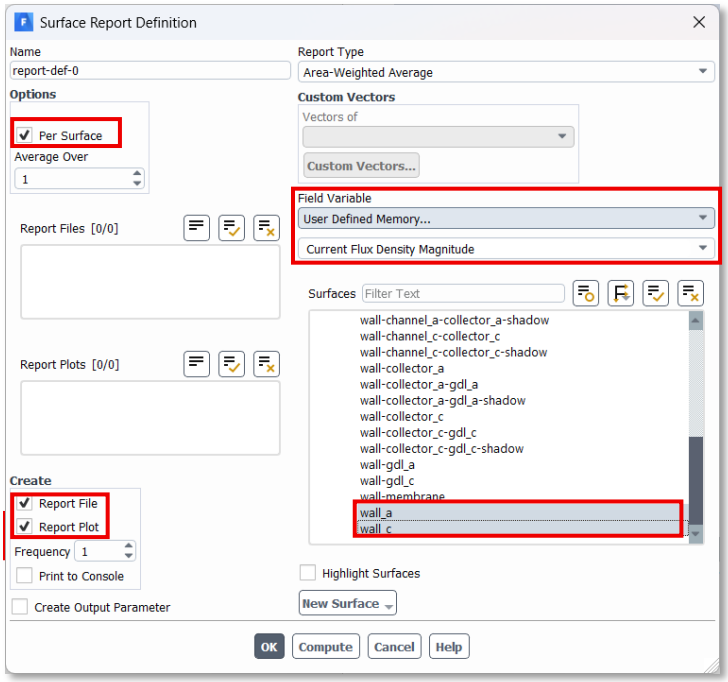
34. Ahora debemos hacer la inicialización, se define la temperatura en 343 K y verificamos que los demás valores sean 0, esta se debe realizar antes de hacer cada simulación.



35. Definiremos un reporte de superficie del tipo **“Area-Weighted-Average”**

- **Report Definitions>New>Surface report>Area-Weighted Averaged**

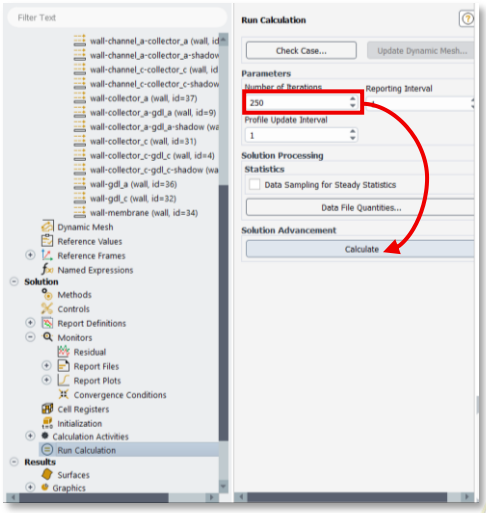




Se seleccionan ambos bordes de la celda, (**“wall_a”** y **“wall_c”**), activando la opción **“Per Surface”** y **“Report Plot”** y como variable elegimos la magnitud de la densidad de corriente.

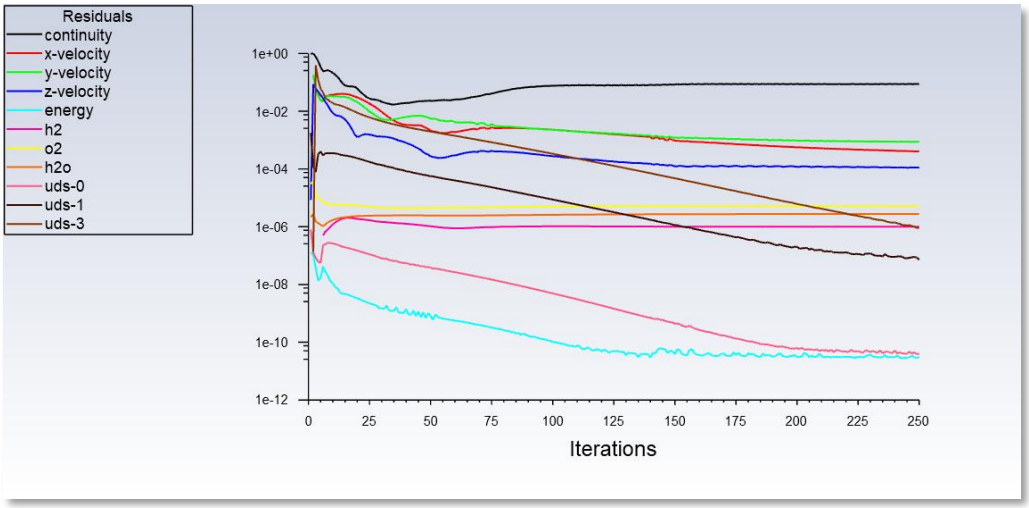
Este reporte permite verificar si ha alcanzado la convergencia.

