



Manual para modelado de una Celda de Combustible de Tipo de Membrana de Intercambio Protónico (PEMFC) con canales serpentin.

Introducción

El propósito del siguiente manual es mostrar y proveer las herramientas y recomendaciones necesarias para realizar la simulación de una celda de combustible implementando el software ANSYS.

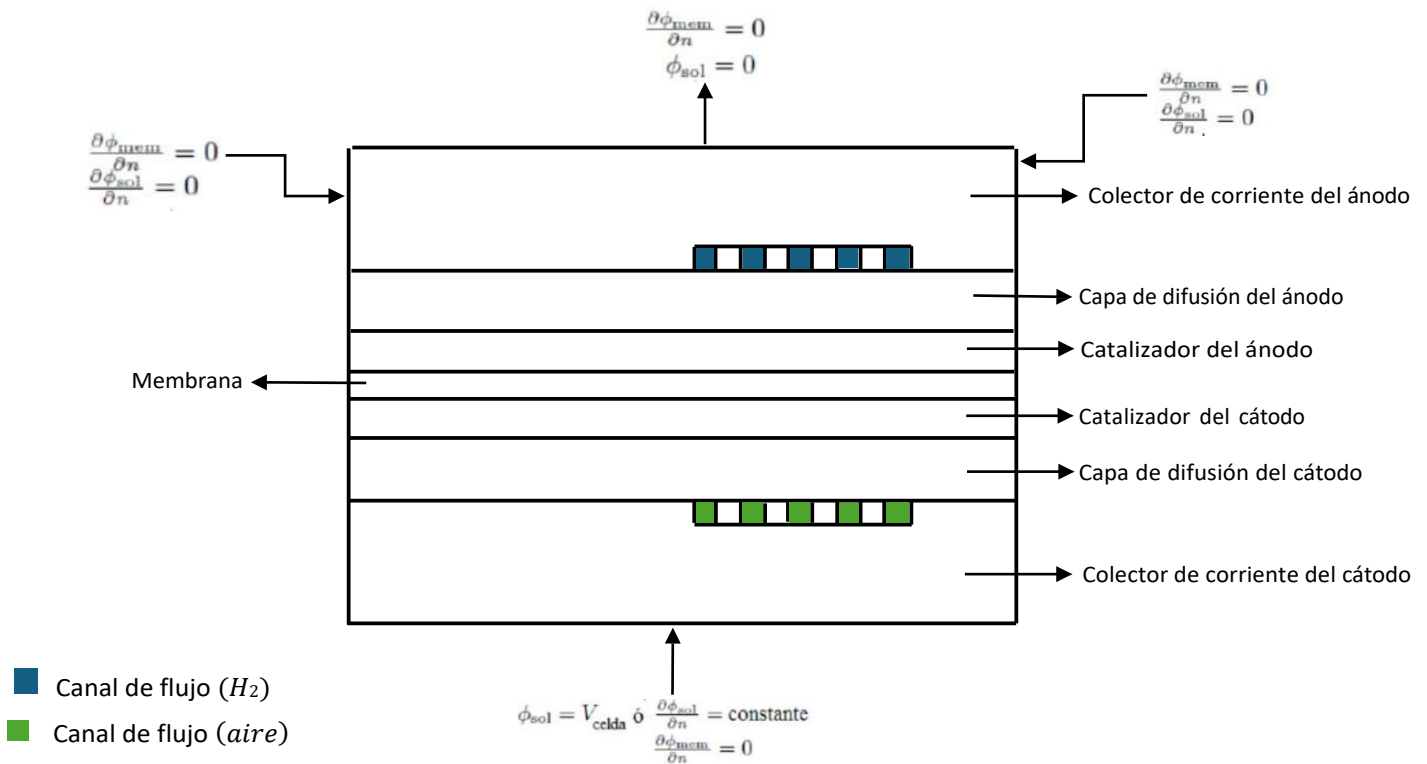
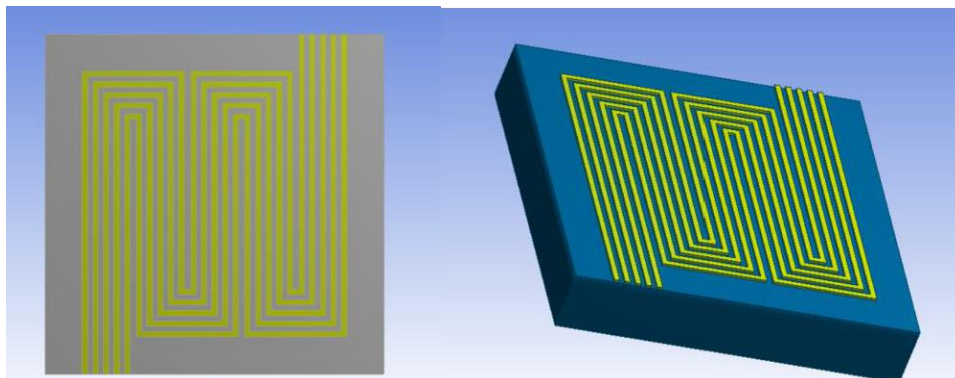


Figura 1. Condiciones de frontera potencio-estáticas para la ecuación de energía de una celda de combustible tipo PEMFC

El manual se basa en realizar y analizar aspectos al momento de simular una celda de combustible. Además, se muestran los pasos adecuados para mallar, configurar y resolver el módulo PEMFC de Fluent sobre una celda con un área activa de 25 cm^2 , como se muestra en las siguientes imágenes:



La celda de combustible opera bajo las siguientes condiciones de operación:

Condiciones de entrada	Ánodo	Cátodo
Gas	Hidrógeno	Aire
Estequiometria	1.5	2
Temperatura de entrada (°C)	70	70
Humedad relativa de entrada (%)	100	100
Fracción másica de hidrógeno	0.078	-
Fracción másica de oxígeno	-	0.169
Fracción másica de agua	0.561	0.274
Voltaje de la celda a circuito abierto (V)	0.95	

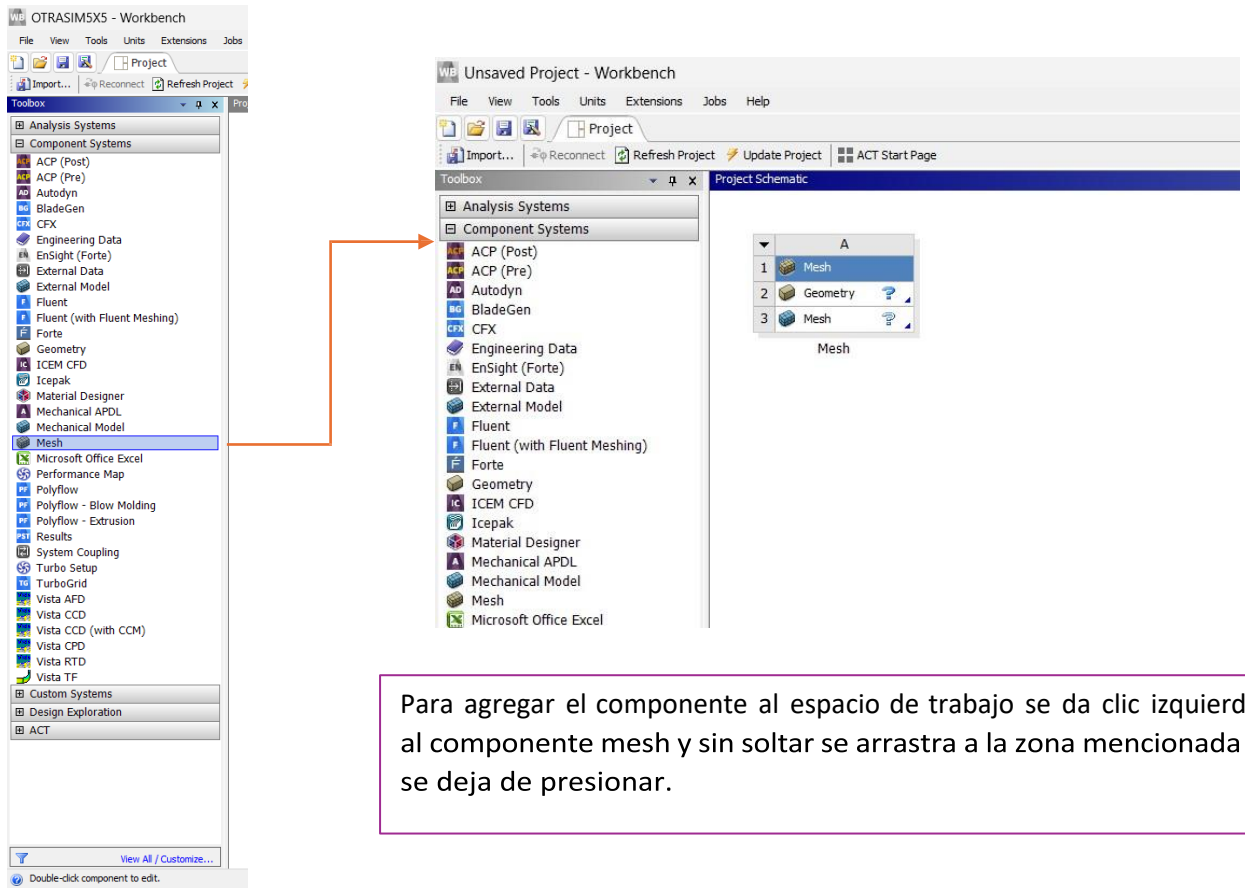
Al fin de obtener la curva de polarización de la celda, se analiza su desempeño bajo un voltaje de 0.3 a 0.9 en intervalos de 0.1 V.

La siguiente Tabla muestra las propiedades de los distintos componentes de la celda, la cual se usará para configurar el módulo PEMFC.

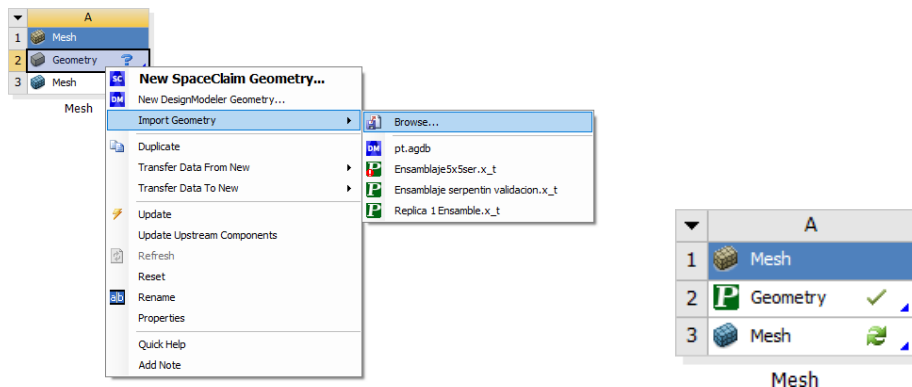
Propiedades del material y parámetros electroquímicos

Descripción	Valor
Conductividad eléctrica del colector (1/Ω-m)	200,000
Conductividad eléctrica de la capa de difusión (1/Ω-m)	53
Conductividad eléctrica del catalizador (1/Ω-m)	53
Porosidad de la capa de difusión	0.7
Porosidad del catalizador	0.5
Exponente de concentración en el ánodo	0.5
Exponente de concentración en el cátodo	1
Coefficiente de intercambio del ánodo	2
Coefficiente de intercambio del cátodo	2
Densidad de corriente de referencia en ánodo (A/m ²)	25000
Densidad de corriente de referencia en cátodo (A/m ²)	7.5
Difusividad de referencia del hidrógeno H_2 (m ² /s)	0.00008
Difusividad de referencia del oxígeno O_2 (m ² /s)	0.00002
Difusividad de referencia del agua H_2O (m ² /s)	0.00005
Difusividad de referencia del nitrógeno N_2 (m ² /s)	0.00001

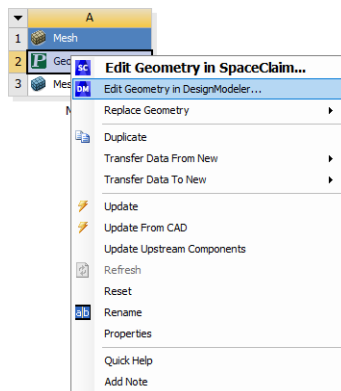
1. En una pestaña nueva de ANSYS Workbench añadir un componente mesh al espacio de trabajo. Este se encuentra en la sección de component systems, tal como se muestra a continuación:



2. A continuación, se cargara la geometría nombrada como “Celda serpentín.x_t” de los archivos adjuntos al Manual, para ello seguir la secuencia:
 - a) Clic derecho sobre el componente Geometry > Import Geometry > Browse.
 - b) Buscamos la geometría mencionada.
 - c) Abrimos el archivo.
 - d) Verificamos que el archivo se cargó correctamente al mostrarse una palomita verde sobre el componente.

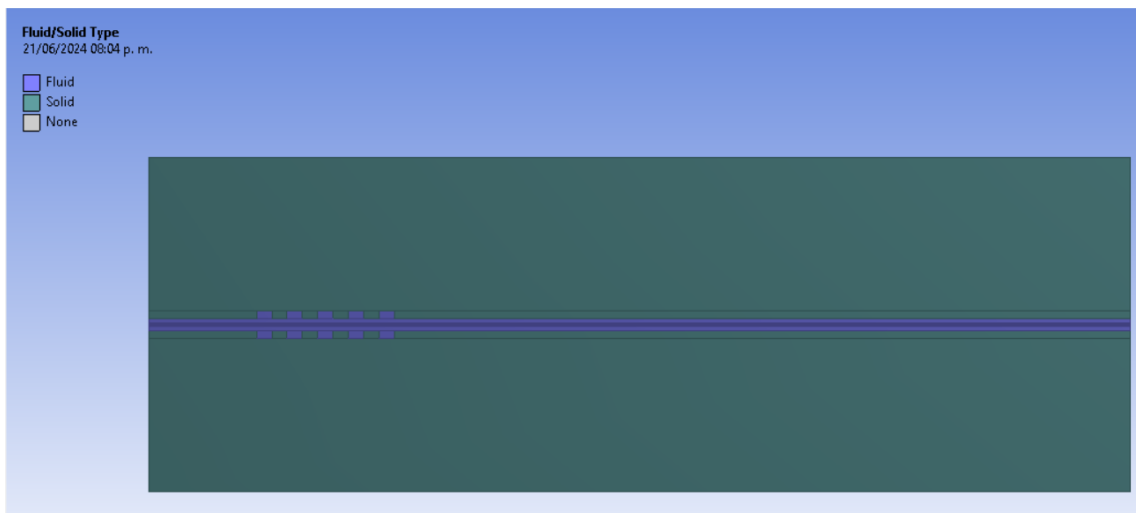


3. Abrimos la geometría en Design Modeler para corroborar la correcta importación, así como asignaciones de material.
- a) Clic derecho sobre Geometry > Edit geometry on Design Modeler.

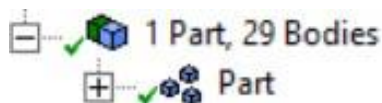


En versiones de ANSYS WORKBENCH mayores a 16.0, el editor por defecto es SpaceClaim, por lo que es importante seleccionar correctamente DesignModeler.

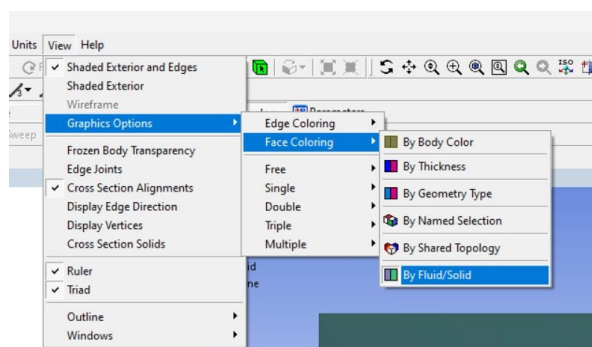
- b) Verificamos que la asignación de los cuerpos sea la correcta.



El modelo debe tener 1 parte y 29 cuerpos. De los cuales sólo los colectores deben ser marcados como sólidos.



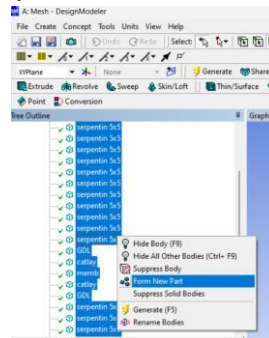
Para mostrar los colores por asignación Sólido/Fluido:



En caso de que no se tenga 1 parte y 29 cuerpos:

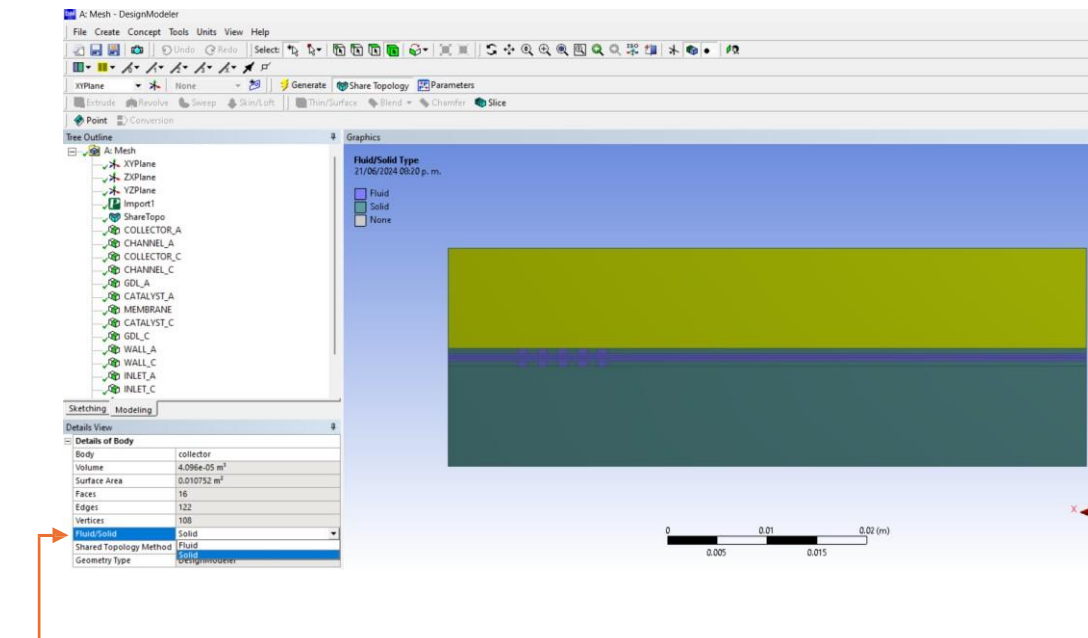
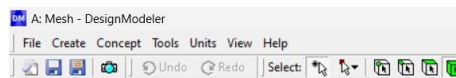


- Seleccionar cada una de las partes dando clic y CTRL hasta tener las 29 partes seleccionadas. Dar clic derecho y seleccionar Form New Part.

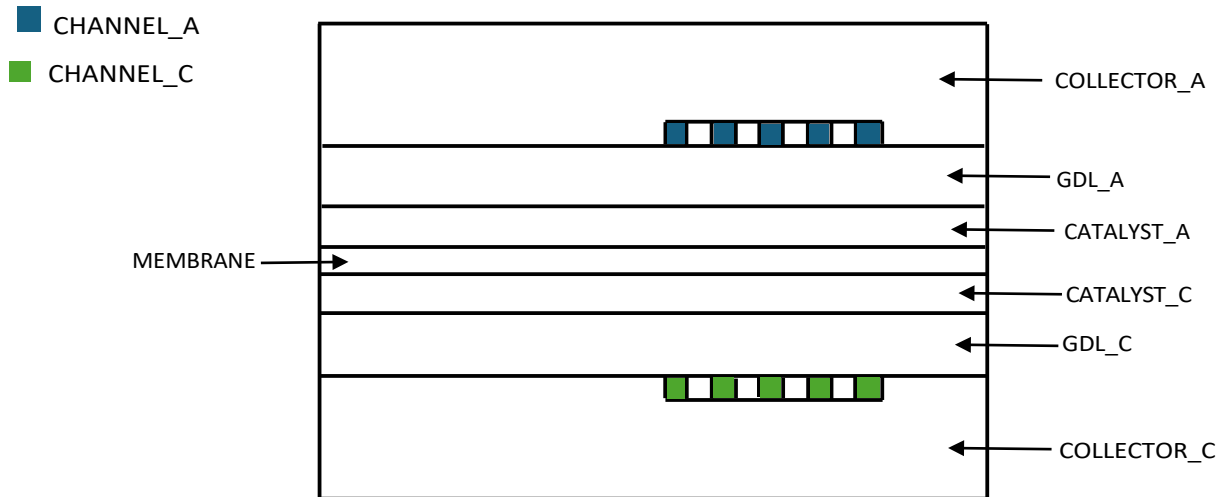


En caso de que algún cuerpo no esté seleccionado como se debe (Sólido/Fluido):

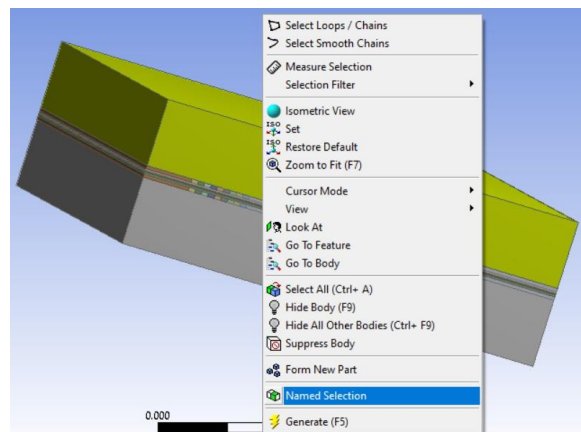
- Ir al selector de cuerpos/volúmenes
- Seleccionar el cuerpo objetivo, ya sea en pantalla o árbol de operaciones.
- Modificar su asignación al valor correcto Solid/Fluid.



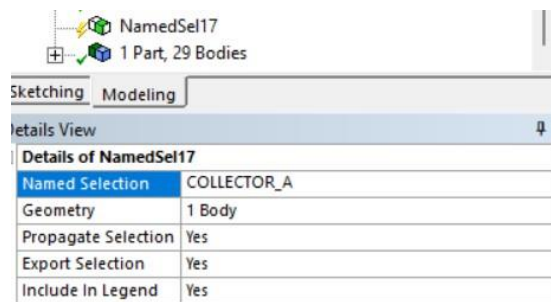
4. Asignar los Named Selection para los cuerpos tal como se muestra en la imagen.




- a) Ir al selector de cuerpos.
- b) Seleccionar el cuerpo del componente a nombrar.
- c) Clic derecho sobre la selección > Named Selection.



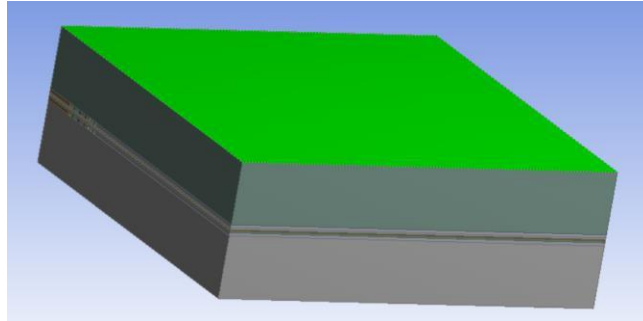
- d) Nombrar la parte correspondiente (Deberá surgir un nuevo elemento en el árbol de operaciones).



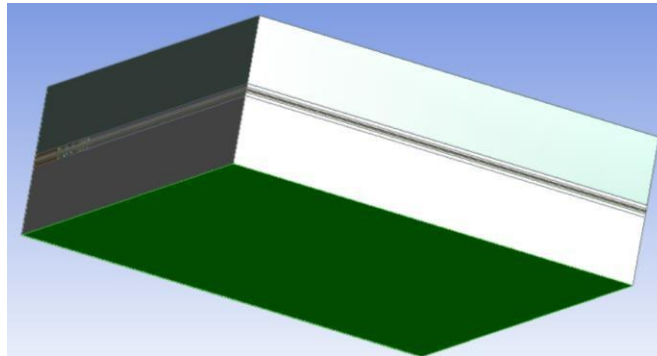
- e) Presionar F5 o  Generate para completar la acción. (Si este paso no se lleva a cabo será imposible generar otra operación o modificación, por ello siempre debemos checar que no se tengan operaciones con el rayo).
- f) Seguir con este procedimiento hasta nombrar todas las partes mencionadas.

5. Asignar los Named Selection para las superficies.

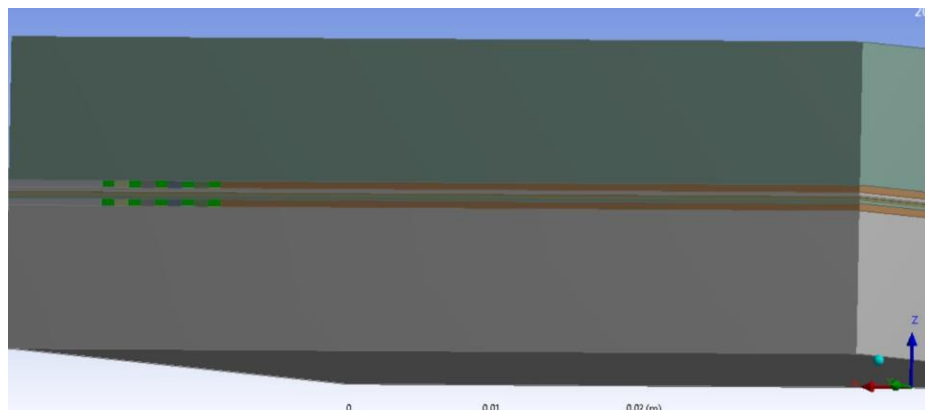
- a) Ir al selector de caras. 
- b) Seleccionar y asignar la cara exterior del COLLECTOR_A como WALL_A.



- c) Nombrar WALL_C la cara exterior del COLLECTOR_C.

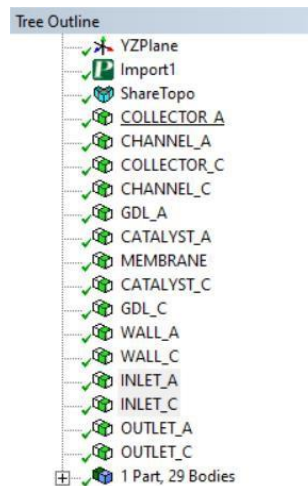


- d) Nombrar INLET_A e INLET_C a las entradas del canal A y canal C respectivamente, ambas se encuentran en la dirección +Y.



- e) Nombrar OUTLET_A Y OUTLET_C a las salidas de cada respectivo canal que se encuentra en -Y.

La rama de operaciones se debe mostrar con los siguientes nombramientos.

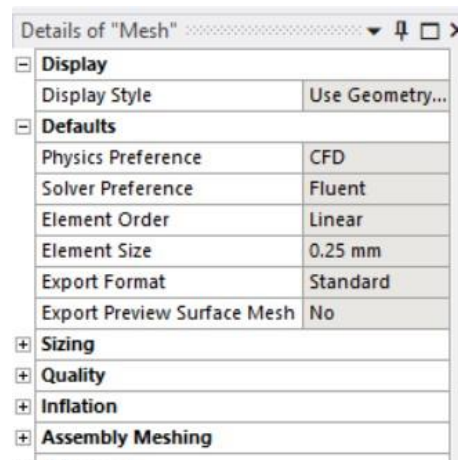
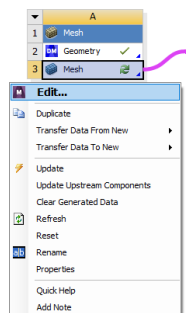


6. Concluimos con los pasos en Design Modeler por lo que procedemos a cerrarlo.

7. Iniciamos ANSYS Meshing desde la ventana de Workbench.

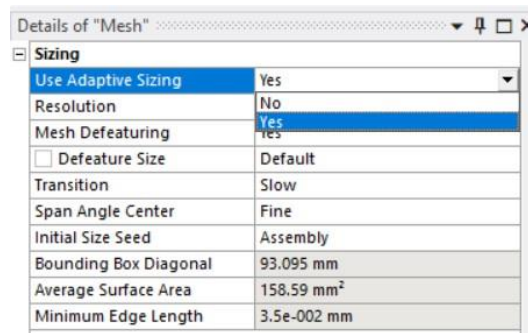
8. Seleccionamos el componente Mesh del árbol de operaciones.

- a) Definimos la física de referencia como CFD y Fluent como método de solución.
- b) Asignamos un tamaño general del elemento de 0.25 mm.

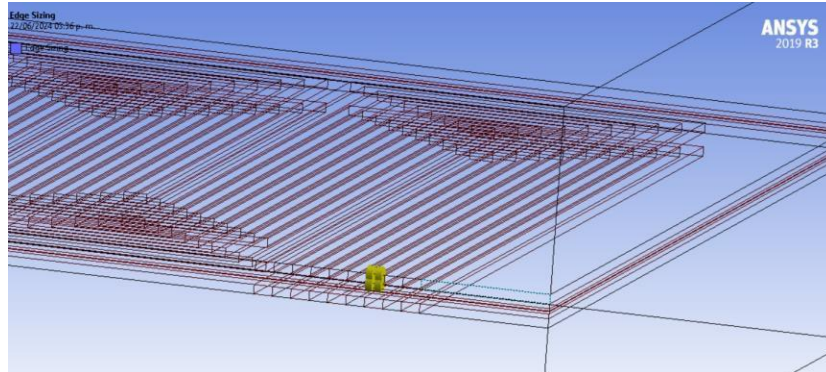


9. Definimos un dimensionamiento adaptativo.

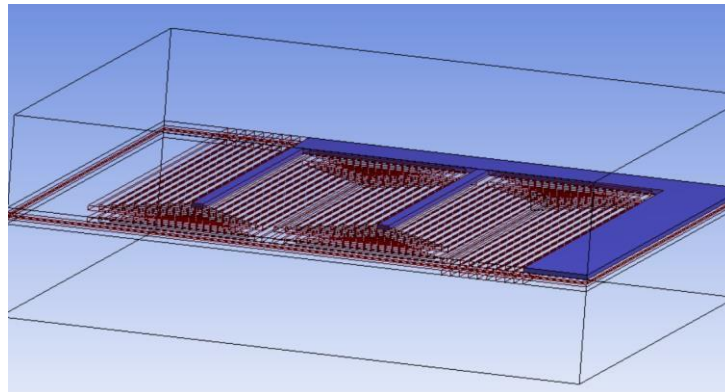
- a) Expandimos la sección Sizing y activamos la opción de Use Adaptive Sizing, esto hará que se modifiquen las opciones del Sizing.
- b) Este método implementa varios métodos automáticos acorde al tipo de solución. Es el método preferente antes de implementar mallados más robustos.



10. Insertamos un Sizing sobre los bordes de un canal que afecta el mallado. Definimos 2 divisiones sobre el borde de la entrada y salida.

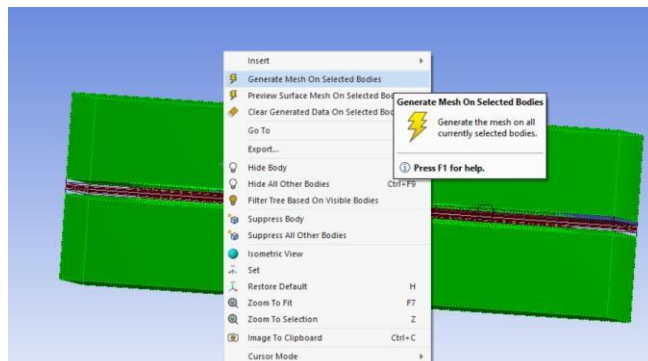


11. A su vez definimos un Body Sizing sobre esa parte del colector.

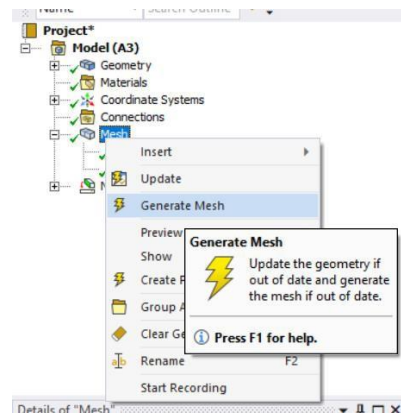


12. Generamos la malla.

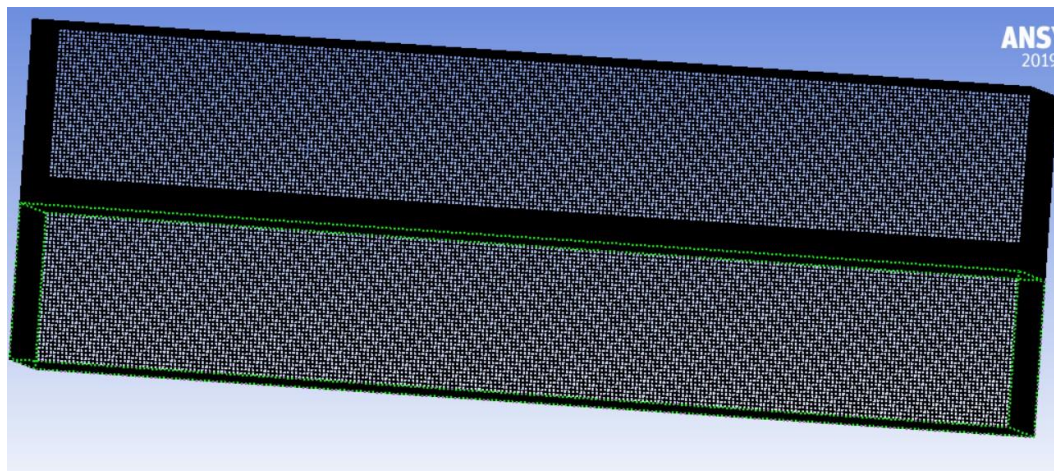
- La mayoría de las mallas son altamente dependientes del orden de malla, por lo que se sugiere el siguiente orden:
 - a) Seleccionar ambos cuerpos del CHANNEL y COLLECTOR para el ánodo y cátodo.
 - b) Clic derecho sobre la selección > Generate Mesh On Selected Bodies.



c) Generamos el resto de la malla con Mesh > Generate Mesh.