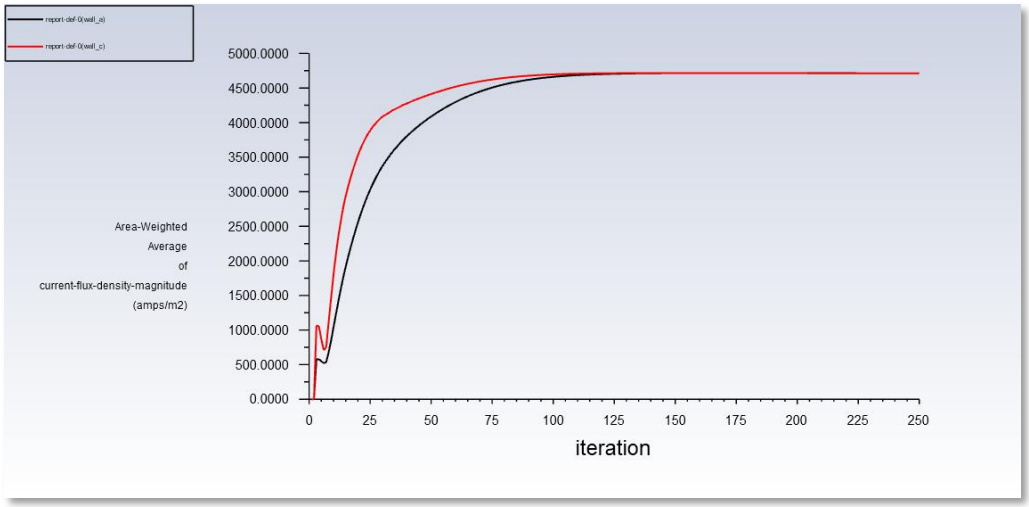
36. Para terminar, abriremos la pestaña de **“Run Calculation”** y establecemos 250 iteraciones o las necesite el modelo para llegar a la convergencia.



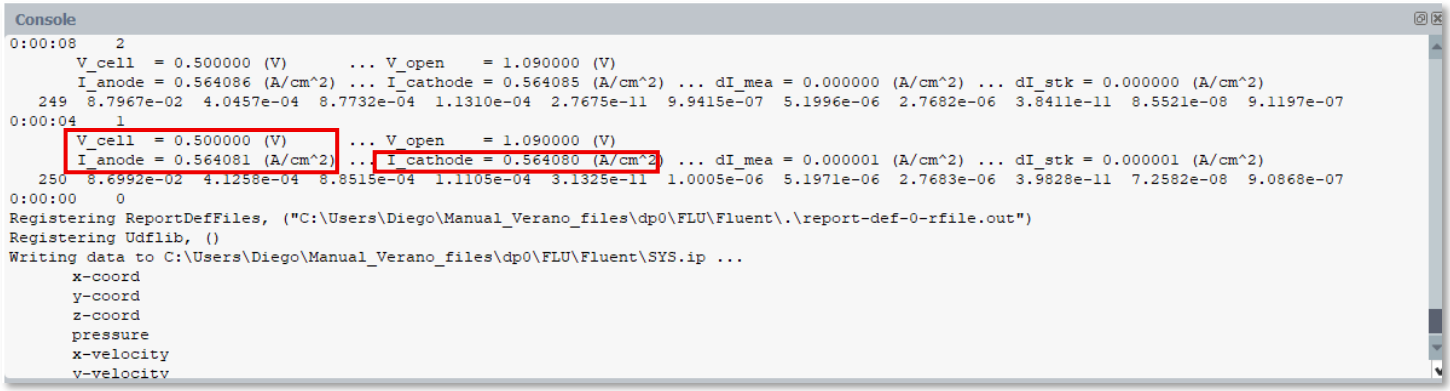
VII. Resultados

A mayor sea el voltaje, mayor será el tiempo de simulación, se observa que la convergencia se logra en torno a las 125 iteraciones, que es cuando la línea roja y negra se juntan.