Obteniendo el siguiente mallado:



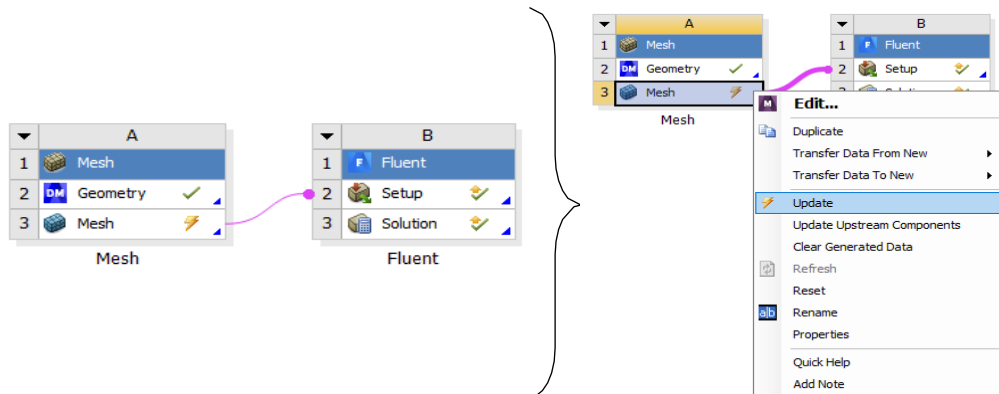
Además, en la sección de "Statistics" podemos observar el tamaño de la malla y la calidad de la malla, donde ambos son excelentes. El tamaño puede variar de equipo a equipo a pesar de implementar los mismos pasos.

Details of "Mesh"	
<input type="checkbox"/> Target Skewness	Default (0.900000)
Smoothing	Medium
Mesh Metric	Skewness
<input type="checkbox"/> Min	1.3057e-010
<input type="checkbox"/> Max	1.3881e-010
<input type="checkbox"/> Average	1.3078e-010
<input type="checkbox"/> Standard Deviation	0.
<input checked="" type="checkbox"/> Inflation	
<input checked="" type="checkbox"/> Assembly Meshing	
<input checked="" type="checkbox"/> Advanced	
<input checked="" type="checkbox"/> Statistics	
<input type="checkbox"/> Nodes	5944410
<input type="checkbox"/> Elements	5832704

13. Cerramos ANSYS Meshing.

14. Añadir bloque de Fluent.

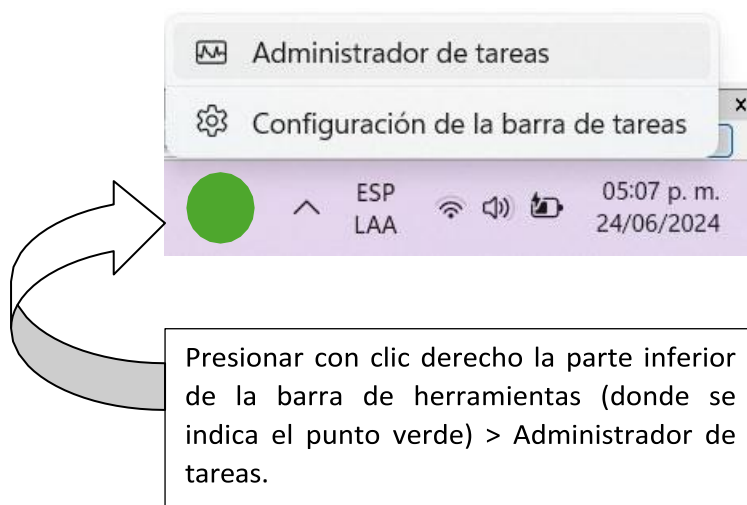
Regresando a la pantalla inicial de Ansys Workbench, se añade un bloque de Fluent al espacio de Mesh.



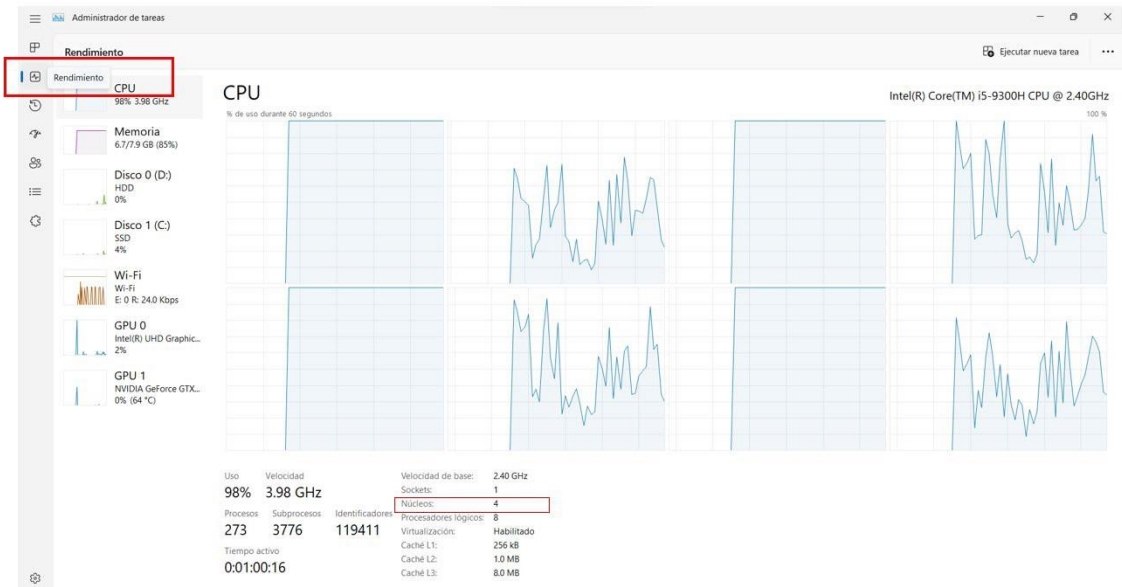
Workbench lanza una advertencia mediante un símbolo de rayo sobre el bloque de la malla que indica que esta ha sido modificada y, por lo tanto, debe actualizarla. Presionar clic derecho sobre Mesh > Update.

15. Configuración e inicio de Fluent.

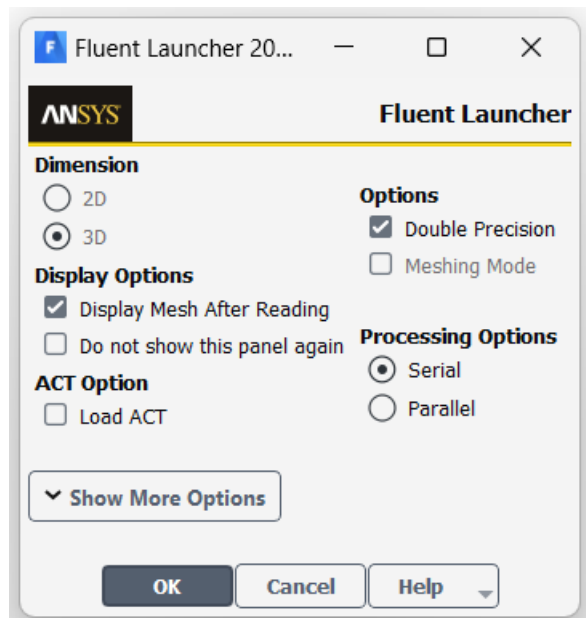
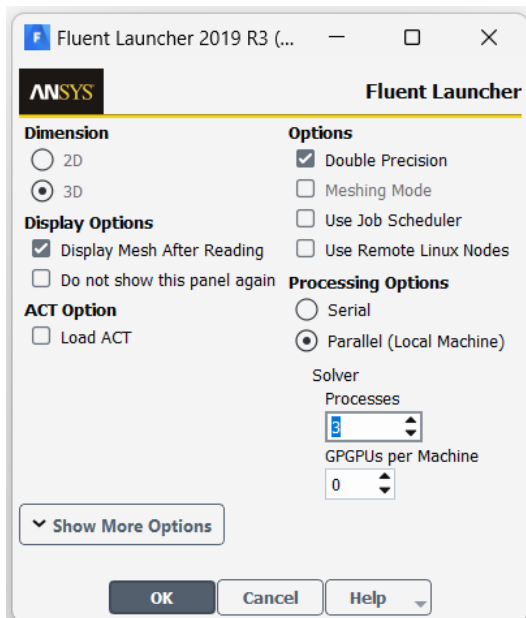
- Activar la doble precisión.
- Existen dos posibles opciones para el procesamiento de la solución. En la primera, se elegirá en Paralelo en caso de tener conocimiento del número de núcleos con los que cuenta el equipo de cómputo, como se muestra a continuación (se puede reducir el tiempo de cómputo).



Dar clic en la parte superior izquierda en la ventana “Rendimiento”, posterior a ello en la parte inferior bajo las gráficas se observa el número total de núcleos, es altamente NO RECOMENDABLE seleccionar el total de núcleos en Fluent, se sugiere colocar uno o dos núcleos menos del total que se tienen. De este modo, si el equipo de cómputo se congela se tiene la oportunidad de cerrar el programa desde el acceso al Administrador de tareas.

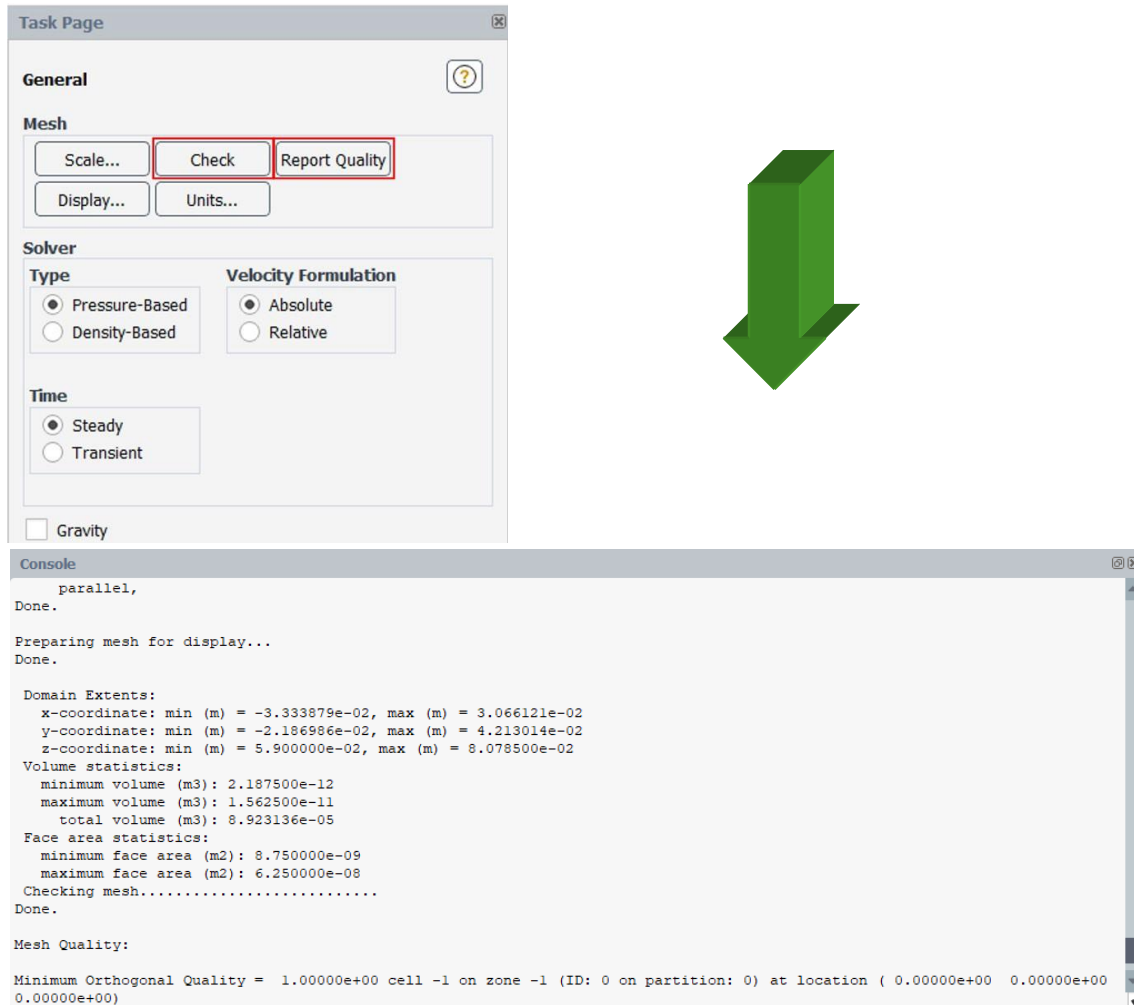


En caso de no conocer la cantidad de núcleos, se sugiere seleccionar el procesamiento Serial.



16. Verificar calidad de malla.

Dentro de la interfaz de Fluent, dar clic en “Check” y posteriormente “Report Quality”. En caso de generarse un error se notificará en la consola.



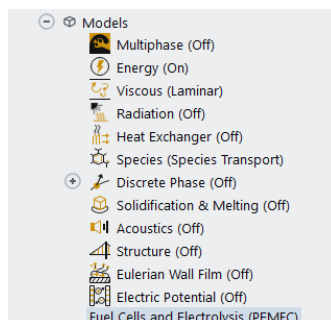
17. Cargar el módulo PEMFC.

Para poder activar el módulo es necesario introducir `define > models > add 3` en la consola, como se muestra.

```
> define
/define> models
/define/models> add
Fluent Addon Modules:
0. None
1. MHD Model
2. Fiber Model
3. Fuel Cell and Electrolysis Model
4. SOFC Model with Unresolved Electrolyte
5. Population Balance Model
6. Adjoint Solver
7. Single-Potential Battery Model
8. Dual-Potential MSMD Battery Model
9. PEM Fuel Cell Model
10. Macroscopic Particle Model
11. Reduced Order Model
Enter Module Number: [0] 3
Fast-loading "C:/PROGRA-1/ANSYSI-1/v192/fluent/fluent19.2.0/addons/fuelcells\lib\addon.bin"
```

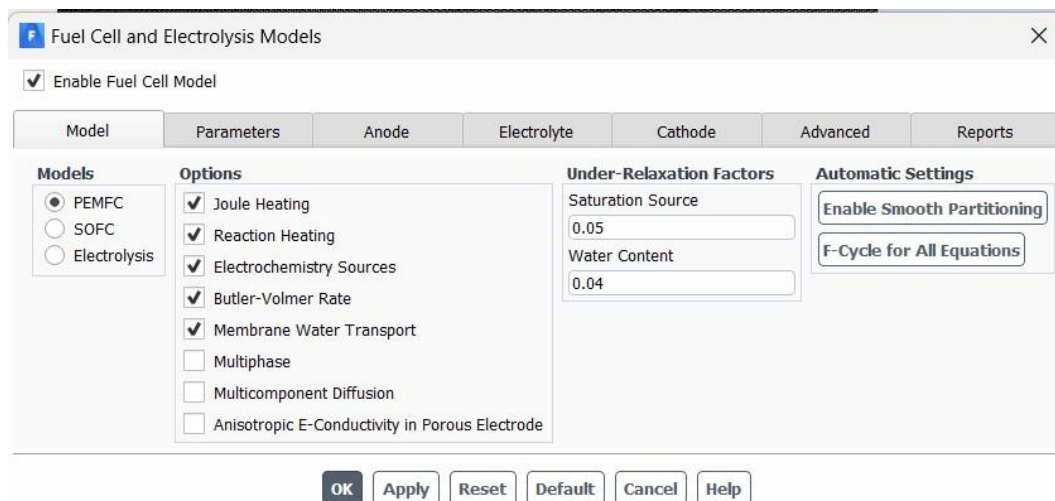
Únicamente se añade el módulo una vez, si previamente se ha realizado el proyecto y se desea abrir no es necesario cargarlo nuevamente. En caso de cargar un módulo incorrecto debe cerrarse la ventana de Fluent y eliminar el componente añadido, posteriormente deberán repetirse los pasos 14 a 16, debido a que sólo es posible cargar 1 módulo a la vez.

Se puede corroborar que se haya añadido correctamente desplegando con el símbolo + en la sección de modelos.



18. Configuración del módulo PEMFC.

- a) Por default la selección de celdas de combustible de tipo PEM se encuentra predeterminada, por lo que, no es necesario hacer modificaciones.



- b) En la ventana posterior de parámetros se introducen los valores mostrados en la Tabla de propiedades del material y parámetros electroquímicos.

Fuel Cell and Electrolysis Models [X]

☒ Enable Fuel Cell Model

Model	Parameters	Anode	Electrolyte	Cathode	Advanced	Reports
Electrochemistry <div> <div> Anode <p>Ref. Current Density (A/m2) 25000</p> <p>Ref. Concentration (kmol/m3) 1</p> <p>Concentration Exponent 0.5</p> <p>Exchange Coefficient (a) 2</p> <p>Exchange Coefficient (c) 2</p> <p>Open-Circuit Voltage (V) 0.96</p> <p>Total Leakage Current (A) 0</p> </div> <div> Cathode <p>Ref. Current Density (A/m2) 7.5</p> <p>Ref. Concentration (kmol/m3) 1</p> <p>Concentration Exponent 1</p> <p>Exchange Coefficient (a) 2</p> <p>Exchange Coefficient (c) 2</p> </div> <div> Reference Diffusivity <p>h2 (m2/s) 8e-05</p> <p>o2 (m2/s) 2e-05</p> <p>h2o (m2/s) 5e-05</p> <p>Other Species (m2/s) 1e-05</p> </div> </div>						

OK Apply Reset Default Cancel Help

c) Siguiendo el orden en la ventana del ánodo, se selecciona cada cuerpo con su respectiva zona, es decir:

- Current Collector > collector_a
- Flow Channel > channel_a
- Porous Electrode > gdl_a
- TPB Layer > catalyst_a

Es muy importante que no se presione el botón de aplicar hasta que se configuren todas las ventanas, de otra forma se generará un error y se deberá repetir todo el proceso iniciando desde un nuevo componente de Fluent.

Fuel Cell and Electrolysis Models [X]

☒ Enable Fuel Cell Model

Model	Parameters	Anode	Electrolyte	Cathode	Advanced	Reports
<div> <div> Anode Zone Type <p><input checked="" type="radio"/> Current Collector</p> <p><input type="radio"/> Flow Channel</p> <p><input type="radio"/> Porous Electrode</p> <p><input type="radio"/> TPB Layer (Catalyst)</p> </div> <div> Current Collector <p>Zone(s) [1/9]</p> <p>catalyst_a catalyst_c channel_a channel_c collector_a collector_c gdl_a gdl_c membrane</p> </div> <div> Cell Zone Conditions <p><input checked="" type="checkbox"/> Update Cell Zones</p> <p>Solid Material collector-default</p> </div> </div>						

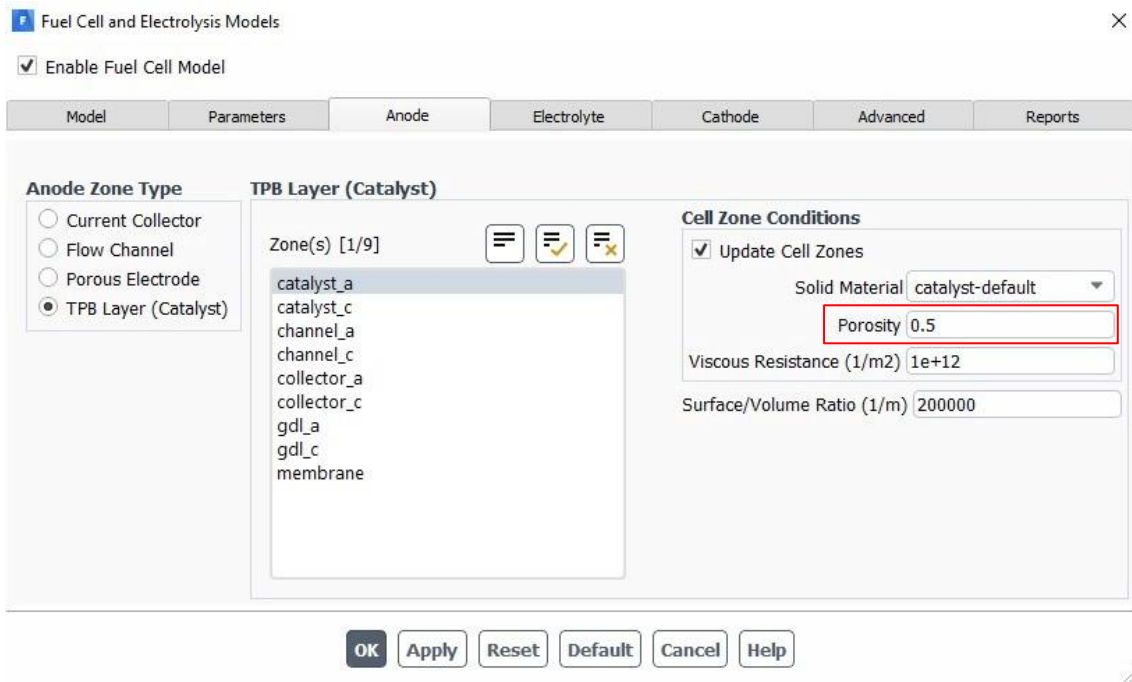
OK Apply Reset Default Cancel Help

Enable Fuel Cell Model

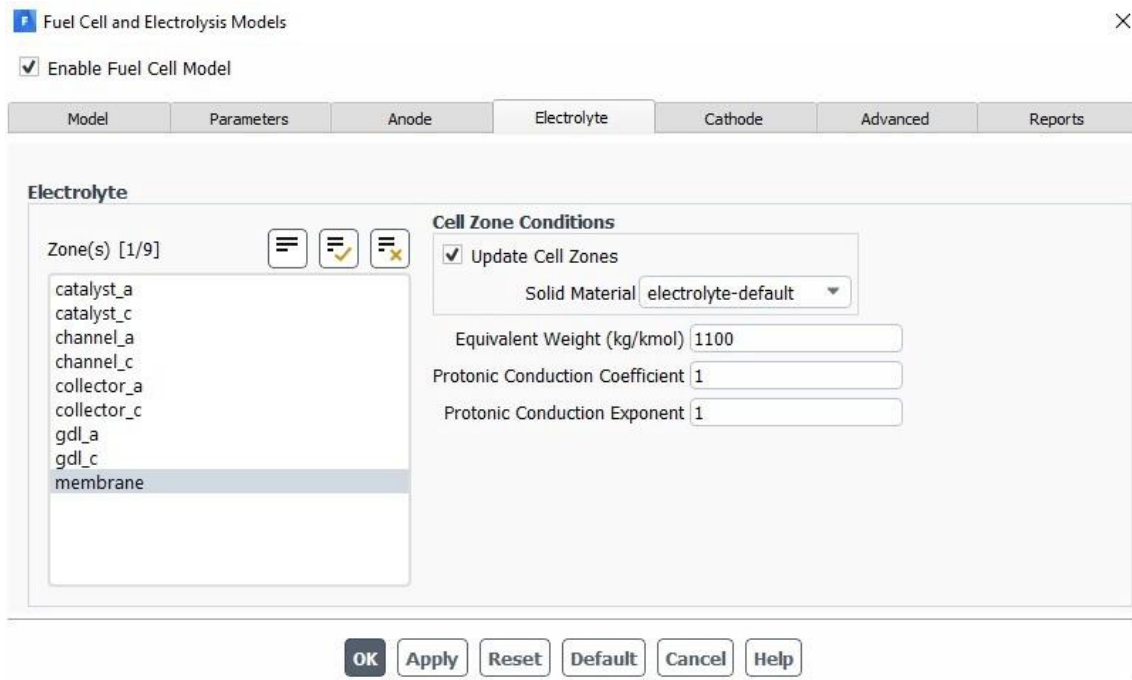
Model	Parameters	Anode	Electrolyte	Cathode	Advanced	Reports
<div>Anode Zone Type</div> <div><div><input type="radio"/> Current Collector</div><div><input checked="" type="radio"/> Flow Channel</div><div><input type="radio"/> Porous Electrode</div><div><input type="radio"/> TPB Layer (Catalyst)</div></div>		<div>Flow Channel</div> <div>Zone(s) [1/9]</div> <div><div><div></div><div></div><div></div></div><div><div></div><div></div><div></div></div><div><div></div><div></div><div></div></div></div> <div>catalyst_a</div> <div>catalyst_c</div> <div>channel_a</div> <div>channel_c</div> <div>collector_a</div> <div>collector_c</div> <div>gdl_a</div> <div>gdl_c</div> <div>membrane</div>				
<div><div>OK</div><div>Apply</div><div>Reset</div><div>Default</div><div>Cancel</div><div>Help</div></div>						

Enable Fuel Cell Model

Model	Parameters	Anode	Electrolyte	Cathode	Advanced	Reports
<div>Anode Zone Type</div> <div><div><input type="radio"/> Current Collector</div><div><input type="radio"/> Flow Channel</div><div><input type="radio"/> Porous Electrode</div><div><input checked="" type="radio"/> TPB Layer (Catalyst)</div></div>		<div>Porous Electrode</div> <div>Zone(s) [1/9]</div> <div><div><div></div><div></div><div></div></div><div><div></div><div></div><div></div></div><div><div></div><div></div><div></div></div></div> <div>catalyst_a</div> <div>catalyst_c</div> <div>channel_a</div> <div>channel_c</div> <div>collector_a</div> <div>collector_c</div> <div>gdl_a</div> <div>gdl_c</div> <div>membrane</div>				
<div>Cell Zone Conditions</div> <div>Update Cell Zones</div> <div><div>SoHd Material</div><div>diffuser-default</div><div></div></div> <div><div>Porosity</div><div></div></div> <div>Viscous Resistance (1/m2) <u>1e+12</u></div>						
<div><div>OK</div><div>Apply</div><div>Reset</div><div>Default</div><div>Cancel</div><div>Help</div></div>						



- d) Se especifican valores para el GDL de una porosidad de 0.7, del mismo modo, para el catalizador se coloca un valor de 0.5 para su respectiva porosidad.
- e) Se define la membrana como el electrolito.



- f) Repetir los pasos c) y d) del 18 para definir los valores y zonas del cátodo.

19. Configurar ventana de reportes.

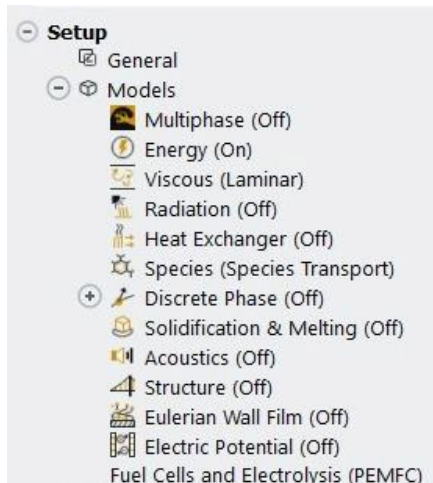
- a) Definir wall_a como borne del ánodo y wall_c como borne del cátodo, con un área de 0.0025 cc^2 (área activa de los canales). Posteriormente, al aplicar cambios la consola muestra el siguiente mensaje.

Addon Module: fuelcells...loaded!

/define/models>

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

b) Se activan los modelos requeridos como la ecuación de energía y especies (on).



Desplegar las opciones Materials > Solid > catalyst default

- Catalyst default: 53 S/m
- Collector-default: 200×10^3 S/m
- Difflayer default: 53 S/m

Create/Edit Materials

Name: catalyst-default

Material Type: solid

Fluent Solid Materials: catalyst-default

Mixture: none

Order Materials by: ☒ Name ☐ Chemical Formula

Fluent Database... User-Defined Database...

Properties

0 / 1

Thermal Conductivity (w/m-k): constant Edit... 10

UDS Diffusivity (kg/m-s): user-defined Edit... cond::fuelcells

Electrical Conductivity (siemens/m): constant Edit... 53

Change/Create Delete Close Help

Create/Edit Materials

Name: collector-default

Material Type: solid

Chemical Formula:

Fluent Solid Materials: collector-default

Mixture: none

Order Materials by: ☒ Name ☐ Chemical Formula

Fluent Database...

User-Defined Database...

Properties

0 / 1

Thermal Conductivity (w/m-k): constant Edit...

100

UDS Diffusivity (kg/m-s): defined-per-uds Edit...

Electrical Conductivity (siemens/m): constant Edit...

200000

Change/Create Delete Close Help

Create/Edit Materials

Name: difflayer-default

Material Type: solid

Chemical Formula:

Fluent Solid Materials: difflayer-default

Mixture: none

Order Materials by: ☒ Name ☐ Chemical Formula

Fluent Database...

User-Defined Database...

Properties

0 / 1

Thermal Conductivity (w/m-k): constant Edit...

10

UDS Diffusivity (kg/m-s): user-defined Edit...

cond::fuelcells

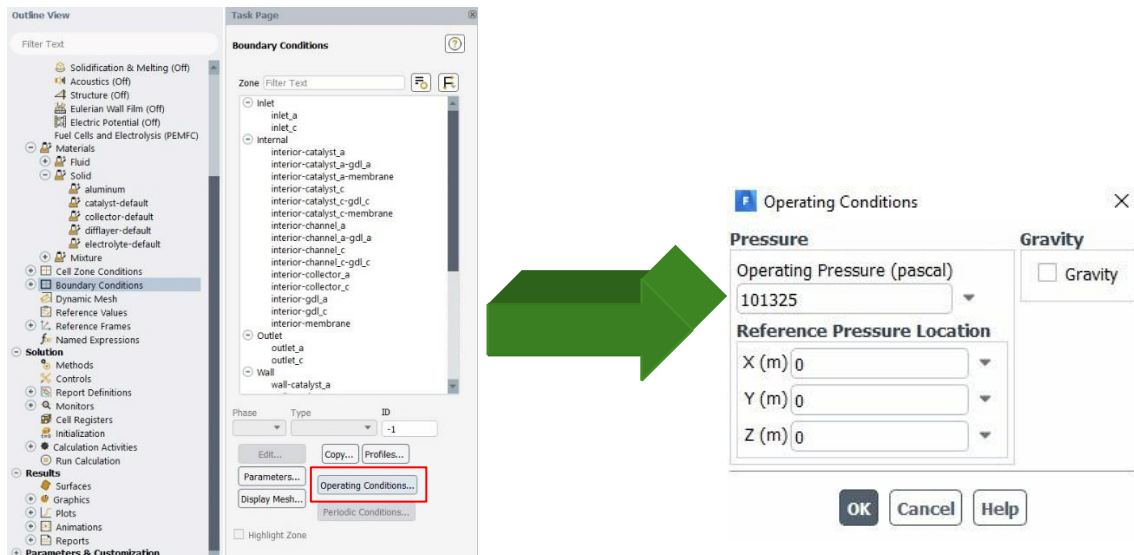
Electrical Conductivity (siemens/m): constant Edit...

53

Change/Create Delete Close Help

20. Definir presión de operación.

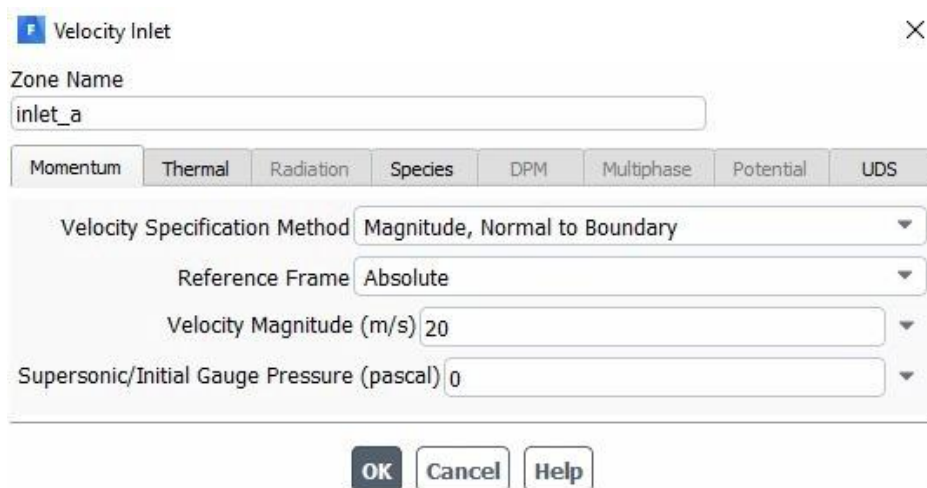
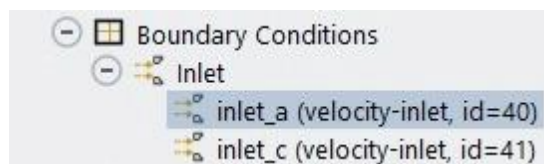
Ir a Boundary Condition > Operating conditions > Definir 1 atm de presión.



21. Definir Inlet_A como una velocidad de entrada.

Establecer los parámetros:

- Velocidad: 20 m/s.
- Temperatura: 343 K.
- Especies: 0.078 (H2), 0 (O2) y 0.561 (H2O).
- Definir la saturación de agua como un valor específico.



Zone Name

Moment	Thermal	Radiation	Species	DPM	Multiphase	Potential	UDS
--------	---------	-----------	---------	-----	------------	-----------	-----

D Specify Species in Mole Fractions

Species Mass Fractions

h₂ O₂ ...

Ar ...

f:12:0.06

OK Cancel Help

Zone Name

Moment	Thermal	Radiation	Species	DPM	Multiphase	Potential	UDS
--------	---------	-----------	---------	-----	------------	-----------	-----

Temperature (1) 343 ...

OK Cancel Help

Velocity Inlet [X]

Zone Name
inlet_a

Momentum Thermal Radiation Species DPM Multiphase Potential UDS

User-Defined Scalar Boundary Condition

Electric Potential Specified Flux

Protonic Potential Specified Flux

Water Saturation Specified Value

Water Content Specified Flux

User-Defined Scalar Boundary Value

Electric Potential 0

Protonic Potential 0

Water Saturation 0

Water Content 0

OK Cancel Help

22. Definir Inlet_C como una velocidad de entrada.

Establecer los parámetros:

- Velocidad: 66.66 m/s.
- Temperatura: 343 K.
- Especies: 0 (H2), 0.169 (O2) y 0.274 (H2O).
- Definir la saturación de agua como un valor específico.

23. Definir temperatura para las salidas.

Se define una temperatura de 343 K para Outlet_A y Outlet_C y verificar que sean presiones de salida.

Outlet

outlet_a (pressure-outlet, id=42)

outlet_c (pressure-outlet, id=43)

Pressure Outlet [X]

Zone Name
outlet_a

Momentum Thermal Radiation Species DPM Multiphase Potential UDS

Backflow Total Temperature (k) 343

Pressure Outlet [X]

Zone Name
outlet_c

Momentum Thermal Radiation Species DPM Multiphase Potential UDS

Backflow Total Temperature (k) 343

24. Configurar el borne del ánodo.

- Temperatura: 343 K.
- Potencial eléctrico: 0 V.

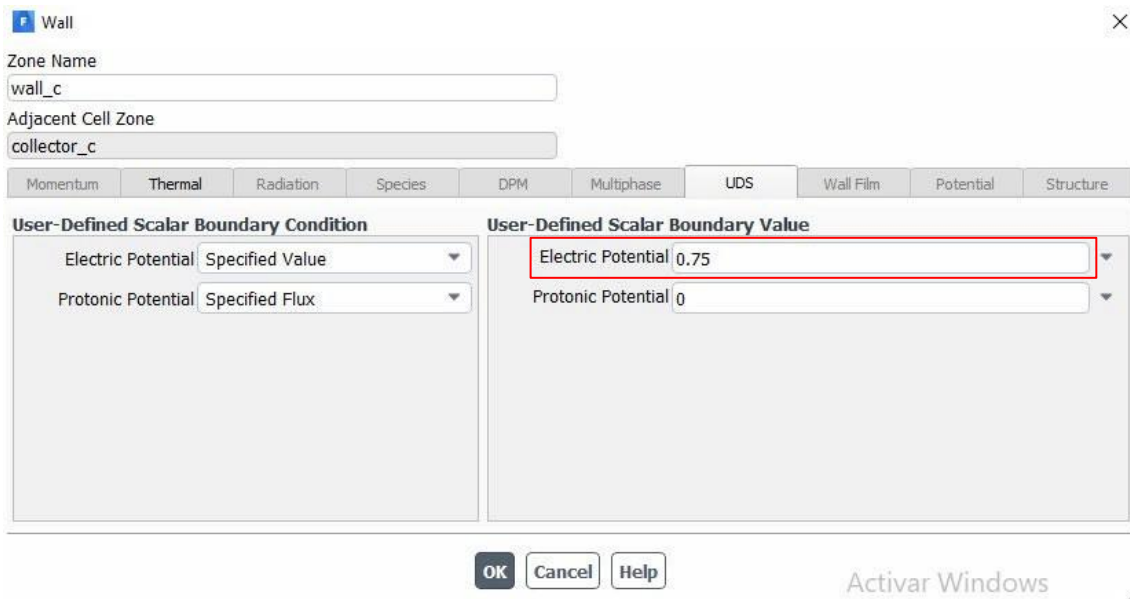
The screenshot shows the 'Wall' dialog box in ANSYS Fluent. The 'Zone Name' is 'wall_a' and the 'Adjacent Cell Zone' is 'collector_a'. The 'Thermal' tab is selected, showing 'Thermal Conditions'. Under 'Thermal Conditions', 'Temperature' is selected with a value of 343 K. 'Wall Thickness (m)' is 0 and 'Heat Generation Rate (w/m3)' is 0. There are options for 'Heat Flux', 'Convection', 'Radiation', 'Mixed', 'via System Coupling', and 'via Mapped Interface'. A 'Shell Conduction' checkbox is present with a value of '1 Layer' and an 'Edit...' button. The 'Material Name' is 'aluminum' with an 'Edit...' button. At the bottom are 'OK', 'Cancel', and 'Help' buttons.

The screenshot shows the 'Wall' dialog box in ANSYS Fluent, with the 'UDS' tab selected. It displays 'User-Defined Scalar Boundary Condition' and 'User-Defined Scalar Boundary Value'. Under 'User-Defined Scalar Boundary Condition', 'Electric Potential' is set to 'Specified Value' and 'Protonic Potential' is set to 'Specified Flux'. Under 'User-Defined Scalar Boundary Value', 'Electric Potential' and 'Protonic Potential' are both set to 0. At the bottom are 'OK', 'Cancel', and 'Help' buttons.

25. Configurar borne del cátodo.

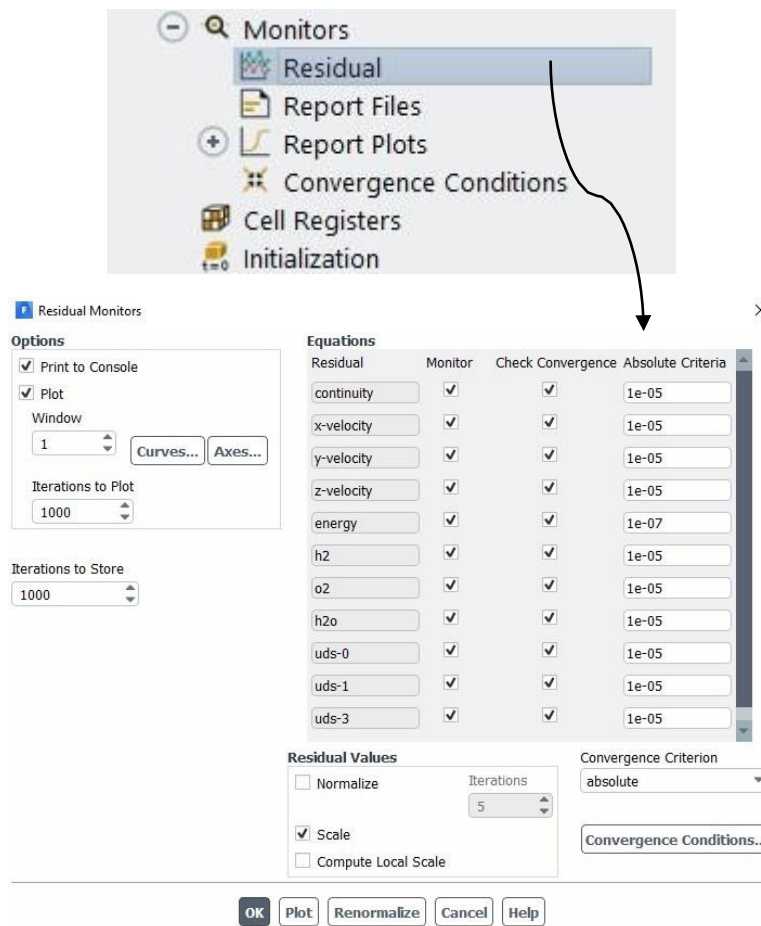
- Temperatura: 343 K.
- Potencial eléctrico: 0.75.

Para obtener las curvas de polarización es necesario variar el valor dentro del rango de operación de la celda, por ejemplo, en este caso el rango va de 0.1-0.9 V con un valor intermedio de 0.75 V en intervalos de 0.1 V



26. Activar residuales de convergencia.

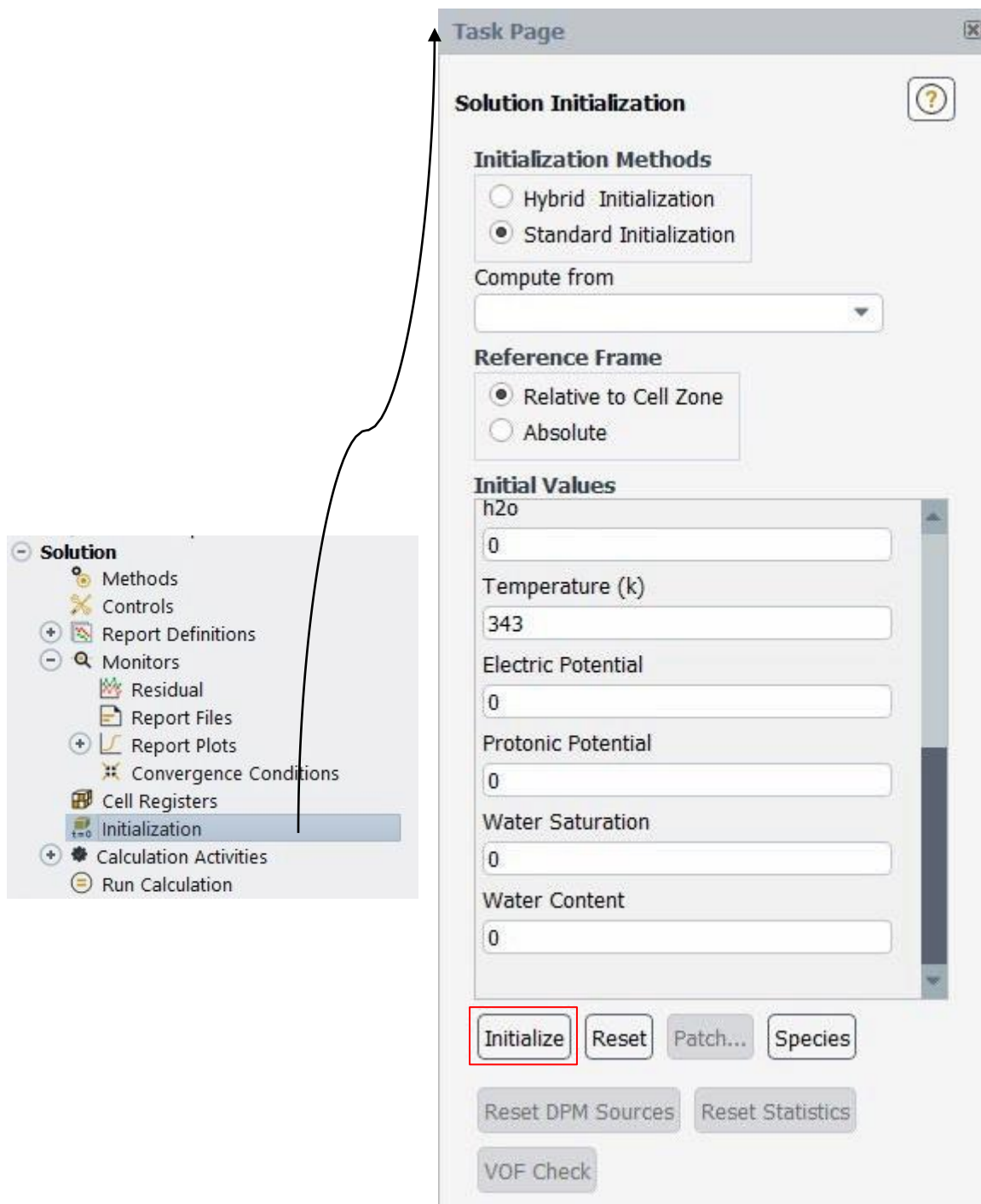
Dado que el módulo PEMFC los desactiva, es necesario activar los residuales de convergencia manualmente.



27. Configuración de la inicialización.

- Temperatura: 343 K.

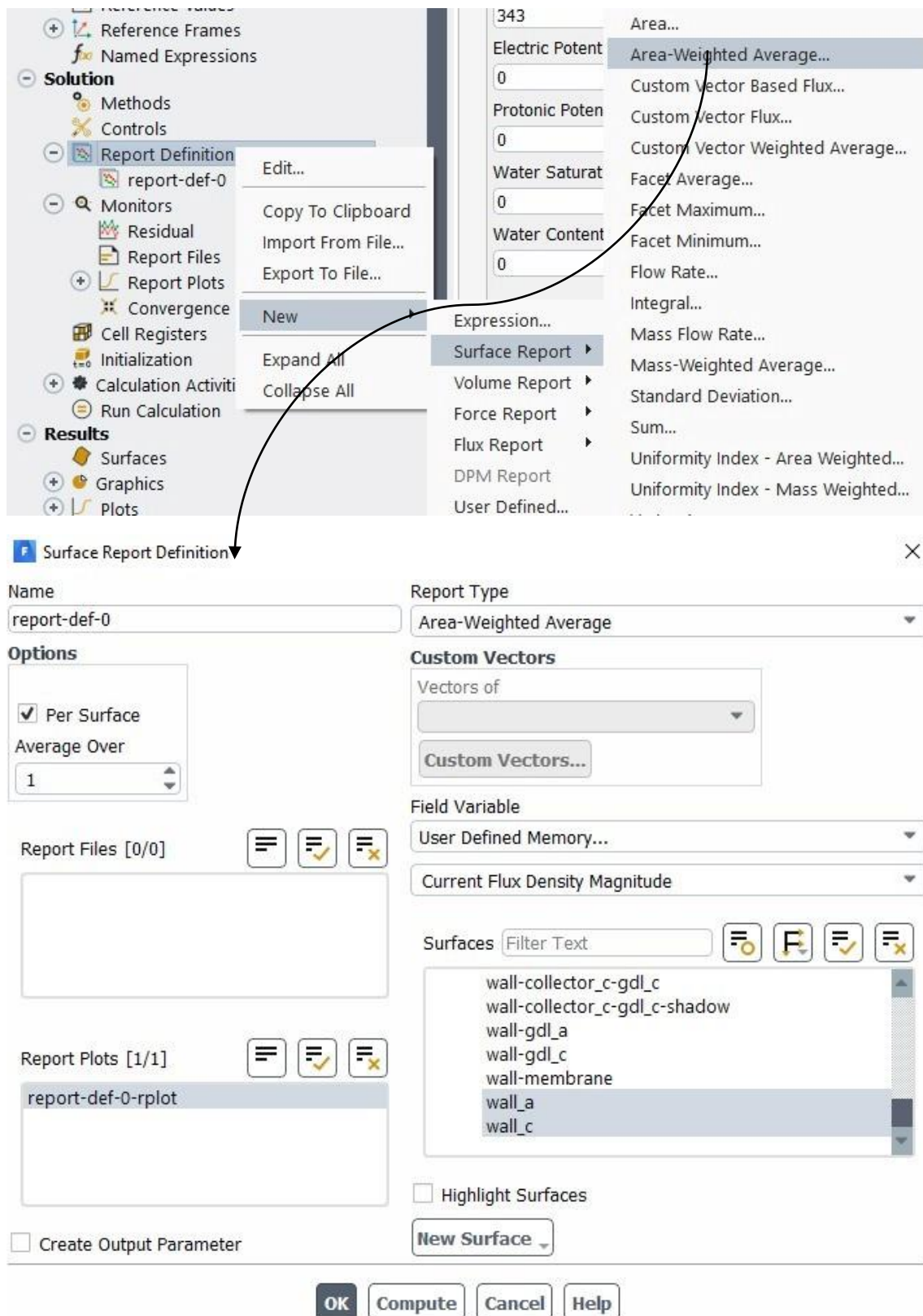
- Verificar que todos los demás valores sean de cero.



28. Definir reporte de superficie.

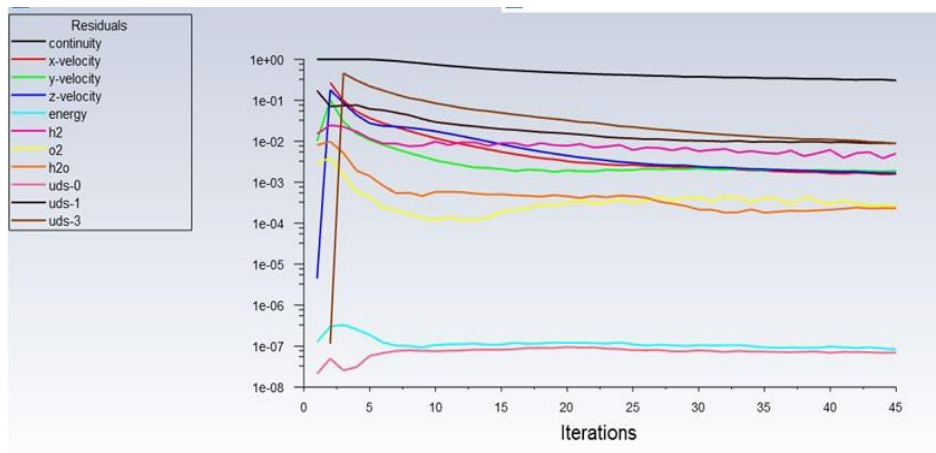
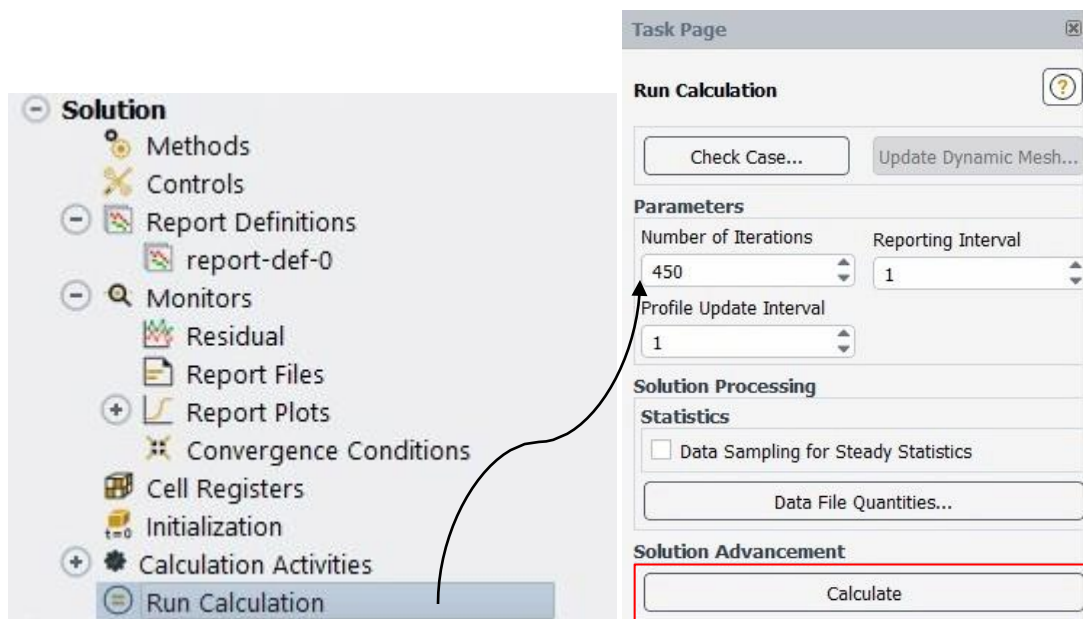
Se define un reporte de superficie del tipo Area-Weighted-Average sobre ambos bornes de la celda (wall_a y wall_c).

- Se activa la opción "Per Surface".
- Se activa la opción "Report Plot", la cual tiene la función de dar a conocer la corriente que fluye sobre ellos.

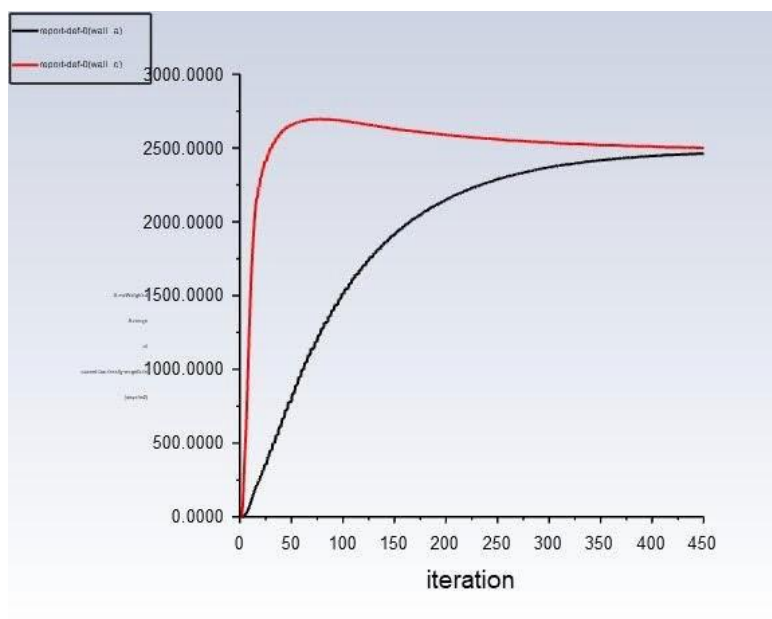


29. Definir iteraciones.

En la ventana de "Run Calculation" se definen un total de 450 iteraciones. Posteriormente, calcular.



Se observa que la convergencia coincide con el comportamiento del monitor de superficie. Una vez que ambos coinciden se determina que el modelo ha convergido.



La curva de polarización obtenida con los diferentes puntos de la simulación es la siguiente, se observa un comportamiento similar al de los datos experimentales, con lo cual se concluye el tutorial.