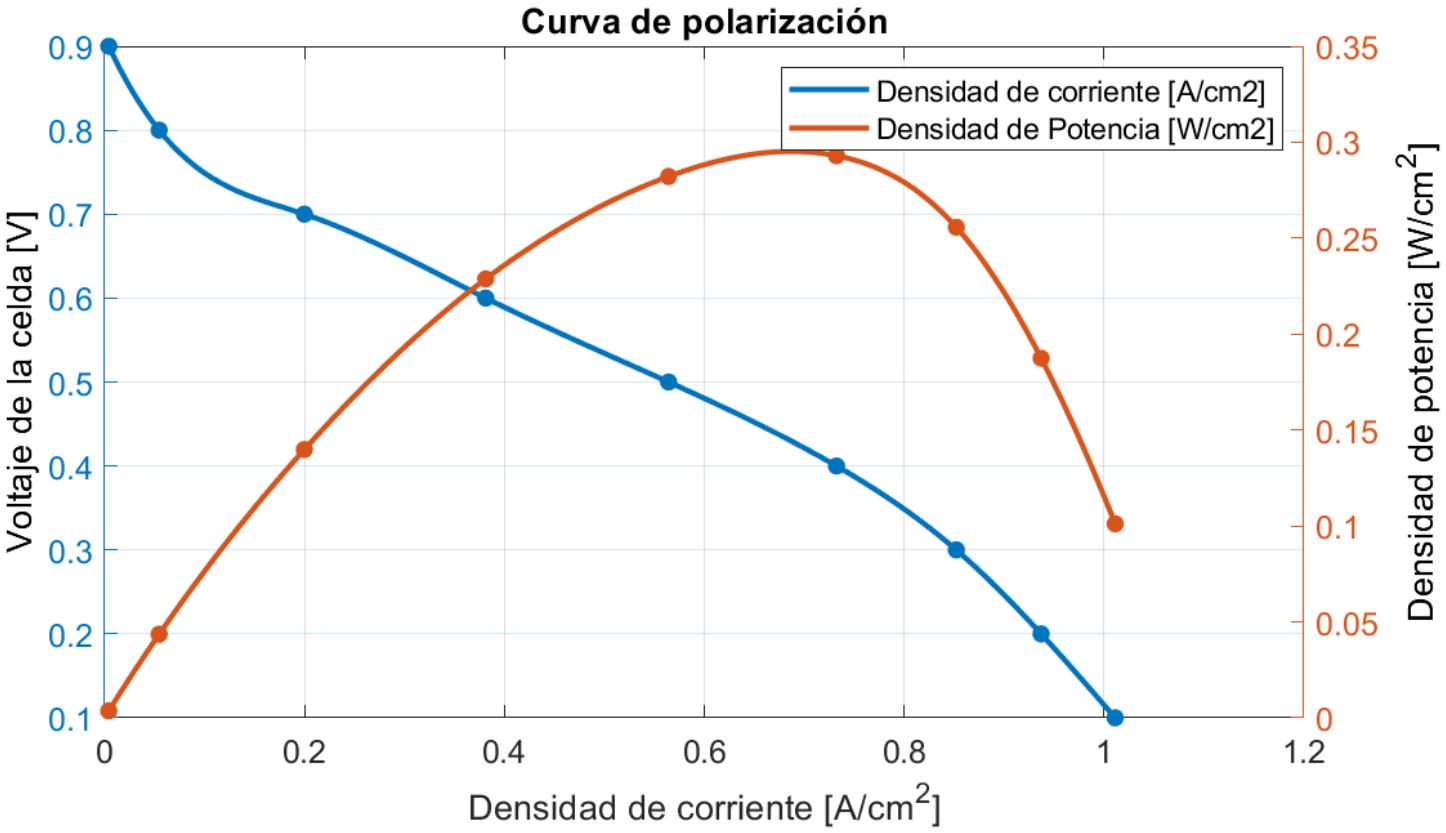


Una vez terminada la simulación, iremos a la consola y tomaremos los siguientes valores de la última iteración:



Se calcula el promedio entre **“I_anode”** e **“I_cathode”** y se registra en la siguiente tabla:

donde $\text{Densidad de Potencia} = \text{Voltaje} * \text{Densidad de corriente}$

Voltaje	Densidad de corriente	Densidad de Potencia
0.1	…	…
0.2	…	…
0.3	…	…
0.4	…	…
0.5	0.5640805	0.28204025
0.6	…	…
0.7	…	…
0.8	…	…
0.9	…	…

Una vez completada la tabla se puede generar la curva de polarización: