



UNIVERSIDAD DE CONCEPCIÓN
FACULTAD DE INGENIERÍA
DEPARTAMENTO INGENIERÍA MECÁNICA



**ANÁLISIS EN CFD DEL EFECTO DE LA POROSIDAD DE LOS SOPORTES
METÁLICOS SOBRE LOS GRADIENTES TÉRMICOS EN UNA CELDA DE
COMBUSTIBLE DE TIPO SOFC**

POR

Pacao Andrés Barros Díaz

Memoria de Título presentada a la Facultad de Ingeniería de la Universidad de Concepción para
optar al título profesional de Ingeniero Civil Mecánico

Profesores Guía:
Andrés René Escalona Insunza
Cristian Alberto Cuevas Barraza
Felipe Abner Sanhueza Gómez

Enero 2025
Concepción (Chile)

© 2025 Pacao Andrés Barros Díaz

© 2025 Pacao Andrés Barros Díaz

Se autoriza la reproducción total o parcial, con fines académicos, por cualquier medio o procedimiento, incluyendo la cita bibliográfica del documento

Dedicatoria

*....Esta Memoria está dedicada a mi Madre,
quien en su abnegada labor, lo ha entregado todo
por mi, obrando mucho más allá de lo que dicta el
deber maternal, enseñándome amor y compasión ...*

*...Y también está dedicada a mi Padre,
quien en su intensa pero corta vida, despertó
mi curiosidad desde pequeño, alimentando mi
mente con conocimientos, enseñándome
pasión y dedicación ...*

Agradecimientos

En primer lugar, agradecer a Dios por permitirme llegar a esta instancia a pesar de todas las dificultades que se han presentado a lo largo de mi vida. Agradecer por supuesto a mis padres, por darme la vida, enseñarme valores fundamentales y educarme. Particularmente, agradecer a mi madre, Marisol, quien me ha entregado amor y contención durante mis 26 años de vida, anteponiéndose de forma casi heroica a la mayor de las desgracias que una familia puede afrontar. Gracias mamita por darme todos estos años, muchas veces abandonándose por completo con tal de atender mis necesidades y las de mis hermanos. Gracias a ti estoy aquí. También agradecer a mi padre Q.E.P.D., Juan Pablo, alias Pacao, quien desde pequeño apoyó mi curiosidad e impulso mi desarrollo, celebrando cada pequeño logro. Gracias por heredarme ese espíritu crítico hacia todas las cosas que me rodean, así como también un buen gusto musical.

Agradecer también a mi pareja, Alejandra, mi compañera de vida, mi confidente y mi refugio. Gracias por el apoyo todos estos años, por escucharme con paciencia cada vez que creía que ya no podía más, por acompañarme en mis momentos altos y bajos, y por estar a mi lado incondicionalmente, alegrándome los momentos cotidianos y también los especiales.

A mis hermanos Simón y Mhara, por su apoyo incondicional, por todas las risas y el férreo palmazo en la espalda, diciéndome que puedo con todo y que lo estoy haciendo bien. Agradecer también a mis abuelos, Gustavo y Chelita, quienes nos acogieron con los brazos abiertos cuando más lo necesitábamos, abriendo las puertas de su casa con la calidez que los caracteriza. Gracias por el apoyo económico brindado todos estos años y el cariño, en especial a mi tata Gustavo, quien se convirtió como en mi papá cuando el mío ya no estaba, siendo mi apoderado toda la enseñanza media, acompañándome todos mis actos y a Santiago cuando tenía que ir al doctor. A mi tío Tito, íntimo amigo de mi padre, por el apoyo, los asados y las conversaciones brindadas. A Mateo Daza por brindarme un hogar en Concepción donde terminar mi carrera.

A mis profesores, por enseñarme todo lo que se. En especial al profesor Andrés Escalona, por confiar en mí para realizar este trabajo, al profesor Cristian Cuevas al profesor Felipe Sanhueza, además de los fondosproyecto Fondecyt Iniciación 11231211, cuyo título es "Core-shell heterostructure as triple-conducting oxygen reduction reaction electrode for metal supported solid oxide fuel cells" y FOVI230161, cuyo título es "Optimización Y Simulación Multifísica Avanzada De Electrodo Para Celdas De Combustible De Cerámicas Protónicas Con Soporte Metálico: Innovación En Manufactura Y Modelamiento" por aportar capital para la realización de este trabajo.

Por último, pero no menos importante, no puedo terminar sin agradecer a mis amigos, quienes salvaron muchos días de penurias con sus risas y juegos, sobre todo en pandemia cuando mi único escape era entrar a discord y charlar horas de cualquier cosa. Penz, Juano, Maticu, Moisés, Carlitos correcto, Nacha, Kharla, Aníbal, Ignacio, Cris, y en especial, a Matías Ávila, por ser mi mejor amigo desde el primer día de U, y a Ricardo Flores, mi amigo, compañero y *pariente* desde 7mo básico, por hablarme y convencerme de estudiar Ingeniería Mecánica. A todos ellos, muchas gracias por estar ahí.

Resumen

La presente Memoria de Título investiga el comportamiento térmico y electroquímico de celdas de combustible de óxido sólido tipo plana (SOFC) con soporte metálico, analizando el efecto de la porosidad de los soportes sobre los gradientes térmicos. Se analizan problemas relacionados con las tensiones térmicas en materiales cerámicos, las cuales pueden ocasionar problemas como delaminaciones y grietas debido a altos gradientes térmicos. Mediante simulaciones de dinámica de fluidos computacional (CFD) en ANSYS Fluent, se estudian configuraciones con porosidades en los soportes desde 0.2 hasta 0.8, manteniendo constante la porosidad en los electrodos.

Los resultados muestran que la porosidad de los soportes impacta en el rendimiento térmico y electroquímico. Un aumento en la porosidad mejora la difusión de reactantes hacia la zona de reacción en la frontera de triple fase (TPB), aumentando la densidad de corriente y la potencia generada. Sin embargo, para porosidades muy altas en los soportes se generan cuellos de botella en la difusión de especies, limitando el transporte efectivo de reactantes y, por ende, la eficiencia de la celda. Además, el aumento de porosidad reduce la capacidad de los soportes para distribuir el calor producido por las reacciones electroquímicas, lo que provoca un aumento en los gradientes térmicos. A partir de porosidades mayores a 0.5, en ciertas zonas de los electrodos, cercanas a la zona del INLET, estos gradientes pueden superar los 10 [°C/cm], comprometiendo la estabilidad estructural de la celda. Esta concentración de grandes gradientes térmicos es explicada debido a la intensificación de las reacciones electroquímicas por la mayor concentración de reactantes y el salto térmico de los gases al alcanzar la zona de reacción.

Se identifica una porosidad óptima de 0.4 para los soportes metálicos, ya que equilibra la distribución térmica y el transporte de reactantes, optimizando el rendimiento de la celda y manteniendo los gradientes térmicos dentro de límites seguros para su durabilidad. Se destaca además la necesidad de estudios adicionales que incluyan heterogeneidades microestructurales, la difusión de knudsen, propiedades térmicas anisotrópicas y el comportamiento a largo plazo de los materiales bajo

Los hallazgos en este informe representan un avance significativo en el diseño de SOFC más eficientes y duraderas, especialmente para aplicaciones estacionarias de generación de energía, abriendo la puerta a futuros trabajos e investigaciones que permitan optimizar el desempeño y reducir fallas estructurales en este tipo de celdas.

Abstract

This study investigates the thermal and electrochemical behavior of planar solid oxide fuel cells (SOFC) with metallic supports, analyzing the effect of the support porosity on thermal gradients. It examines issues related to thermal stresses in ceramic materials, which can lead to problems such as delaminations and cracks due to high thermal gradients. Through computational fluid dynamics (CFD) simulations in ANSYS Fluent, configurations with support porosities ranging from 0.2 to 0.8 are studied, while maintaining constant porosity in the electrodes.

The results show that the porosity of the supports significantly impacts thermal and electrochemical performance. An increase in porosity enhances the diffusion of reactants towards the reaction zone at the triple-phase boundary (TPB), increasing current density and power output. However, very high porosity in the supports creates bottlenecks in species diffusion, limiting the effective transport of reactants and thus the cell's efficiency. Additionally, increased porosity reduces the ability of the supports to distribute the heat generated by electrochemical reactions, leading to an increase in thermal gradients. For porosities greater than 0.5, in certain areas of the electrodes near the inlet zone, these gradients can exceed 10 [$^{\circ}\text{C}/\text{cm}$], compromising the cell's structural stability. This concentration of high thermal gradients can be explained by the intensification of electrochemical reactions due to the higher concentration of reactants and the thermal jump of the gases upon reaching the reaction zone.

An optimal porosity of 0.4 for metallic supports is identified, as it balances thermal distribution and reactant transport, optimizing cell performance while keeping thermal gradients within safe limits for durability. Furthermore, the need for additional studies is highlighted, which should include microstructural heterogeneities, Knudsen diffusion, anisotropic thermal properties, and the long-term behavior of materials under operating conditions.

The findings in this report represent a significant advancement in the design of more efficient and durable SOFCs, particularly for stationary energy generation applications. It opens the door to future work and research aimed at optimizing performance and reducing structural failures in this type of cell.

Tabla de Contenidos

1 Agradecimientos.....	4
2 Resumen.....	5
3 Abstract	6
Tabla de Contenidos.....	i
Lista de Figuras	iii
Lista de tablas.....	v
4 GLOSARIO:.....	vi
5 NOMENCLATURA:	vi
1 CAPÍTULO 1: Introducción.....	1
1.1 Contextualización	1
1.2 Estado del Arte	4
1.3 Hipótesis	10
1.4 Objetivo General.....	10
1.5 Objetivos Específicos	10
1.6 Metodología.....	10
2 CAPÍTULO 2: Marco Teórico	13
2.1 Celdas de combustible.....	13
2.2 Materiales utilizados en celdas SOFC	15
2.3 Electroquímica.....	16
2.4 Porosidad, tortuosidad y permeabilidad	20
2.5 Mecánica de Fluidos	21
2.6 Transporte de masa y difusión de especies.....	22
2.7 Transferencia de Calor.....	25
2.8 Caso de estudio.....	26
3 CAPÍTULO 3: Modelo computacional	30
3.1 Modelo en Fluent.....	30
3.2 Mallado.....	32
3.3 Configuración de geometría y condiciones de borde	34
3.4 Estrategia de simulación.....	37
3.5 Criterios de Convergencia	38

3.6 Características técnicas del computador utilizado.....	38
4 CAPÍTULO IV: Resultados	39
4.1 Velocidad en los canales.....	39
4.2 Curvas de Polarización de la celda	40
4.3 Difusión del combustible y oxígeno.....	41
4.4 Temperatura de los gases.....	42
4.5 Temperaturas y gradientes térmicos al interior de la celda	43
5 CAPÍTULO V: Análisis de Resultados.....	51
5.1 Gradiente térmico en la celda	54
6 CAPÍTULO VI: Conclusiones	58
6.1 Limitaciones	58
6.2 Mejoras, trabajos futuros y proyecciones	59
7 Referencias	61
8 ANEXOS.....	66
8.1 ANEXO I: Concentración de reactantes a través de las capas porosas.	66
8.2 ANEXO II: Perfil de concentración de Reactantes a lo largo de la celda.	68
8.3 ANEXO III: Temperaturas de la celda	70
8.4 ANEXO IV: Gráficos de temperaturas promedio a lo largo del eje Z	72
8.5 ANEXO V: Temperaturas de las interfaces	80
8.6 ANEXO VI: Mapa de gradientes térmicos para las distintas interfaces.....	84
8.7 ANEXO VII: Gradiente térmico máximo y promedio en función de la porosidad.....	88

Lista de Figuras

Figura 1. Calentamiento global entre años 1960 a 2100.	1
Figura 2. Emisiones globales de GEI por sector	2
Figura 3. Proyección de la demanda global de energía suministrada con hidrógeno.	2
Figura 4. Comparación de la eficiencia en la producción de energía real en función de la escala de potencia para distintas tecnologías	3
Figura 5. Resumen de las condiciones de borde más utilizadas en la modelación de celdas de combustible tipo SOFC.	5
Figura 6. Configuraciones de flujo más comunes en la literatura.	6
Figura 7. Esquema de canales rectangulares.	6
Figura 8. Comparación de la forma de los canales de distribución de gases y su impacto en la distribución de temperaturas para una celda PEMFC.	7
Figura 9. Modelo tridimensional de la celda.	9
Figura 10. Vista seccional de una celda de combustible plana.	13
Figura 11. Esquema de funcionamiento de una celda de tipo SOFC.	15
Figura 12. Esquema de la composición de las diferentes configuraciones para celdas SOFC.	15
Figura 13. TPB para una interfaz de electrolito-ánodo en una celda SOFC.	17
Figura 14. Curva de polarización de una celda de combustible.	18
Figura 15. Diagrama del camino recorrido por una especie en el contexto de la definición de tortuosidad en materiales porosos.	20
Figura 16. Volumen elemental que contiene una mezcla multicomponente.	23
Figura 17. Esquema de los 3 mecanismos de transferencia de calor en una de celda SOFC de tipo plana	25
Figura 18. Esquema de la celda a estudiar.	26
Figura 19. Dimensiones del canal estudiado.	26
Figura 20. Funcionamiento del modelo SOFC con electrolitos no resueltos en Ansys Fluent.	30
Figura 21. Condensación de la malla	32
Figura 22. Densidad de corriente en el colector de la celda en función del número de elementos de la malla.	33
Figura 23. Mallado utilizado para simular el canal de la celda SOFC.	33
Figura 24. Detalle de las zonas utilizadas en el modelo en ANSYS Fluent	34
Figura 25. Configuración de superficies en ANSYS Fluent.	34
Figura 26. Comparación entre simulaciones.	37
Figura 27. Estrategia de iteración.	37
Figura 28. Orientación del sistema de coordenadas en el canal de la celda SOFC.	39
Figura 29. Perfil de velocidad del combustible y del aire en sus respectivos canales	39
Figura 30. Curva de polarización de la celda	40
Figura 31. Difusión del hidrógeno desde el canal a través del soporte y ánodo.	41

Figura 32. Difusión del oxígeno desde el canal a través del soporte y cátodo.....	42
Figura 33. Perfil de temperatura de los gases en sus respectivos canales en el plano XZ medio de la celda.	42
Figura 34. Temperatura de la celda para una porosidad de los soportes de $\epsilon = 0.2$	43
Figura 35. Perfil de temperaturas al interior de la celda en el plano XZ medio de la celda.	44
Figura 36. Temperatura promedio en plano XZ en función de la coordenada z local para el ánodo	45
Figura 37. Gradiente de temperaturas promedios a lo largo del eje Z en función de la porosidad....	46
Figura 38. Temperatura de la interfaz Ánodo-Electrolito.	47
Figura 39. Temperatura de la interfaz Cátodo-Electrolito.	47
Figura 40. Temperatura de la interfaz Ánodo-Soporte.	48
Figura 41. Temperatura de la interfaz Cátodo-Soporte	48
Figura 42. Mapa de contorno de los gradientes térmicos en las interfaces del Ánodo	49
Figura 43. Mapa de contorno de los gradientes térmicos en las interfaces del Cátodo	50
Figura 44. Concentración promedio de hidrógeno en la interfaz Ánodo-Electrolito y la corriente generada por la celda.	52
Figura 45. Concentración promedio de oxígeno en la interfaz Cátodo-Electrolito.....	53
Figura 46. Gradiente térmico máximo en la interfaz Ánodo-Electrolito.	55
Figura 47. Gradiente térmico máximo en la interfaz Cátodo-Electrolito.....	55
Figura 48. ΔT máximo en las interfaces Ánodo-Electrolito y Cátodo-Electrolito.....	56

Lista de tablas

Tabla 2-1. Comparación de celdas de combustible. [15]	14
Tabla 2-2. Espesores y materiales de las capas para la celda SOFC.....	27
Tabla 2-3. Propiedades de los materiales [22] y [38].....	28
Tabla 2-4. Propiedades porosas de los materiales.....	28
Tabla 3-1. Configuración de las zonas en ANSYS Fluent.....	35
Tabla 3-2. Condiciones de borde aplicadas a cada superficie en ANSYS Fluent.....	35
Tabla 3-3. Condiciones de borde impuestas al canal de la celda.	36
Tabla 3-4. Características técnicas del computador utilizado	38
Tabla 5-1. Velocidades y Reynolds alcanzados en los canales de la celda.....	51

GLOSARIO:

SOFC	: Del inglés <i>Solid Oxide Fuel Cell</i> o Celda de Combustible de Óxido Sólido en español
CFD	: Del inglés <i>Computational Fluid Dynamics</i> o Dinámica de Fluidos Computacional en español
REDOX	: Reacción Reducción-Oxidación
TPB	: Del inglés <i>Triple Phase Boundary</i> o Frontera de Triple Fase en español
PEMFC	: Del inglés <i>Proton Exchange Membrane Fuel Cell</i> o Celda de Combustible de Intercambio de Protones en español
DMFC	: Del inglés <i>Direct Methanol Fuel Cell</i> o Celda de Combustible de Metanol Directo
AFC	: Del inglés <i>Alkaline Fuel Cell</i> o Celda de Combustible Alcalina
PAFC	: Del inglés <i>Phosphoric Acid Fuel Cell</i> o Celda de Combustible de Ácido Fosfórico
MCFC	: Del inglés <i>Molten Carbonate Fuel Cell</i> o Celda de Combustible de Carbonato Fundido
AS-SOFC	: Del inglés <i>Anode Supported Solide Oxide Fuel Cell</i> o Celda de Combustible de Óxido Sólido soportada por Ánodo
CS-SOFC	: Del inglés <i>Cathode Supported Solide Oxide Fuel Cell</i> o Celda de Combustible de Óxido Sólido soportada por Cátodo
ES-SOFC	: Del inglés <i>Electrolyte Supported Solide Oxide Fuel Cell</i> o Celda de Combustible de Óxido Sólido soportada por Electrolito
MS-SOFC	: Del inglés <i>Metal Supported Solide Oxide Fuel Cell</i> o Celda de Combustible de Óxido con Soporte Metálico
REA	: Resistencia Específica de Área
LCSF	: Del inglés <i>Lanthanum Strontium Cobalt Ferrite</i> o Lantano Estroncio Cobalto Ferrita en español
YSZ	: Del inglés <i>Ytria-Stabilized Zirconia</i> o Zirconia Estabilizada con Itrio en español.
GDC	: Del inglés <i>Gadolinium-Doped Ceria</i> o Ceria Dopada con Gadolinio en español
FEM	: De inglés <i>Finite Elements Method</i> o Método de los Elementos Finitos en español
FVM	: De inglés <i>Finite Volume Method</i> o Método de los Volúmenes Finitos en español
APU	: Del inglés <i>Auxiliary Power Unit</i> o Unidad de potencia Auxiliar en español
Voc	: Voltaje de Corto circuito

NOMENCLATURA:

A	: Área
C	: Concentración Molar
D	: Coeficiente de Difusión molecular
D^{eff}	: Coeficiente de Difusión efectivo
D_k	: Coeficiente de Difusión de Knudsen
D_h	: Diámetro hidráulico
d_p	: Diámetro o tamaño de poro
e	: Energía

E	: Potencial eléctrico
ϵ	: Porosidad
F	: Constante de Faraday
\vec{F}	: Fuerza
\vec{g}	: Aceleración de gravedad
γ	: Exponente de Concentración de especies
h	: Entalpía
h_{cv}	: Coeficiente de transferencia de calor por convección
\mathbf{I}	: Matriz Identidad
i	: Intensidad de corriente
J	: Flujo Difusivo
k_T	: Conductividad térmica
k_{eff}	: Conductividad Efectiva
K	: Permeabilidad
M	: Peso Molecular
μ	: Viscosidad dinámica
n	: Número de Moles
n_e	: Número de Electrones
η	: Pérdidas de voltaje o polarización
∇	: Gradiente
Ω	: Resistencia Eléctrica
p	: Presión
Q_k	: Flujo de Calor de conducción
Q_c	: Flujo de Calor de convección
ρ	: Densidad
r_e	: Radio Efectivo del poro
R	: Constante de Gas Ideal
Re	: Número de Reynolds
r	: Tasa de reacción de especies
S	: Término Fuente en ecuaciones de conservación
T	: Temperatura
t	: Tiempo
τ	: Tortuosidad
$\boldsymbol{\tau}$: Tensor de esfuerzos viscosos
u	: Velocidad
V	: Volumen
χ	: Gradiente térmico

CAPÍTULO 1: Introducción

1.1 Contextualización

Actualmente, uno de los mayores retos a los que la humanidad se encuentra enfrentado es el cambio climático y el calentamiento global, provocado por el aumento en las emisiones de gases invernadero de larga duración (LLGHGs) por sus siglas en inglés, principalmente CO₂ equivalente. En el siglo pasado, la temperatura de la superficie global se incrementó a una tasa 0.6 °C/siglo [1]. Actualmente el problema se ha agudizado, alcanzando niveles récords de temperatura en el año 2023, el cual ha sido considerado como el año más caliente registrado desde que se han hecho mediciones a mediados del siglo XIX, batiéndose también récords en el nivel del mar, los niveles de concentración de LLGHGs en la atmósfera y temperatura marina [2].

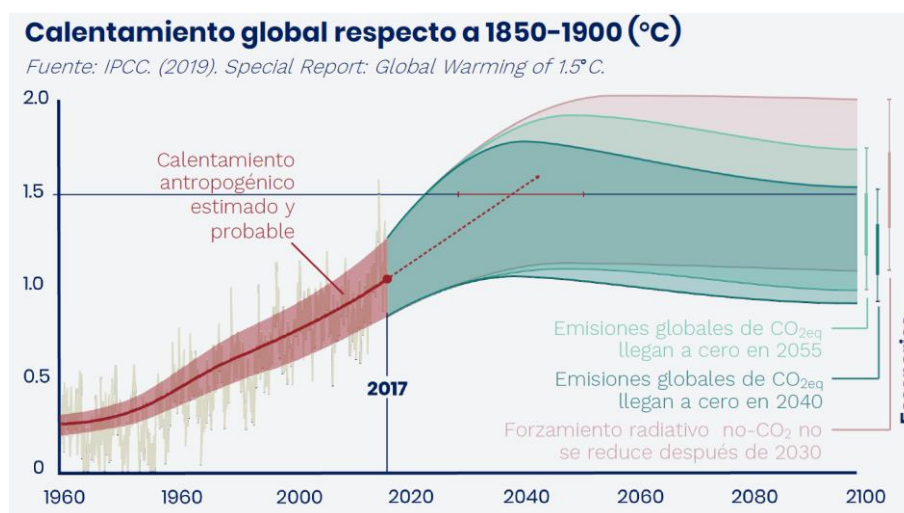


Figura 1. Calentamiento global entre años 1960 a 2100. [3]

El aumento en las concentraciones de LLGHGs tiene una clara marca antropogénica [4], por lo que encontrar la manera de disminuir las emisiones de gases invernadero es crucial e imperativo, debiendo cambiar radicalmente las formas de producir y consumir energía en el mundo. En la Figura 1, se muestra cómo el calentamiento global proyectado depende de la reducción de emisiones de gases de efecto invernadero. Si las emisiones de CO₂ se reducen a cero en 2040 o 2055, el aumento de temperatura se limita, pero si no se toman medidas suficientes, el calentamiento continuará en aumento. El gráfico destaca la importancia de actuar rápidamente para frenar las emisiones y mitigar el cambio climático.

La creciente conciencia sobre la necesidad de reducir las emisiones de gases de efecto invernadero ha llevado a la adopción de políticas y acuerdos internacionales, como el Acuerdo de París de 2015, en el que los países se comprometieron a limitar el aumento de la temperatura global por debajo de los 2 grados Celsius [5]. En este contexto, la descarbonización de las matrices energéticas se ha convertido en un objetivo prioritario para muchas naciones, que buscan mitigar su impacto ambiental mientras aseguran el suministro energético.

Según datos obtenidos de la Estrategia Nacional de hidrógeno verde [3], en el planeta, 3 cuartas partes de las emisiones corresponden al sector energético, siendo la principal fuente de emisiones el uso de combustibles fósiles. En la Figura 2 se muestran los porcentajes de cada sector en cuanto a emisiones GEI.

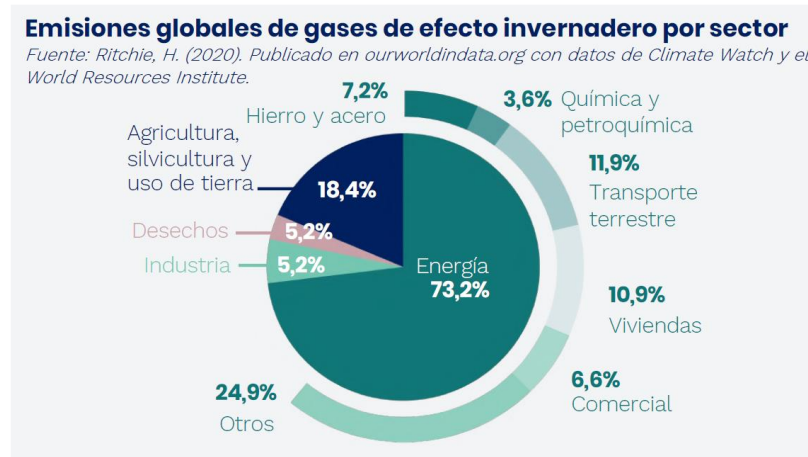


Figura 2. Emisiones globales de GEI por sector [3].

Con el fin de cumplir con los acuerdos, distintos países han comenzado a implementar estrategias nacionales de descarbonización, como el caso de Chile con su estrategia climática a largo plazo, en donde se fijan objetivos al año 2050 para cumplir la meta de alcanzar y mantener la neutralidad de las emisiones [6]. Para lograr dichos objetivos, es fundamental el uso eficiente de la energía, junto con explorar nuevas y mejores formas de generarla, almacenarla y transportarla.

En este contexto, es que el hidrógeno verde toma relevancia, convirtiéndose en uno de los protagonistas, en especial en nuestro país, ya que cuenta con un potencial enorme de generación de energías renovables [3], cuyo excedente puede ser usado en la generación de hidrógeno verde. En la Figura 3, se muestra una proyección de la energía suministrada por hidrógeno que será demandada de aquí al 2050.

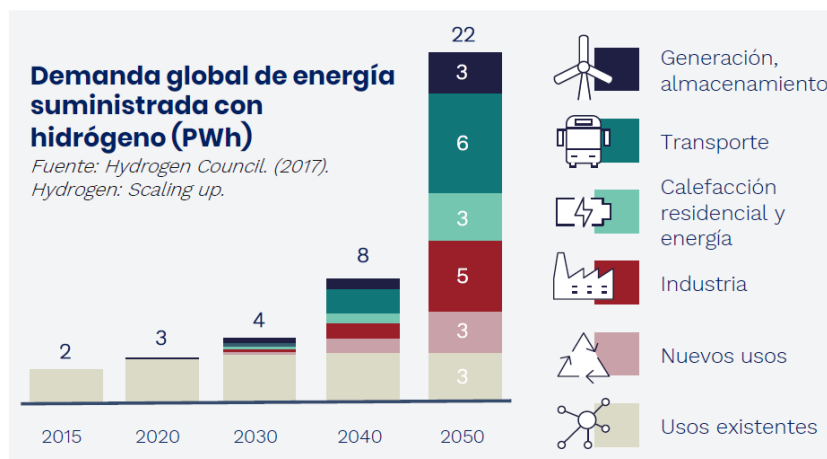


Figura 3. Proyección de la demanda global de energía suministrada con hidrógeno [3].

La forma de producir hidrogeno verde con los excedentes de energía eléctrica provenientes de fuentes de ERNC es mediante la electrólisis, proceso que consiste en utilizar energía eléctrica para romper los enlaces en la molécula de agua, generando dos moléculas separadas, una de oxígeno y otra de agua. El objetivo de este proceso es lograr almacenar la energía disponible, y no desaprovecharla, como por ejemplo, la energía solar, para luego usarla en otro momento o de otra forma.

Así, el uso de celdas de combustible, las cuales pueden generar electricidad a partir del hidrógeno, ha tomado fuerza en los últimos años. Las celdas de combustible, en comparación con las máquinas térmicas convencionales, pueden alcanzar mejores eficiencias, debido a que presentan menor cantidad de irreversibilidades en el proceso [7]. Además, las celdas de hidrógeno producen emisiones menos dañinas al ambiente, siendo el único subproducto del proceso vapor y calor en el caso de utilizar hidrógeno como combustible [8]. En la Figura 4, se pueden observar un gráfico comparativo de eficiencias prácticas de conversión de energía para diferentes tecnologías.

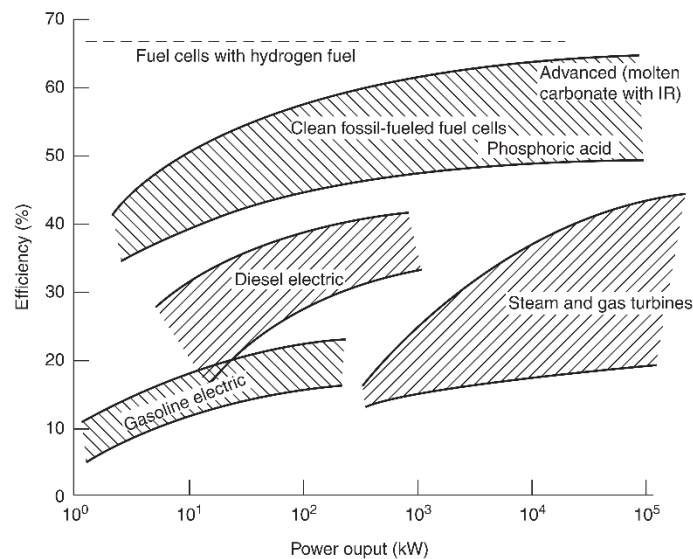


Figura 4. Comparación de la eficiencia en la producción de energía real en función de la escala de potencia para distintas tecnologías [7]

Dentro del universo de celdas de combustible, se encuentran las celdas tipo SOFC, las cuales operan a altas temperaturas (Sobre los 600 [°C]), favoreciendo así la reacción electroquímica sin la necesidad de emplear metales preciosos como catalizadores. Estas celdas destacan principalmente por su alta eficiencia y flexibilidad en el combustible a utilizar [9].

Uno de los principales desafíos que presentan este tipo de celdas, es que se componen principalmente de materiales cerámicos, los cuales, debido a su mala conductividad térmica, responden de mala manera frente a cambios bruscos de temperatura, generando fallas como delaminación y agrietamiento [10] en los materiales cuando son expuestos a gradientes térmicos demasiado altos

Según Zeng et. al. [10], los métodos de fallas en celdas de combustible de óxido sólido (SOFC) están principalmente asociados con los gradientes térmicos y el manejo ineficiente de la temperatura. Los estudios revisados indican que el gradiente térmico en las SOFC puede alcanzar valores de hasta 200

°C/cm en condiciones extremas, como la descomposición de amoníaco, aunque para evitar daños estructurales, se recomienda que no supere los 10 °C/cm en aplicaciones estándar. Gradientes superiores a estos valores pueden provocar delaminación y formación de grietas en las estructuras PEN (electrodo positivo, electrolito y electrodo negativo), afectando significativamente el rendimiento y la durabilidad de las celdas.

Añadir una estructura de metal como soporte, permitiendo disminuir el grosor de las capas de electrodos y electrolito, podría ayudar a distribuir de mejor forma la temperatura [11], además de mejorar la resistencia estructural de la celda [12].

Además, la porosidad de los materiales juega un papel fundamental, puesto que la microestructura de las distintas capas puede jugar a favor o en contra de una buena distribución de los gases a través del material, afectando la generación eléctrica, y a su vez, de la transferencia de calor a través de estas mismas.

El desafío radica entonces en investigar como impacta el soporte metálico y las porosidades de los materiales en una buena distribución de la temperatura en toda la superficie de la celda, evitando los esfuerzos térmicos excesivos que puedan generar fallas.

1.2 Estado del Arte

1.2.1 Materiales para el soporte metálico

Con respecto a metales utilizados en estructuras para las celdas, ya sea soporte o interconector, se realizó una revisión de la literatura, en donde se encontró el uso principalmente de acero de alta temperatura destacando el Crofer 22 APU [13] y el Acero inoxidable similares al AISI 430.

Kai Xu y Liangzhu Zhu [14] en su estudio analiza la oxidación del acero inoxidable poroso 430L (similar al AISI 430) a 800 °C en aire seco, evaluando su viabilidad como sustrato para celdas de combustible de óxido sólido soportadas en metal (MS-SOFC). El acero 430L, con una porosidad del 20-25%, mantiene sus propiedades durante las primeras etapas de oxidación, pero la exposición prolongada reduce la porosidad debido al crecimiento de óxidos. La vida útil estimada del material es de 1500 horas antes de que la oxidación se acelere, lo que lo hace adecuado para aplicaciones SOFC móviles o portátiles con ciclos moderados.

1.2.2 Modelación de celdas de combustible

Pacheco [15], simuló mediante métodos de CFD una celda SOFC plana con soporte metálico, variando la velocidad de entrada de los gases, la distribución de gases y el porcentaje de porosidad en el ánodo, cátodo y el acero ferrítico del soporte metálico. Se idealizó el sistema en varios aspectos, incluyendo un estado estacionario y régimen laminar, sin considerar las reacciones electroquímicas, la generación de masa, la difusión de especies ni el calentamiento por efecto Joule. Los resultados mostraron que la porosidad no influye significativamente en el gradiente térmico, mientras que la distribución de gases y la velocidad de entrada sí lo hacen, obteniéndose distribuciones térmicas más homogéneas a velocidades bajas (1 m/s) y con distribución en contraflujo. Pacheco propone recrear el estudio incluyendo la generación de calor por el calentamiento de Joule y las reacciones en el punto de triple

fase (TPB), lo cual podría ofrecer una representación más precisa del comportamiento térmico de la celda.

Sobre modelación, Dhanasekaran et. al. [16] en su review, analizan el uso de la dinámica de fluidos computacional (CFD) en la modelación de celdas de combustible cerámicas protónicas (PCFCs). La comprensión de los procesos físicos involucrados, como la transferencia de calor, el transporte de especies y las reacciones electroquímicas, es fundamental para mejorar el rendimiento de las PCFCs. La revisión destaca el uso de software comercial como ANSYS FLUENT y COMSOL MULTIPHYSICS para modelar estos sistemas, junto con la aplicación de la ley de Fick para el análisis de la difusión a través de electrodos y electrolitos. El estudio, dentro de sus conclusiones, destaca el uso de la simulación para optimizar el rendimiento de las PCFC sin la necesidad de realizar experimentos que suelen ser más costosos y complejos.

Zeng et. al. [10], en su review, también se refieren a la modelación mediante dinámica de fluidos computacional (CFD) de las SOFC. En su revisión, describen que la mayoría de los estudios utilizan principalmente métodos como el de volumen finito (FVM), elementos finitos (FEM), y diferencias finitas (FDM) para resolver las ecuaciones de conservación de energía, momentum y especies químicas. Los modelos de difusión más comúnmente empleados son los de Stefan-Maxwell y la ley de Fick, que ayudan a analizar la interacción y transferencia de gases en las celdas. Los resultados indican que una distribución uniforme del flujo de gases y el uso de configuraciones como el co-flow y los canales rectangulares permiten una disipación de calor más eficiente (Ver Figura 7), lo cual minimiza la formación de puntos calientes y distribuye el calor de manera más homogénea. El estudio concluye que optimizar la geometría y la disposición de los canales de flujo es crucial para controlar los gradientes térmicos y prevenir daños estructurales en las celdas. pueden reducir significativamente los gradientes térmicos, mejorando la eficiencia y estabilidad térmica de las celdas. Las estrategias de manejo térmico, como el uso de intercambiadores de calor y diseños innovadores de canales de gas, han demostrado ser efectivas para mantener los gradientes de temperatura dentro de límites seguros, optimizando así el rendimiento y la vida útil de las celdas SOFC.

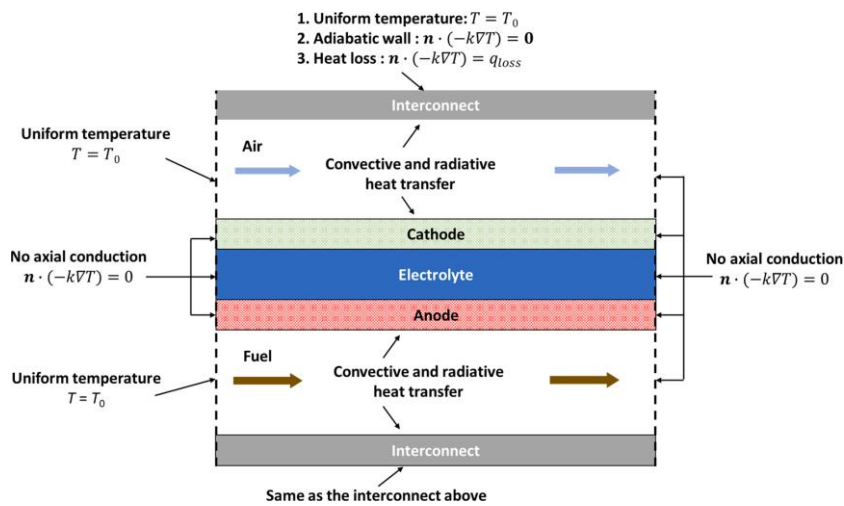


Figura 5. Resumen de las condiciones de borde más utilizadas en la modelación de celdas de combustible tipo SOFC. [10]

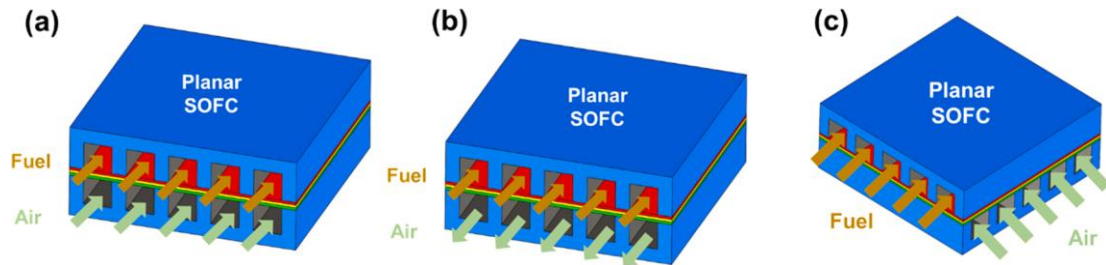


Figura 6. Configuraciones de flujo más comunes en la literatura. (a). Flujo paralelo, (b) Contra flujo, (c) Flujo cruzado, [10]

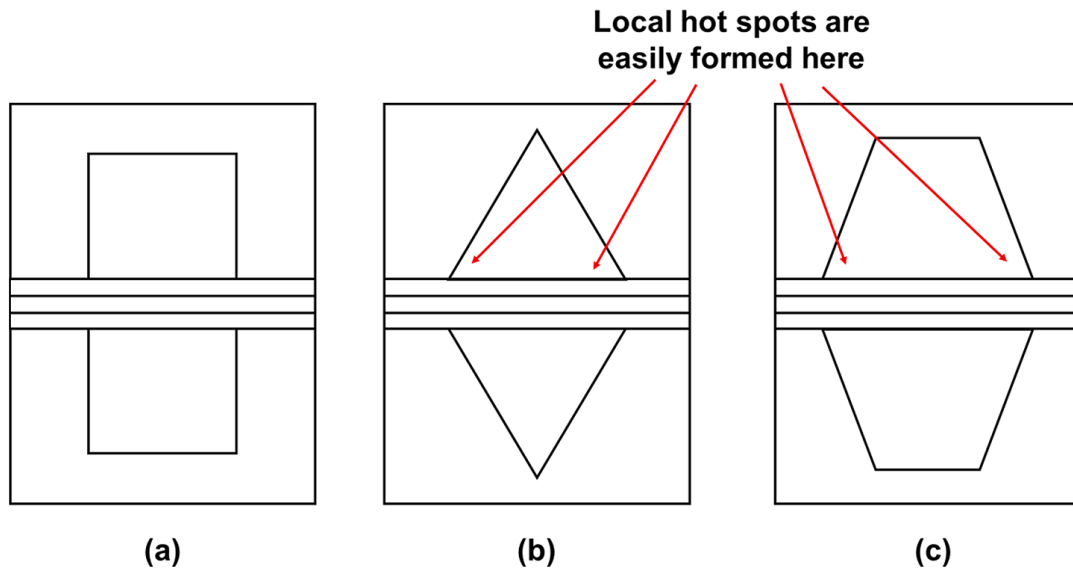


Figura 7. Esquema de (a) canales rectangulares, (b) canales triangulares y (c) canales trapezoidales para una celda SOFC tipo plana [10].

Por otro lado, Salimi et. al. [17], en su review sobre energía y exergía en celdas de combustible, revisión exhaustiva de los métodos de transferencia de calor y gestión térmica utilizados para reducir los gradientes de temperatura en las pilas de celdas de combustible de óxido sólido (SOFC). Se discuten diversos mecanismos de transferencia de calor, como la radiación, la convección y la conducción, y se evalúa su impacto en la distribución de temperatura dentro de las celdas. Además, se analizan múltiples estrategias para gestionar el calor, incluyendo el diseño de canales de gas, arreglos de flujo, integración de tubos de calor en los interconectores y la modificación de las composiciones del combustible. El objetivo principal es lograr una distribución de temperatura más uniforme dentro de las celdas, ya que las diferencias térmicas pueden inducir tensiones mecánicas y fallos estructurales, como delaminaciones y grietas en el electrolito y los electrodos. En cuanto a la influencia de la forma de los canales de distribución en la homogeneidad de la temperatura, el estudio destaca que el diseño geométrico de los canales de gas tiene un impacto significativo en la uniformidad de la distribución térmica dentro de las SOFC (ver Figura 8). Se encontró que los canales rectangulares son más efectivos para reducir los gradientes de temperatura en comparación con los canales triangulares o trapezoidales, debido a su mayor coeficiente de transferencia de calor por convección.

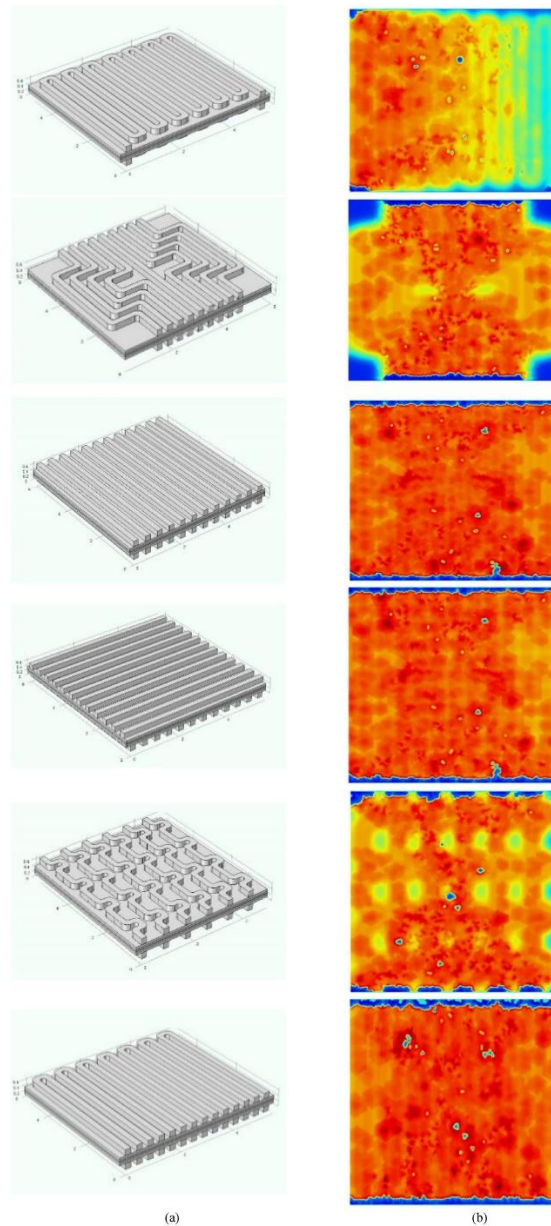


Figura 8. Comparación de la forma de los canales de distribución de gases y su impacto en la distribución de temperaturas para una celda PEMFC [17].

Dentro de los estudios sobre modelación numérica de celdas de tipo SOFC, Bingyao et al. [18] investigaron el rendimiento de las SOFC utilizando un diseño de interconector de doble capa. Mediante simulaciones en COMSOL Multiphysics, analizando cómo los cambios en la estructura de los canales de flujo y otros parámetros afectaban la densidad de corriente, la distribución de temperatura y los reactivos en el electrodo poroso. La difusión de las especies, se simuló utilizando un modelo basado en la Ley de Fick.

Así también, Woo et al. [19] evaluaron el desempeño de una pila SOFC a escala comercial, utilizando un modelo tridimensional en ANSYS Fluent. En este estudio se analizaron los efectos de la utilización de combustible y la densidad de corriente operativa sobre el voltaje de las celdas y la distribución de

temperatura. Se encontró que una alta utilización de combustible disminuye el voltaje debido al aumento en la generación de calor y al agotamiento de los reactivos.

Wang et al. [20] también utilizaron COMSOL Multiphysics para analizar el comportamiento térmico de una celda SOFC plana, evaluando el impacto de la velocidad del combustible, del oxidante, la temperatura de entrada y el voltaje operativo. Los resultados demostraron que un aumento en la velocidad del oxidante reduce el gradiente térmico en un 16,59%.

Por su parte, Ren et al. [11] estudiaron cómo los parámetros operativos y la estructura de las celdas SOFC afectan las distribuciones de temperatura y tensiones térmicas durante el reformado interno directo (DIR) de hidrocarburos. Utilizando un modelo bidimensional axisimétrico, concluyeron que un aumento en la relación vapor-carbono y en el voltaje operativo incrementa las tensiones térmicas, lo cual incrementa el riesgo de fallo en la capa del electrolito. Sin embargo, el uso de una capa de soporte metálico (MS-SOFC) permitió una mejor distribución térmica, reduciendo significativamente las tensiones.

En un enfoque relacionado, Ceballos et al. [21] analizaron el impacto de diferentes modelos de difusión efectiva y parámetros de tortuosidad en las curvas de polarización de una celda de combustible de membrana de intercambio protónico (PEMFC). Se utilizó un modelo 3D no isotérmico y multifásico, resolviendo las ecuaciones de conservación de masa, momentum, transporte de especies, agua líquida y energía con el software OpenFOAM. Los resultados subrayaron la importancia de la elección del modelo de difusión adecuado, destacando el impacto de la tortuosidad en el rendimiento de las celdas.

Krastev et al. [22] investigaron el impacto de las mezclas de combustible en el rendimiento de las SOFC de alta temperatura mediante un modelo numérico en ANSYS Fluent. Se utilizó el modelo de Bosanquet para la difusión, considerando la porosidad y tortuosidad del medio poroso. Simularon una celda plana con 30 canales de distribución y encontraron que la composición del gas tiene un impacto significativo en el rendimiento de la celda.

En el campo de las celdas de combustible de óxido sólido (SOFC) para aplicaciones vehiculares, diversos estudios han contribuido al desarrollo y mejora de estas tecnologías a través del uso de modelos numéricos y simulaciones. Tsung et al. [23] llevaron a cabo un estudio sobre una celda SOFC plana con disposición de co-flujo y reformado de vapor. Los autores utilizaron el método de volúmenes finitos (FVM) para modelar el perfil térmico y el método de elementos finitos (FEM) para analizar los esfuerzos térmicos en la celda, utilizando ANSYS para la resolución. Los resultados demostraron que una simplificación de temperatura uniforme reduce un 28% las predicciones de los esfuerzos térmicos, lo cual subraya la importancia de modelar los gradientes de temperatura.

Por último, Al-Masri et al. [12] desarrollaron un diseño innovador de celda SOFC con soporte metálico para aplicaciones como unidades de potencia auxiliar (APU) en vehículos pesados. Utilizaron un modelo multifísico tridimensional para evaluar el comportamiento termo-mecánico de la celda, combinando simulaciones CFD y FEM. Los resultados demostraron que la región de entrada de los gases es crítica debido a los altos esfuerzos y deformaciones inducidos. Además, el diseño de

la celda con soporte metálico mostró ser adecuado para garantizar la estabilidad y durabilidad del stack.

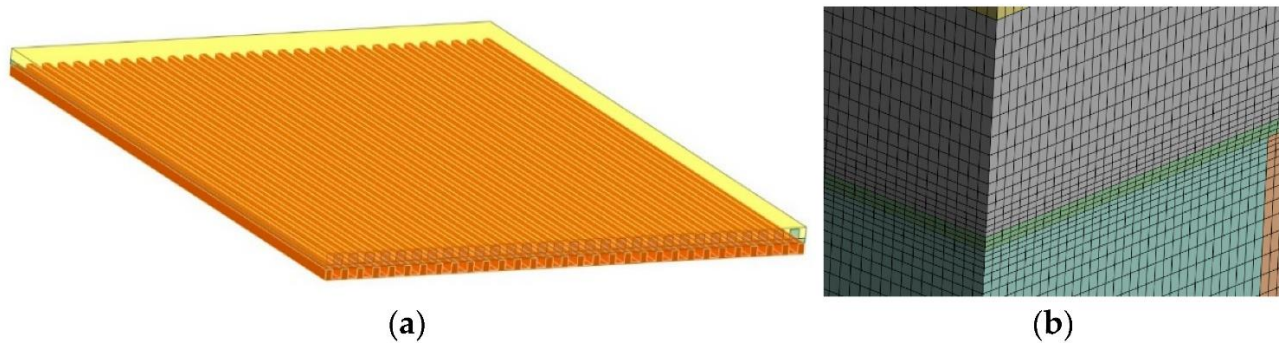


Figura 9. (a) Modelo tridimensional de la celda. (b) Fragmento del mallado realizado con un método de condensación en ANSYS. [22]

Con respecto a los flujos, Neri et al. [24], en su estudio, realizaron experimentos en una celda con un área de cátodo de 16 cm^2 , utilizando un flujo de hidrógeno a baja tasa de $6.25 [\text{Ncm}^3 \text{ min}^{-1} \text{ cm}^{-2}]$ y un exceso de aire de $93.75 [\text{Ncm}^3 \text{ min}^{-1} \text{ cm}^{-2}]$. Los resultados mostraron que, a pesar de las bajas tasas de flujo, se logró una alta utilización del hidrógeno (81% al 21% de H_2), evidenciando un control efectivo de la difusión interna. Destacaron la importancia de mantener flujos bajos, recomendando tasas entre 5 y 10 $[\text{Ncm}^3 \text{ min}^{-1} \text{ cm}^{-2}]$ para el hidrógeno y entre 30 y 100 $[\text{Ncm}^3 \text{ min}^{-1} \text{ cm}^{-2}]$ para el aire. Las bajas tasas de flujo ayudan a prevenir la recirculación de gases, maximizando la conversión del hidrógeno y minimizando el estrés térmico en la celda, lo cual podría reducir su degradación.

Finalmente, se destaca la tesis de Ghorbani [25], en la cual se desarrolló un modelo tridimensional (3D) en ANSYS Fluent para simular el comportamiento de una celda SOFC de alta temperatura soportada en ánodo. El enfoque utiliza el módulo "*SOFC with Unresolved Electrolyte*", que simplifica las reacciones electroquímicas modelándolas como un salto de voltaje en la superficie del electrolito. Este modelo permite evaluar la distribución de corriente, temperatura y especies bajo condiciones operativas específicas. Los resultados fueron validados frente a estudios experimentales y numéricos existentes, mostrando una buena correlación, particularmente en curvas de polarización y distribución de reactantes.

1.2.3 Modelación de la microestructura de una celda

En cuanto a estudios que analicen la microestructura de las capas, Zhang et. al. [26] analizaron la influencia de la microestructura del ánodo en la eficiencia del transporte de gases y el desempeño electroquímico de celdas SOFC mediante experimentos y modelado computacional con OpenFOAM. Compararon dos materiales para el ánodo (CP1: 60:40 NiO-YSZ y CP2: 40:60 NiO-YSZ) y utilizaron modelos de difusión Fickiana y Maxwell-Stefan, obteniéndose valores de porosidad y tortuosidad de 0.403/0.355 y entre 1.3 y 2.44, respectivamente las muestras CP1 y CP2, utilizando para el cálculo de la tortuosidad varios modelos, incluyendo Bruggeman y Voxel. Concluyeron que los enfoques tradicionales de porosidad-tortuosidad, como el modelo de Bruggeman, pueden ser imprecisos para ciertas microestructuras, destacando la importancia de métodos detallados como simulaciones CFD y análisis 3D para obtener resultados confiables.

Reza et. al. [27] modelaron una celda SOFC tubular soportada por ánodo, abordando múltiples factores microestructurales como tortuosidad, porosidad, tamaño de grano, tamaño de poros y grosor del electrolito, caracterizados mediante microscopía electrónica (SEM). Usaron un análisis termodinámico completo con ecuaciones fundamentales, difusión de Fick y Knudsen, y la ecuación de Bosanquet. Se aplicó el modelo de Bruggeman para evaluar la tortuosidad y se simuló el rendimiento electroquímico considerando pérdidas por activación, óhmicas y másicas, obteniendo curvas de polarización. Los autores identificaron que un radio de poro de 1.75 μm y una porosidad del 39%-43% optimizan el rendimiento, con un modelo que mostró una precisión del 97% al comparar con datos experimentales.

Finalmente, Reiss et al. [28] estudiaron el impacto de la microestructura en los soportes metálicos de celdas SOFC, analizando cómo la porosidad afecta las propiedades de transporte térmico y masivo. En su trabajo, destacaron que las primeras capas del soporte, cercanas al canal de gas (primeros 100 micrómetros), presentan una porosidad más baja, lo que incrementa la capacidad de conducción térmica en comparación con las regiones más porosas hacia el interior. Sin embargo, también señalaron que un aumento en la porosidad reduce la conductividad térmica efectiva del material, debido a la menor proporción de material sólido disponible para el transporte de calor. Estas diferencias microestructurales generan anisotropías térmicas en el soporte, afectando la uniformidad térmica y la eficiencia en la redistribución de calor dentro de la celda, lo que podría influir directamente en el rendimiento electroquímico y la estabilidad térmica del sistema.

1.3 Hipótesis

Existe una configuración de materiales para una celda SOFC tipo plana con soporte metálico que permite un adecuado transporte de especies a través de los materiales porosos y una buena distribución del calor a través de las capas, minimizando con ello el gradiente térmico al interior de una celda

1.4 Objetivo General

Determinar/Identificar las condiciones adecuadas de porosidad de los soportes, que permita mantener el gradiente térmico en el ánodo y cátodo bajo los 10 $^{\circ}\text{C}/\text{cm}$ en una celda de combustible de tipo SOFC con soporte metálico.

1.5 Objetivos Específicos

- 1) Definir/caracterizar geometría, materiales y condiciones de operación.
- 2) Implementar un modelo computacional para un canal de una celda SOFC de tipo plano con soporte metálico.
- 3) Identificar la configuración que permite minimizar el gradiente térmico maximizando la potencia generada.

1.6 Metodología

Actividad 1: Revisión bibliográfica (OE1 y OE2)

Se realizará una revisión de la literatura con respecto a celdas SOFC de tipo plana, geometrías, distribución de canales y gases, materiales utilizados para su construcción, así como las condiciones de operación más utilizadas. Se busca levantar información acerca de cómo se desempeña la celda

con las distintas configuraciones estudiadas en la literatura. También se debe realizar una revisión bibliográfica sobre celdas SOFC de tipo plano con soporte metálico, levantando información acerca de las ventajas de usar este tipo de celdas, así como también sobre el efecto de la microestructura en el desempeño térmico y electroquímico de las celdas, así como también sobre modelación numérica de las celdas.

Actividad 2: Definir la geometría a utilizar (OE1)

Con la información levantada, se realizará un cuadro resumen de las principales geometrías utilizadas, así como las distintas distribuciones de canales y de gases utilizadas, junto con el desempeño de la celda en cada configuración. Finalmente se escogerá una configuración geométrica en base a lo estudiado, junto con la distribución de canales a utilizar.

Actividad 3: Definir y caracterizar los materiales a utilizar (OE1)

Con la información levantada, se compararán los materiales utilizados en la literatura para todos los componentes de una celda: Interconector, Ánodo, Cátodo, Electrolito y Soporte metálico, considerando ventajas, desventajas y usos. Finalmente se escogerá el material en función de sus ventajas y frecuencia de uso en los estudios revisados.

Actividad 4: Definir las condiciones de operación (OE1)

Definir en base a la revisión bibliográfica las condiciones de operación de la celda, incluyendo temperatura de operación, combustible utilizado, composición del aire, presión de entrada de los gases, así como también definir las condiciones de borde del problema, así como también el caso de estudio.

Actividad 5: Describir el modelo computacional a utilizar (OE2)

Una vez revisada la literatura, se deberá exponer el modelo en Fluent utilizado, describiendo los fenómenos físicos que rigen el funcionamiento de la celda, así como también las ecuaciones que utiliza Fluent, y en específico el Módulo *SOFC With Unresolved Electrolyte* para modelar dicho comportamiento. Posteriormente se definirán las condiciones de borde impuestas al modelo y los criterios de convergencia, así como las variables a monitorear durante la simulación.

Actividad 5: Mallado de la geometría (OE2)

Se construirá el modelo geométrico en archivos .iam y .step. el modelo se construirá simplificando la geometría real, simplificando y aplicando simetrías con el fin de disminuir la cantidad de elementos en el futuro modelo computacional.

Una vez definida la geometría y construido el formato .step, se realizará el mallado de la geometría, refinando en primera instancia las capas según lo revisado en trabajos anteriores. Posteriormente se realizará una comparación de mallas, simulando mallas con distinto nivel de refinamiento, para posteriormente hacer la prueba de independencia del mallado, monitoreando a la densidad de corriente

en el colector. Una vez definido el mallado con el menor número de elementos para el cual los resultados no varían, se procederá con las simulaciones.

Actividad 6: Simulación (OE2)

Se simularán en ANSYS Fluent todos los casos establecidos previamente. Se procederá a simular para cada porosidad, utilizando como input la convergencia a distintos voltajes, en un rango que va desde el Voltaje de circuito abierto (V_{oc}) hasta 0.1 [V] o el menor voltaje para el cual la simulación converge sin problemas. Lo anterior con el objetivo de construir las curvas de polarización del canal simulado para las distintas porosidades de los soportes.

Una vez construida la curva de polarización, se buscará el voltaje para el cual todas las curvas de potencia se maximizan y por ende, la celda funciona de manera más eficiente. Identificado esto, se procederá al análisis, comparando los distintos resultados para distintas porosidades y un mismo voltaje.

Actividad 7: Análisis de resultados (OE3)

Una vez obtenido los resultados para comparar, mediante la herramienta de postprocesado de Fluent, se exportarán mapas de temperatura y concentración de reactantes en las distintas interfaces y/o planos de corte necesarios para observar cómo varía la temperatura en las distintas partes de la celda, poniendo énfasis en los electrodos, así como también, observando como varía la difusión de especies a través de las distintas capas porosas.

Se exportarán también datos nodales de temperaturas y concentración de reactantes para la construcción de gráficos en Python, permitiendo así calcular los gradientes térmicos, así como también generar curvas que muestren el comportamiento de variables como el gradiente térmico y la concentración de especies en función de la porosidad de los soportes.

Una vez determinados los gradientes y los gráficos se analizarán para estudiar el comportamiento de la celda al variar la porosidad de los soportes y poder identificar la configuración en donde se maximice la potencia generada sin comprometer la integridad estructural de los componentes.

CAPÍTULO 2: Marco Teórico

2.1 Celdas de combustible

Una celda de combustible es un dispositivo electroquímico, el cual es capaz de convertir energía química en energía eléctrica mediante una reacción de tipo REDOX (Reducción-oxidación), a partir de un input de hidrógeno (Combustible) y aire (Gas oxidante)

Se componen básicamente de dos electrodos (Ánodo y cátodo) separados por un electrolito. el funcionamiento de la celda radica en el movimiento de electrones producto de las reacciones de oxidación y reducción que se producen en los electrodos. En una celda típica, el combustible se introduce por el ánodo (Cargado negativamente), mientras que el oxidante o el aire, se introducen por el cátodo (Cargado positivamente).

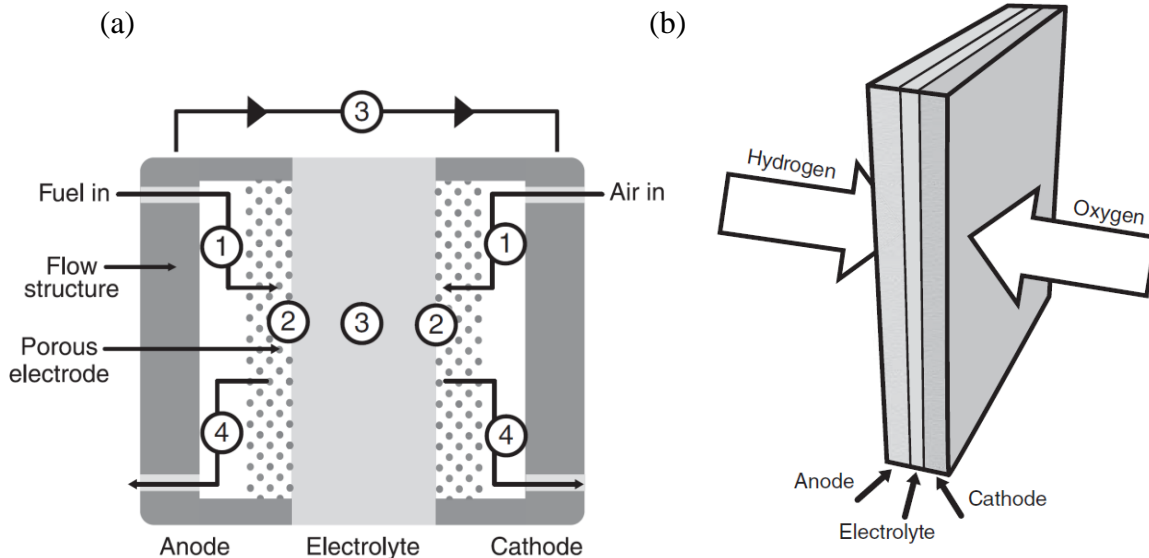


Figura 10.(a): Vista seccional de una celda de combustible plana. (b): Estructura Ánodo-Electrolito-Cátodo simplificada de una celda de combustible plana. [9]

En la Figura 10.(a) se puede un esquema con la vista seccional de una celda. En (1) se observan las entradas de combustible y oxidantes, que este caso es aire. En (2), se indica la interfaz entre electrolito y electrodos, que es donde ocurren las reacciones REDOX, llamado TPB (En la sección 2.3 se describirá esto con más detalle). En (3) se indica el transporte de iones o protones en el electrolito, y de electrones en el conductor, ubicado en la parte superior del esquema. Finalmente, en (4), se indica la salida de gases de la celda, los cuales corresponden a gases no consumidos y/o vapor de agua.

Dependiendo del tipo de celda, a través del electrolito se moverán iones o protones, mientras que, por un conductor paralelo al electrolito, el cual es un aislante electrónico, circularán los electrones, creando un flujo de corriente y una diferencia de voltaje, lo que se traduce en energía eléctrica utilizable.

A continuación, se presenta una tabla con los principales tipos de celdas de combustible junto con sus principales usos, ventajas y desventajas:

Tabla 2-1. Comparación de celdas de combustible. [15]

	PEMFC	DMFC	AFC	PAFC	MCFC	SOFC
Abreviación	Proton Exchange membrane fuel cell	Direct Methanol Fuel Cell	Alcaline Fuel Cell	Phosphoric Acid Fuel Cell	Molten Carbonate Fuel Cell	Solid Oxide Fuel Cell
Aplicaciones	Automóviles y energía estacionaria	Energía portátil	Vehículos espaciales y agua potable	Energía estacionaria	Energía estacionaria	Energía auxiliar en vehículos
Electrolito	Polímero	Polímero	Hidróxido de Potasio (KOH)	Ácido fosfórico	Carbonato fundido	Circonia estabilizada con itria (YSZ)
Rango de temperatura de funcionamiento	50–100 °C	0–60 °C	50–200 °C	150–200°C	600–700 °C	700–1000°C
Portador de carga	H ⁺	H ⁺	OH ⁻	H ⁺	CO ₃ ⁼	O ⁼
Combustibles primarios	H ₂	Metanol	H ₂	H ₂	H ₂ , CO, CH ₄	H ₂ , CO
Tiempo de inicio	Segundos-minutos	Segundos-minutos	-	Horas	Horas	Horas
Densidad de potencia [kW/m²]	3.8-6.5	~0.6	~1	0.8-0.9	1.5-2.6	0.1-1.5
Eficiencia	50–60%	30–40%	50-60%	55%	55-65%	55-65%

Las celdas de combustible de óxido sólido, *Solid Oxide Fuel Cell* (SOFC), emplean una membrana de material cerámico como electrolito.

Operan a altas temperaturas (Sobre los 600 °C), facilitando así la reacción electroquímica que debe llevarse a cabo en la celda, evitando el uso de catalizadores de metales preciosos, como el platino, los cuales poseen un alto costo. Como se menciona en la tabla anterior, son atractivas para utilizar en aplicaciones de generación de energía estacionaria. Esto se debe principalmente a su alta eficiencia y flexibilidad en el combustible a utilizar [9]. Como desventaja y el por qué para uso estacionario, está su tiempo de inicio, el cual es elevado para aplicaciones en donde se requieran encendidos y apagados más rápidos, debido a la necesidad de elevar la temperatura hasta la temperatura de operación deseada. Esto también suma que se tenga que contar con equipos de acondicionamiento de ambientes para mantener las condiciones de operación requeridas por estas celdas.

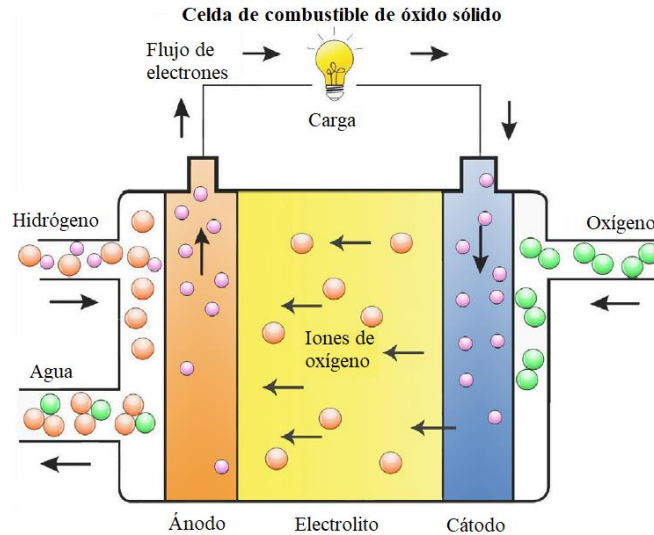


Figura 11. Esquema de funcionamiento de una celda de tipo SOFC. [15]

Las celdas SOFC se construyen de varias formas, variando el espesor de las distintas capas. Generalmente se usa uno de los componentes con un espesor considerablemente mayor al resto de componentes, el cual es el que le da estabilidad mecánica al ensamble y es llamado soporte. Las celdas pueden ser clasificadas en: SOFC con soporte de ánodo (AS-SOFC), soporte de cátodo (CS-SOFC), soporte de electrolito (ES-SOFC).

Una de las limitaciones compartidas por estas configuraciones es su baja resistencia mecánica, ya que los materiales utilizados son cerámicos o cermet, los cuales son frágiles y costosos [8]. Además, un desafío importante que afecta su eficiencia es el tiempo prolongado que requieren para iniciar su funcionamiento. Como alternativa, las SOFC con soporte metálico (MS-SOFC), han ganado popularidad en los últimos años debido a su menor costo, mayor tolerancia a los ciclos térmicos, resistencia mecánica superior y capacidad para arrancar rápidamente.

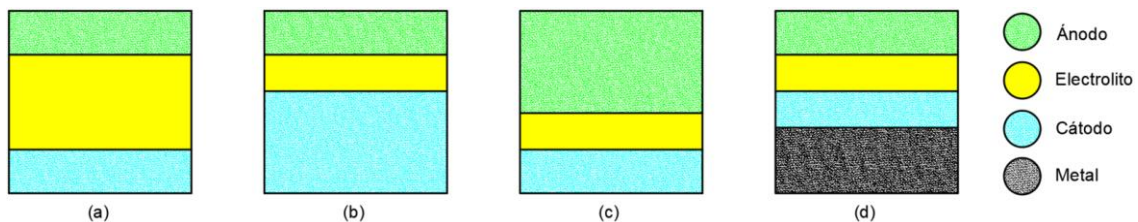


Figura 12. Esquema de la composición de las diferentes configuraciones para celdas SOFC [15]. (a) ES-SOFC, (b) CS-SOFC, (c) AS-SOFC y (d) MS-SOFC.

2.2 Materiales utilizados en celdas SOFC

En una celda de combustible de óxido sólido (SOFC), cada componente tiene requerimientos específicos para garantizar su rendimiento y estabilidad. El ánodo debe ser un buen conductor de electrones, poroso para permitir el paso del gas reactivo, y tener una alta actividad catalítica para la oxidación del combustible. Además, debe contar con coeficientes de expansión térmica similares a los de los demás componentes y ofrecer una amplia triple frontera de fase para facilitar las reacciones

electroquímicas. Por otro lado, el cátodo también debe ser poroso, con alta conductividad eléctrica y estabilidad en medios oxidantes, además de ser compatible químicamente con el electrolito. Al igual que el ánodo, debe tener una triple frontera de fase amplia y coeficientes de expansión térmica compatibles.

El electrolito, a diferencia de los electrodos, debe ser un material no poroso para asegurar la separación de las semirreacciones de oxidación y reducción, permitiendo el transporte de iones de oxígeno entre el ánodo y el cátodo. Los materiales empleados para el electrolito deben ser conductores iónicos, aislantes electrónicos y químicamente estables tanto a altas temperaturas como en ambientes oxidantes y reductores. También es crucial que sean inertes frente a los gases y tengan una expansión térmica compatible con los electrodos para garantizar una operación confiable y eficiente de la celda SOFC.

En cuanto al material para el soporte metálico, debe cumplir con varios requisitos fundamentales para asegurar la integridad estructural y el rendimiento eficiente de la celda. Debe ser mecánicamente resistente para soportar los diferentes componentes de la celda y poseer una alta conductividad térmica para facilitar la distribución uniforme del calor generado durante el funcionamiento. Además, el material del soporte debe ser químicamente compatible con los otros componentes y tener una expansión térmica similar a la del electrolito y los electrodos, evitando así la generación de tensiones internas que puedan causar fallos estructurales. La porosidad controlada del soporte también es importante para permitir el paso de los gases reactivos sin comprometer su resistencia mecánica.

2.3 Electroquímica

Como se mencionó anteriormente, el funcionamiento de una celda de combustible consiste en una reacción de tipo REDOX.

Una reacción REDOX (abreviatura de reducción-oxidación) es un proceso químico en el que ocurre una transferencia de electrones entre dos especies. En una reacción REDOX, una especie se oxida (pierde electrones) y otra se reduce (gana electrones), lo que permite la generación de una corriente eléctrica en sistemas electroquímicos.

Las reacciones en las celdas SOFC, incluyendo difusión, la adsorción, la conducción electrónica, la transferencia de carga y la conducción iónica ocurren en la Frontera de triple fase (TPB por sus siglas en inglés), la cual, corresponde a la región donde tres fases diferentes (gas, electrodo sólido y electrolito) se encuentran simultáneamente.

Esta región es crítica para maximizar la eficiencia de las celdas de combustible, ya que un mayor número de sitios TPB puede aumentar la tasa de las reacciones electroquímicas y, por ende, la eficiencia del dispositivo [29].

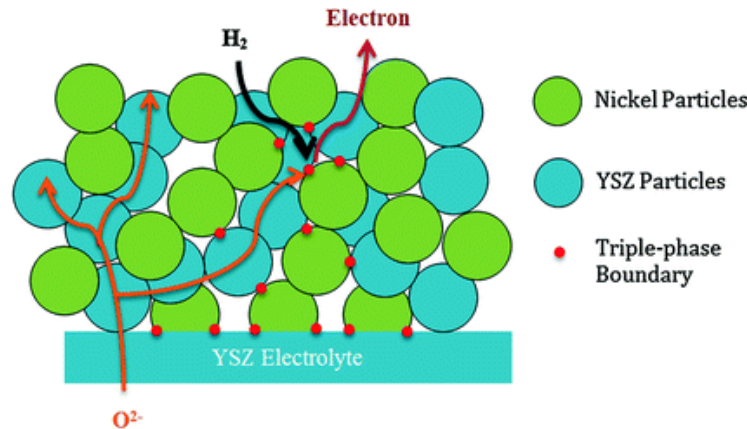


Figura 13. TPB para una interfaz de electrolito-ánodo en una celda SOFC. [30]

Oxidación del hidrógeno

Ocurre en el ánodo y es donde se produce la reacción principal de la celda, pues se reciben los iones de oxígeno, y se produce el agua.



Reducción del oxígeno

Ocurre en el cátodo.



Reacción General



2.3.1 Potencial eléctrico

La ecuación de Nernst permite calcular el potencial de un electrodo en una reacción REDOX en función de las concentraciones de los reactivos y productos, además de la temperatura. Esta ecuación ajusta el potencial estándar de electrodo para tener en cuenta las condiciones reales de concentración, lo que la hace útil para predecir el potencial de una celda electroquímica bajo condiciones no estándar.

Está determinada por la siguiente expresión:

$$E = E^0 - \frac{RT}{n_e F} \ln \frac{\prod_i [a_i]^{n_i}}{\prod_i [b_i]^{n_i}} \quad (4)$$

Donde E_0 es el potencial ideal, el cual para una celda SOFC corresponde a un valor aproximado de 1.23 [V], R es la constante de los gases ideales, T es la temperatura en [K], n_e el número de electrones, F la constante de Faraday y donde $[a_i]$ representa la concentración del producto a_i , $[b_i]$ representa la concentración del reactante b_i y n_i representa el coeficiente estequiométrico de cada uno de la especie i .

En una mezcla, la concentración de una especie, de acuerdo con la ley de los gases ideales, es proporcional a las presiones parciales de dichas especies, por lo que la ecuación (17), en el caso específico de las REDOX presente en la celda SOFC queda como:

$$E_{ideal} = E^0 - \frac{RT}{n_e F} \ln \left(\frac{p_{H_2} \cdot p_{O_2}^{1/2}}{p_{H_2O}} \right) \quad (5)$$

Donde p representa las presiones parciales de cada especie.

2.3.2 Pérdidas en celdas SOFC

Debido a las inevitables pérdidas que se presentan en las celdas de combustible durante su funcionamiento, causadas por factores como la operación, los materiales empleados y el diseño, el potencial eléctrico real es inferior al potencial ideal predicho por la ecuación de Nernst para SOFC. Esto significa que el rendimiento de la celda se ve afectado por dichas pérdidas, lo que provoca una reducción en el voltaje. Estas pérdidas, conocidas también como polarizaciones, se clasifican en tres tipos: polarización de activación η_{act} , polarización óhmica η_{ohm} y polarización por transporte de masa η_{conc} [9].

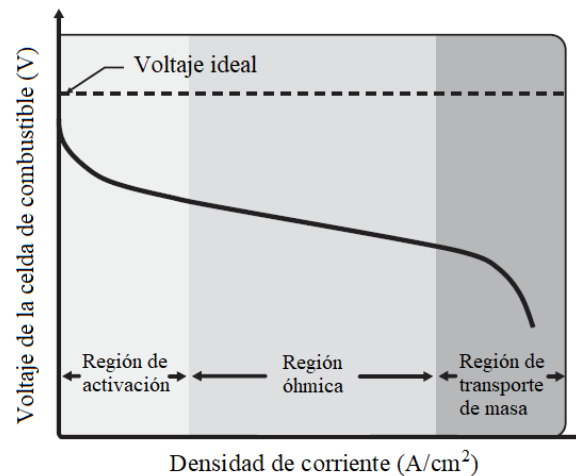


Figura 14. Curva de polarización de una celda de combustible. [9]

Así, el voltaje real de salida de la celda queda determinado por la siguiente expresión:

$$E = E_e - \eta_{act} - \eta_{ohm} - \eta_{conc} \quad (6)$$

Polarización de Activación η_{act}

Este tipo de polarización predomina cuando la densidad de corriente es baja y está relacionada con la lentitud de las reacciones electroquímicas que tienen lugar en el TPB. Representa el sobrepotencial de voltaje necesario para superar la energía de activación de la reacción electroquímica. En ANSYS Fluent, estas pérdidas son modeladas mediante la ecuación de Bulter-Volmer:

$$r = \frac{i_{0,eff}}{n_e F} (e^{\alpha_a \eta_{act} F / RT} - e^{-\alpha_c \eta_{act} F / RT}) \quad (7)$$

Donde r es la tasa de reacción de especies, $i_{0,eff}$ es la densidad de corriente ideal efectiva, α_a es un factor de simetría anódica, α_c el factor de simetría catódico, F la constante de Faraday, R la constante de gases ideales, T la temperatura y η_{act} el potencial de activación. La corriente ideal efectiva es calculada según:

$$i_{0,ref} = Ae^{-\frac{1}{BT}} \left(\frac{C_j}{C_{j,ref}} \right)^{\gamma_j} \quad (8)$$

Donde A y B son coeficientes de velocidad, C_j es la fracción molar de especies y γ_j es el exponente de concentración de especies, el cual indica como la densidad de corriente efectiva depende de la concentración de la especie j .

Polarización óhmica η_{ohm}

Estas pérdidas son debido a la resistencia que presentan los materiales al paso de iones o corriente. ANSYS Fluent modela estas pérdidas según la siguiente ecuación:

$$\eta_{ohm} = i \cdot \Omega \quad (9)$$

Donde i es la corriente eléctrica y Ω la resistencia eléctrica de la interfaz.

Polarización por transporte de masa η_{conc}

Estas pérdidas están asociadas a las pérdidas de carga en los gases. Debido a que ANSYS modela la celda asumiendo presión constante en los canales, como se detallará más adelante, estas pérdidas son despreciadas.

Resistencia Específica de Área (REA)

La resistencia específica de área (REA) es un parámetro que mide la resistencia total de un componente o una interfaz de una celda de combustible de óxido sólido (SOFC) al paso de corriente eléctrica por unidad de área activa. Se expresa en unidades de $[\Omega \cdot \text{cm}^2]$ y es crucial para evaluar el desempeño electroquímico de la celda. La REA incluye contribuciones de la resistencia óhmica, asociada al electrolito y los contactos eléctricos, así como de las resistencias no óhmicas, derivadas de las reacciones electroquímicas y la transferencia de masa en los electrodos.

El valor de la REA depende directamente del tipo de interfaz considerada, como el contacto entre el electrodo y el electrolito o entre el interconector y el electrodo, ya que cada una de estas interfaces presenta diferentes mecanismos de resistencia, como la formación de capas intermedias, el deterioro por oxidación o las barreras a la transferencia de carga, además de la microestructura física que limita la transferencia electrónica a los puntos de contacto. Un valor bajo de REA es esencial para optimizar la eficiencia de las SOFC, ya que reduce las pérdidas energéticas durante la operación.

2.4 Porosidad, tortuosidad y permeabilidad

Los materiales porosos son materiales sólidos que presentan pequeños “agujeros”, distribuidos por todo el dominio. Por estos poros, pueden transportarse fluidos, como en el caso de las celdas SOFC, en donde tanto el combustible y el aire se transportan hacia el TPB en el electrolito a través de los electrodos.

Estos materiales pueden ser caracterizados mediante su porosidad y tortuosidad.

La porosidad es una propiedad física de los materiales que se refiere al volumen de los poros o vacíos en un material en comparación con su volumen total. Se expresa generalmente como un porcentaje y se define mediante la siguiente ecuación:

$$\epsilon = \frac{V_p}{V_t} \cdot 100 \quad (10)$$

Donde ϵ es la porosidad, V_p es el volumen total de los poros y V_T es el volumen total del material.

La tortuosidad es una medida de la complejidad del camino que deben seguir los fluidos al moverse a través de un material poroso. Es un factor que determina la eficiencia del transporte de especies a través de la estructura porosa. Se define como la relación entre la longitud real del camino que sigue un fluido y la distancia directa a través del material. Un valor de tortuosidad mayor indica que el camino del fluido es más complejo y, por lo tanto, puede afectar negativamente la velocidad de difusión y el rendimiento global en una celda.

La tortuosidad se puede calcular mediante la siguiente fórmula:

$$\tau = \frac{L}{D} \quad (11)$$

Donde τ es la tortuosidad, L es el camino real recorrido a través de los poros y D es la distancia recta entre un punto y el otro.

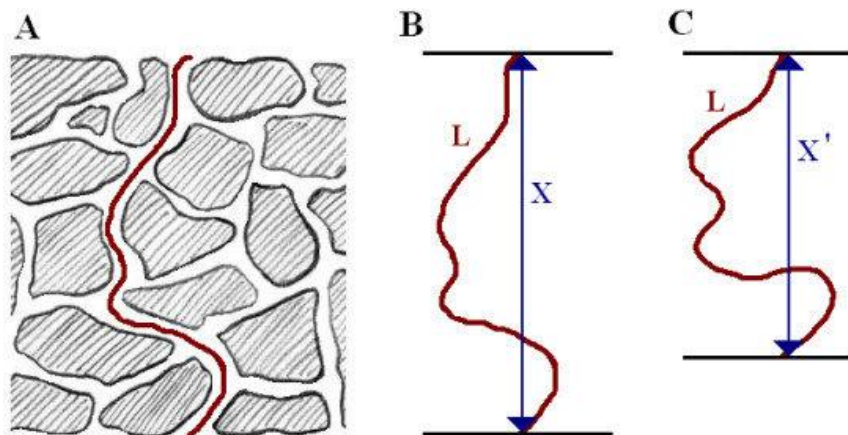


Figura 15. Diagrama del camino recorrido por una especie en el contexto de la definición de tortuosidad en materiales porosos [31].

En la Figura 15, se ilustra el concepto de tortuosidad. En (A), se ve un diagrama del material poroso y el camino recorrido por el fluido. En (B) y (C) se ilustran la relación matemática, destacando que mientras L se mantenga constante, si el espesor disminuye, la tortuosidad aumenta.

2.4.1 Modelo de Bruggeman

Existen varios modelos teóricos que relacionan la tortuosidad con la porosidad de los materiales. Dentro del universo de modelos, uno de los que es ampliamente utilizado y presente en la mayor parte de la literatura es el de Bruggeman

Este modelo establece que la tortuosidad es inversamente proporcional a la porosidad.

$$\tau = \left(\frac{1}{\epsilon}\right)^N \quad (12)$$

Donde N es un parámetro que depende de la geometría del material.

2.4.2 Permeabilidad

La permeabilidad de un material es una propiedad física que mide la capacidad de un medio poroso para permitir el paso de un fluido a través de sus poros bajo la acción de un gradiente de presión. Esta característica está influenciada principalmente por la estructura y distribución de los poros, así como por el tamaño y la forma de las partículas que componen el material. La permeabilidad se cuantifica comúnmente mediante la ley de Darcy, que establece que el flujo volumétrico de un fluido a través de un medio poroso es proporcional al gradiente de presión aplicado y a la permeabilidad del material.

Puede ser calculada mediante la ecuación de Kozeny-Carman, la cual entrega una permeabilidad en función de las características geométricas del material poroso. Esta ecuación, aplicada a poros esféricos en un material homogéneo, utilizando una constante de Kozeny-Carman $K_{ck} = 5$, la cual representa una buena aproximación a medios con poros esféricos [32], queda expresada por la siguiente expresión:

$$K = \frac{\epsilon^3}{180(1 - \epsilon)^2} d_p^2 \quad (13)$$

Donde d_p es el diámetro o tamaño del poro.

2.5 Mecánica de Fluidos

2.5.1 Reynolds

El Número de Reynolds permite discriminar si un fluido se mueve en régimen laminar ($Re < 2300$) o turbulento ($Re \geq 2300$). Se calcula como:

$$Re = \frac{\rho u D_h}{\mu} \quad (14)$$

Donde el diámetro ρ corresponde a la densidad, u la velocidad, D_h el diámetro hidráulico y μ a la viscosidad dinámica del fluido.

El diámetro hidráulico para un canal rectangular puede calculado como:

$$D_h = \frac{2ab}{a+b} \quad (15)$$

Donde a y b corresponden al ancho y alto del canal respectivamente.

2.5.2 Ecuación de continuidad

La ecuación de continuidad asegura que la masa se conserve en un flujo de fluido. Se expresa matemáticamente como:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = S_m \quad (16)$$

Donde t corresponde al tiempo, ρ corresponde a la densidad del fluido, \vec{u} la velocidad y S_m corresponde al término fuente de masa, el cual es igual a 0 en sistemas donde la masa se conserva.

2.5.3 Conservación de Momentum

Conocidas también como las ecuaciones de Navier-Stokes, describen cómo el movimiento de un fluido cambia en respuesta a fuerzas internas y externas. En su forma más simplificada para un flujo incompresible y viscoso, las ecuaciones se expresan como [33]:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{u}) + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \vec{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\vec{\tau}) + \rho \vec{g} + \vec{F} \quad (17)$$

Donde ρ corresponde a la densidad del fluido, \vec{u} la velocidad, τ es el tensor de esfuerzos viscosos, es \vec{g} la aceleración de gravedad y \vec{F} corresponde a la suma de fuerzas externas sobre el elemento de fluido. El tensor de esfuerzos viscosos queda determinado por:

$$\vec{\tau} = \mu \left[\left(\nabla \vec{u} + \nabla \vec{u}^T \right) - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{u} \mathbf{I} \right] \quad (18)$$

Donde μ es la viscosidad dinámica del fluido e \mathbf{I} la matriz identidad.

2.5.4 Conservación de la Energía

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \left(e + \frac{u^2}{2} \right) \right) + \nabla \cdot \left(\rho \vec{u} \left(h + \frac{u^2}{2} \right) \right) = \nabla \cdot \left(k_{eff} \nabla T - \sum_j h_j \vec{J}_j + \vec{\tau} \cdot \vec{u} \right) + S_h \quad (19)$$

Donde e corresponde a la energía total: Energía interna, cinética y potencial, ρ la densidad, k_{eff} es la conductividad efectiva, h_j es la entalpía y J_j es el flujo difusivo, descrito en la siguiente sección. S_h representa la generación de energía mediante fuentes externas, en este caso, las reacciones químicas y el calentamiento de Joule, la cual es calculada mediante las siguientes ecuaciones:

$$S_h = i^2 \Omega + \sum_j \dot{h}_j - i \Delta E \quad (20)$$

Donde i es la corriente eléctrica, Ω es la resistencia óhmica del material, \dot{h}_j es el flujo de entalpía de las especies y ΔE es la variación de Voltaje.

2.6 Transporte de masa y difusión de especies

La difusión de especies es un proceso esencial en la transferencia de masa que se refiere al movimiento de partículas dentro de un medio debido a diferencias de concentración. Este fenómeno es crucial para

comprender cómo se comportan las mezclas en fluidos, permitiendo la distribución uniforme de las especies a través del espacio en un sistema.

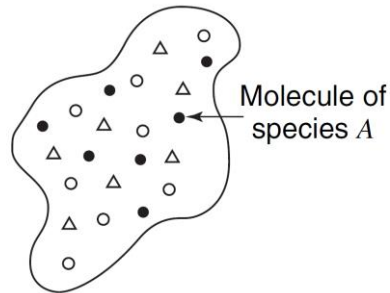


Figura 16. Volumen elemental que contiene una mezcla multicomponente (Especies A y B). [34]

2.6.1 Concentración Molar

La concentración molar de una sustancia en una mezcla, representada como C_i , es la cantidad de moles de esa sustancia por unidad de volumen. Esta medida indica la cantidad de partículas (moles) de una especie específica presentes en una región determinada del sistema y se define matemáticamente como:

$$C_i = \frac{n_i}{V} \quad (21)$$

Donde, n_i es el número de moles de la especie i y V es el volumen del sistema.

2.6.2 Gradiente de concentración

El gradiente de concentración ∇C , es la variación espacial de la concentración de una especie y es el principal impulsor de la difusión. Este gradiente se expresa como el cambio en la concentración con respecto a una coordenada espacial.

2.6.3 Ley de Fick

El flujo de especies es relevante en muchos problemas de transferencia de masa. Es una magnitud vectorial que representa la cantidad de masa o moles de una especie que se transporta por unidad de área y tiempo y depende del gradiente de concentración.

La Primera Ley de Fick establece que el flujo de difusión \vec{J}_i de una especie i es proporcional al gradiente de concentración de esa especie:

$$\vec{J}_i = -D_i \nabla C_i \quad (22)$$

Donde D_i corresponde al coeficiente de difusión de la especie i y ∇C_i corresponde al gradiente de concentración molar o másico, dependiendo del flujo que se busca. La negatividad del coeficiente indica que el flujo se da en la dirección opuesta al gradiente de concentración, es decir, de las zonas de mayor concentración hacia las de menor concentración.

2.6.4 Ecuación de Transporte de especies

La ecuación de transporte de especies para una celda de combustible, según Ceballos et. al, queda expresada por [21]:

$$\nabla \cdot (\rho \vec{u} C_i) = (\nabla \cdot \rho D_i^{eff} \nabla C_i) \quad (23)$$

Donde ρ es la densidad del fluido, C_i es la concentración de la especie i y D_i^{eff} es el coeficiente de difusión efectiva de la especie.

El coeficiente de Difusión efectiva corresponde al coeficiente de difusión que incluye la difusión pura (Ley de Fick), y la difusión Knudsen, que es un tipo específico de transporte de masa que ocurre cuando el tamaño de los poros de un material es comparable al camino libre medio de las moléculas que se mueven a través de estos poros.

Existen distintos modelos para calcular el coeficiente de difusión efectiva, pero para efectos de este trabajo se expondrá en modelo de Bosanquet, el cual es un modelo basado en los principios de la Ley de Fick

2.6.5 Modelo de Bosanquet

El modelo de Bosanquet permite describir con mayor precisión la difusión en medios porosos, especialmente en las celdas SOFC donde los electrodos y otros componentes tienen estructuras porosas significativas. Este modelo integra los efectos de la difusión molecular y la difusión de Knudsen de la siguiente manera [21]:

$$\frac{1}{D^{eff}} = \frac{1}{D^{eff}} + \frac{1}{D_k^{eff}} \quad (24)$$

Donde D^{eff} es el coeficiente de Difusión molecular efectivo, proveniente de la ley de Fick, y D_k es el coeficiente de difusión efectivo de Knudsen.

El coeficiente de difusión molecular efectivo se calcula como:

$$D^{eff} = \frac{\epsilon}{\tau} D \quad (25)$$

Donde ϵ es la porosidad del medio, τ es la tortuosidad del medio y D es el coeficiente de difusión molecular, determinado en condiciones de laboratorio o mediante aproximaciones teóricas.

El coeficiente de difusión molecular efectivo se calcula como:

$$D_k^{eff} = \frac{\epsilon}{\tau} D_k \quad (26)$$

Donde ϵ es la porosidad del medio, τ es la tortuosidad del medio y D_k es el coeficiente de difusión de Knudsen, el que depende del tamaño del poro y las propiedades del gas, y puede ser determinado en condiciones de laboratorio o mediante la siguiente aproximación.

$$D_k = \frac{2}{3} r_e \sqrt{\frac{8RT}{\pi(M_i + M_j)}} \quad (27)$$

Donde r_e es el radio efectivo del poro, R es la constante universal de gases, T la temperatura absoluta y M_i, M_j corresponden a los pesos moleculares de las especies en la mezcla.

2.7 Transferencia de Calor

La transferencia de calor es un proceso fundamental que describe cómo la energía térmica se mueve desde regiones de alta temperatura a regiones de baja temperatura. Los tres mecanismos principales que intervienen son la conducción, convección y radiación, cada uno desempeñando un papel clave en la distribución y disipación del calor en el sistema.

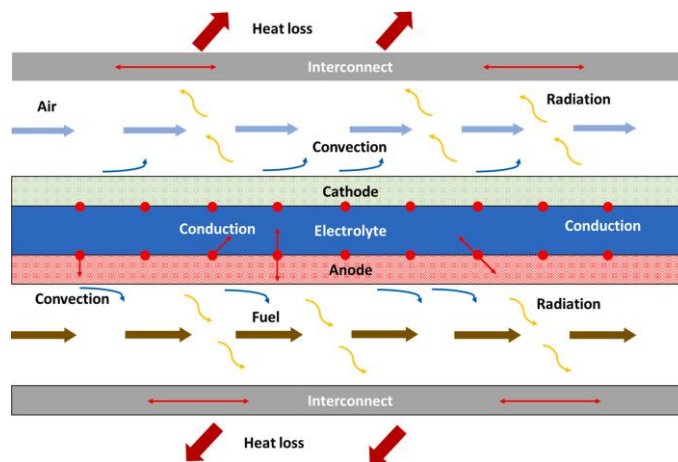


Figura 17. Esquema de los 3 mecanismos de transferencia de calor en una de celda SOFC de tipo plana [10]

2.7.1 Conducción

La conducción es el proceso de transferencia de calor a través de un material sólido debido a la interacción entre las moléculas o átomos del material. En las SOFC, la conducción térmica es relevante en los componentes sólidos como los electrodos y el electrolito, donde el calor se transfiere principalmente debido a las vibraciones moleculares y el movimiento de los electrones. La ecuación de Fourier para la conducción de calor es:

$$Q_k = -k_T \nabla T \quad (28)$$

Donde Q_k es el flujo de calor por conducción, k_T es la conductividad térmica del material y T es la temperatura.

2.7.2 Convección

La convección se refiere a la transferencia de calor debido al movimiento de un fluido, que puede ser un gas o un líquido. En las SOFC, la convección se produce principalmente en las corrientes de gas dentro de los canales de flujo y las capas porosas, donde los gases reactivos se mueven y transfieren calor hacia y desde las superficies de reacción. El flujo de calor por convección se describe mediante la siguiente ecuación:

$$Q_c = h_{cv}A(T_s - T_\infty) \quad (29)$$

Donde Q_c es el flujo de calor por convección, h_{cv} es el coeficiente de transferencia de calor por convección, A es el área de la superficie de transferencia, T_s es la temperatura de la superficie y T_∞ .

En cuanto a la radiación, esta no es modelada por el módulo de ANSYS Fluent *SOFC Cell with Unresolved Electrolyte*, ya que, frente a los otros mecanismos de transferencia de calor, esta no es dominante.

2.8 Caso de estudio

Basados en la revisión de literatura, la distribución de flujo que mejores resultados tiene es la distribución de flujo paralelo, por lo que estudiará sólo este caso, con el fin de ahorrar tiempo computacional.

Se modelará una celda tipo SOFC plana en régimen estacionario, con 16 canales rectos de 2 [mm] de ancho, 1 [mm] de altura [18] y una separación de 1 [mm] entre canales, basándose en lo discutido en la revisión bibliográfica sobre la geometría de los canales y su impacto en el gradiente térmico. Esta combinación tiene buenos resultados logrando una distribución de temperaturas más homogénea que otros casos (Figura 7 y Figura 8).

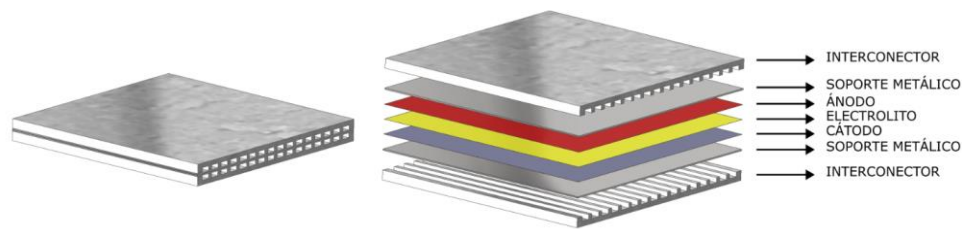


Figura 18. Esquema de la celda a estudiar.

Dada la simetría de la celda, debido a la repetición de canales con la misma forma, es que se decidió estudiar el comportamiento de un solo canal y extrapolar los resultados luego al resto de canales. A continuación, en la Figura 19 se detallan la forma y dimensiones del canal a simular.

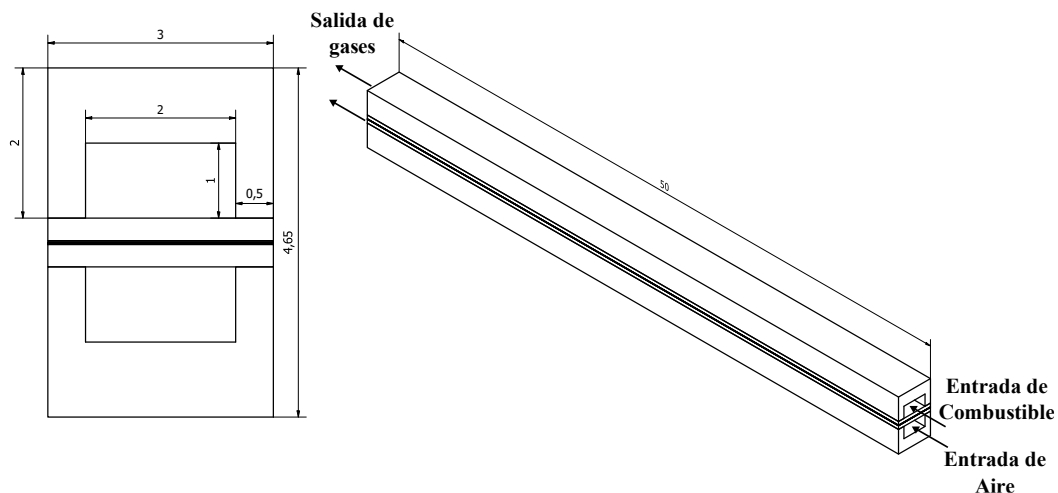


Figura 19. Dimensiones del canal estudiado

La temperatura de operación se fijó en 750 [°C] (1023 [K]).

En cuanto a los materiales, se revisaron varios tipos de materiales tanto para el ánodo, cátodo, electrolito, interconector y soporte metálico utilizados en la literatura existente, tomando los materiales y espesores para electrolito y electrodos del estudio hecho por Krastev et. al. [22].

A continuación, se presentan los materiales y espesores propuestos para el caso a estudiar.

Tabla 2-2. Espesores y materiales de las capas para la celda SOFC.

Componente	Espesor [mm]	Material	Tipo de Material
Soporte Metálico superior	0.3	AISI 430	Acero Ferrítico de alta temperatura
Ánodo	0.02	Ni-O+YSZ	Cermet
Electrolito	0.01	YSZ	Cerámico
Cátodo	0.02	LSCF+GDC	Cerámico
Soporte Metálico inferior	0.3	AISI 430	Acero Ferrítico de alta temperatura
Interconector	2	AISI 430	Acero Ferrítico de alta temperatura

El uso del AISI 430 se basó en su buen comportamiento como material estructural, además de comportarse bien a temperaturas de hasta 800 [°C] y su facilidad de manufacturar como material poroso con una porosidad definida mediante sinterización de polvo.

Una de las desventajas del acero AISI 430 es que en condiciones operativas a altas temperaturas (600-900 °C), sufre oxidación superficial debido al ambiente húmedo, formando una capa de Cr_2O_3 que actúa como una barrera eléctrica, aumentando la resistencia de las interconexiones [35]. Además, parte del cromo volatilizado puede migrar hacia las zonas cercanas al TPB afectando las reacciones electroquímicas y el transporte de gases hacia el electrolito.

Este problema puede ser solucionado en el caso de interconectores aplicando recubrimientos al acero de elementos como Cobalto [36] o Manganeseo [37], con los cuales se busca mejorar la resistencia eléctrica en el contacto y la conductividad eléctrica del acero, disminuyendo también la volatilización del cromo.

Para efectos de este trabajo, se utilizará Acero AISI 430 puro, sin recubrimientos, con el fin de simplificar la modelación del material, evitando tener que estratificar el sólido en distintas capas, además de no encontrar suficiente información sobre el comportamiento de la oxidación y volatilización del cromo dentro de los poros del material.

A continuación, se presentan las propiedades de los materiales:

Tabla 2-3. Propiedades de los materiales [22] y [38].

Material	Densidad	Calor Específico	Conductividad Térmica	Conductividad Eléctrica
	kg/m ³	J/(kgK)	W/(m K)	S/m
YSZ + NiO	5900	410	6.23	333330
LSCF + GDC	6180	600	9.6	7937
YSZ	5900	410	6.23	-
AISI 430	7750	460	25	1.67e+07

El régimen de flujo en los canales se modelará como laminar. Como combustible se utilizará hidrógeno húmedo y como oxidante aire. El detalle de las composiciones se encuentra más adelante, en el CAPÍTULO 3: Modelo computacional, en la sección 0 de condiciones de borde.

El objetivo de este trabajo es estudiar el comportamiento de la celda bajo distintas condiciones de porosidad en los soportes, por lo que se estudiarán distintos casos, con una porosidad fija en los electrodos y una porosidad variable en los soportes. A continuación, en la Tabla 2-4 se detallan las porosidades, tortuosidades, tamaño de poro y permeabilidad de los electrodos y los soportes para los distintos casos.

Tabla 2-4. Propiedades porosas de los materiales

	Porosidad	Diámetro de Poro [m]	Tortuosidad	Permeabilidad [m ²]	
Anodo	0.3	S/I	3	1,00e-12	
Cátodo	0.3	S/I	3	1,00e-12	
Soporte Metálico	Caso 1	0.2	2e-5	2.78e-14	
	Caso 2	0.3	2e-5	1.22e-13	
	Caso 3	0.4	2e-5	1.58	3.95e-13
	Caso 4	0.5	2e-5	1,41	1,11e-12
	Caso 5	0.6	2e-5	1,29	3,00e-12
	Caso 6	0.7	2e-5	1,12	8,47e-12
	Caso 7	0.8	2e-5	1,20	2.84e-11

La tortuosidad es calculada mediante la ecuación (12), utilizando un $N = 0.5$ [39] y la permeabilidad utilizando la ecuación (13). Para el ánodo y cátodo no se encontró información sobre el tamaño de poro utilizado en los materiales estudiados por [22].

Para cada caso, se simularán varios voltajes, obteniéndose la distribución de temperaturas en el ánodo y en todo el canal, además del consumo de especies a lo largo del canal y la corriente de salida de la celda. Así, para cada caso, se construirá la respectiva curva de polarización junto con la curva de potencia generada.

2.8.1 Obtención del gradiente térmico

Una vez determinada todas las curvas para cada caso, se procede a comparar la distribución de temperaturas para un voltaje en específico, buscando que sea un voltaje donde en la mayoría de los casos la celda opere bien.

Con el mapeo de temperaturas en la interfaz ánodo-electrolito y cátodo-electrolito, se procede a calcular el gradiente térmico para cada nodo de la siguiente forma:

$$\chi = \frac{\Delta T}{d} \quad (30)$$

En donde χ representa el gradiente térmico, ΔT la diferencia de temperatura entre el nodo en cuestión y su nodo vecino, mientras que d es la distancia entre el nodo y el nodo vecino.

CAPÍTULO 3: Modelo computacional

3.1 Modelo en Fluent

Para simular, se utilizará el software ANSYS Fluent 2023 R2, el cual dispone de un módulo llamado “*SOFC With Unresolved Electrolyte*”, en el cual se puede simular una celda de tipo SOFC, incluyendo la porosidad y tortuosidad de los materiales.

ANSYS Fluent resuelve las ecuaciones de continuidad, momentum, energía y especies contempladas en los subcapítulos 2.5 y 2.6. Para la difusión de especies, ANSYS utiliza un modelo basado en la Ley de Fick, modelando la transferencia de energía, masa y momentum según las ecuaciones descritas en la sección 2.5 además de la difusión de especies basándose en las ecuaciones descritas en la sección 2.6, junto con la electroquímica descrita según las ecuaciones presentadas en la sección 2.3.

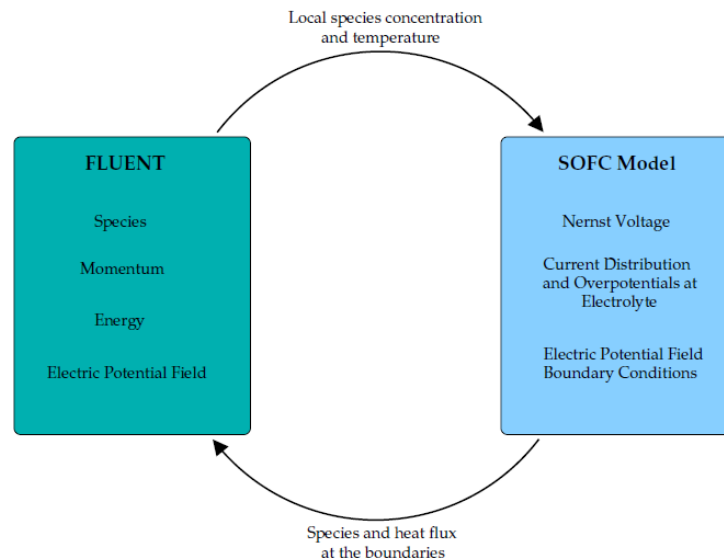


Figura 20. Funcionamiento del modelo SOFC con electrolitos no resueltos en Ansys Fluent. [40]

3.1.1 Simplificaciones

El modelo de celda de combustible de óxido sólido (SOFC) con electrolito no resuelto en Ansys Fluent se centra en la simulación de la interacción entre el ánodo, el cátodo y el electrolito, aunque éste último no se incluye explícitamente en el dominio computacional. En su lugar, el electrolito se modela como una interfaz entre el ánodo y el cátodo que permiten el acoplamiento de reacciones electroquímicas con el transporte de masa y energía, facilitando el análisis de la conductividad eléctrica y térmica en toda la celda. Este enfoque permite que las tasas de reacción y las fuentes de energía se integren en las celdas computacionales adyacentes.

Las simplificaciones que realiza el módulo de ANSYS son las siguientes:

- El electrolito se trata como una barrera ideal delgada.
- Reacciones electroquímicas idealizadas puesto que se usan aproximaciones macroscópicas para las reacciones electroquímicas.
- El flujo de gases en los electrodos se simplifica usando modelos de transporte en medios porosos.
- La transferencia de calor a través del electrolito no se resuelve en detalle.
- El transporte de iones en el electrolito se trata de manera macroscópica.
- Los componentes de la celda se modelan de manera simplificada, sin detalles microestructurales.
- La radiación térmica no será modelada.

Además, el caso de estudio presenta las siguientes simplificaciones:

Microestructura de los soportes: En los soportes, la microestructura utilizada es una aproximación, lo que implica que, en la realidad, la distribución de poros y su tamaño no son homogéneos. Esta variabilidad puede generar discrepancias en las propiedades de transporte, como la permeabilidad, que podría no ser representativa de las condiciones reales. Aunque el modelo considera un enfoque simplificado, se reconoce que estas irregularidades microestructurales pueden influir significativamente en el comportamiento del soporte bajo condiciones operativas reales.

Difusión de Knudsen: La difusión de Knudsen será despreciada en este estudio. Esto se debe a que el objetivo principal es analizar cómo la porosidad del soporte impacta en el rendimiento y el gradiente térmico de la celda. Los soportes suelen tener poros significativamente más grandes que los de los electrodos funcionales (en este caso, se asume un diámetro uniforme de 20 μm). Por lo tanto, se considera que el transporte gaseoso en el soporte está dominado por la difusión molecular. Esta simplificación es razonable, ya que en poros grandes la relevancia de la difusión de Knudsen disminuye, y la resistencia al transporte depende principalmente de la conectividad y la porosidad del soporte. Aunque la difusión de Knudsen es más relevante en los electrodos, en este trabajo se omite su consideración debido a la falta de datos precisos sobre el tamaño de los poros en estas zonas.

Resistencia específica de área (REA): Se asumirá un valor homogéneo para la resistencia específica de área en todas las interfaces e igual a 3,6 [$\mu\Omega \cdot \text{m}^2$] [37]. Esta simplificación se debe a la falta de caracterización precisa de la microestructura de los materiales, dado que el REA depende directamente de las propiedades específicas de cada interfaz.

Efectos del acero AISI 430: Como se mencionó en el capítulo anterior, el acero a altas temperatura presenta oxidación y volatilización de cromo. Para este trabajo, se despreciarán estos efectos y se considerará la conductividad eléctrica del AISI 430 puro, sin oxidación ni volatilización, con el objetivo de simplificar el modelo.

Dependencia de la Temperatura: Las propiedades de los materiales, como las conductividades térmicas y eléctricas, calor específico, densidad, así como también la microestructura, pueden variar con la temperatura. Para efectos de este trabajo se consideran todas estas propiedades constantes.

3.2 Mallado

El mallado fue realizado utilizando la herramienta *Meshing* de ANSYS 2023 R2.

El mallado se generó utilizando *Edge sizings* en el plano horizontal con tal de mantener elementos que tengan tamaños entre 0.1 y 0.5 [mm]. En el eje vertical, se refinaron el soporte metálico, el ánodo y el cátodo mediante métodos de condensación de malla, haciendo los elementos cada vez más delgados, generando un mallado estructurado y con elementos hexaédricos.

El electrolito, dado que no se considera dentro del dominio computacional del módulo utilizado, no forma parte de la geometría ni del mallado.

3.2.1 Convergencia de malla

Para poder saber si la malla utilizada es representativa, se realizaron varios mallados, manteniendo la misma distribución de elementos en el plano horizontal, pero variando el número de capas a lo largo del eje vertical, poniendo especial atención a los electrodos, dado lo delgados que son en comparación con el resto de las estructuras, además de ser el lugar en donde ocurren las reacciones.

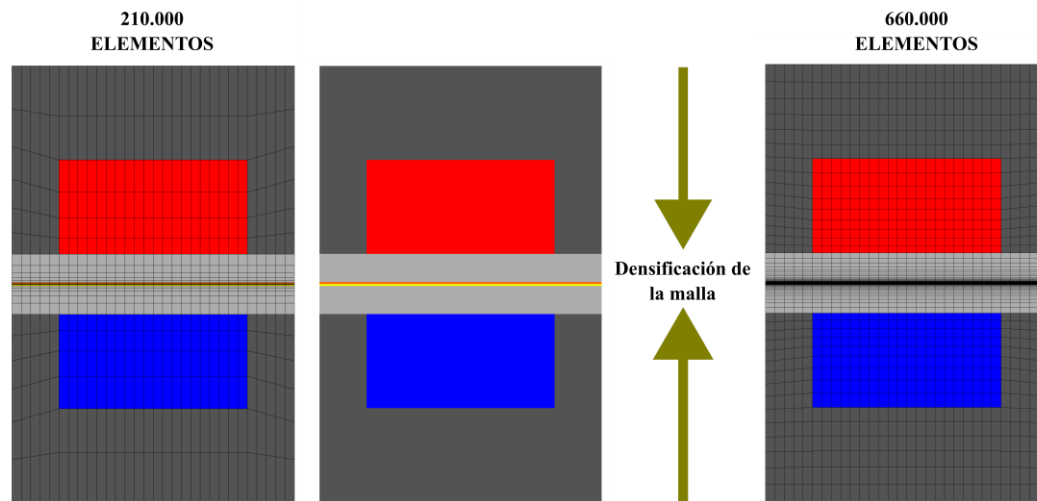


Figura 21. Condensación de la malla

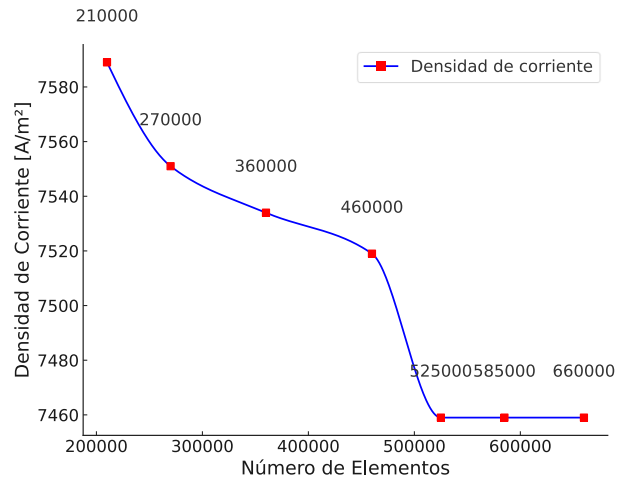


Figura 22. Densidad de corriente en el colector de la celda en función del número de elementos de la malla.

Como se puede observar en la Figura 22, a partir de aproximadamente los 500.000 elementos, la densidad de corriente es la misma independientemente de que tan denso sea el mallado en el soporte o electrodos. Por lo tanto, se utilizará la malla de 525000 elementos, disminuyendo así el costo computacional.

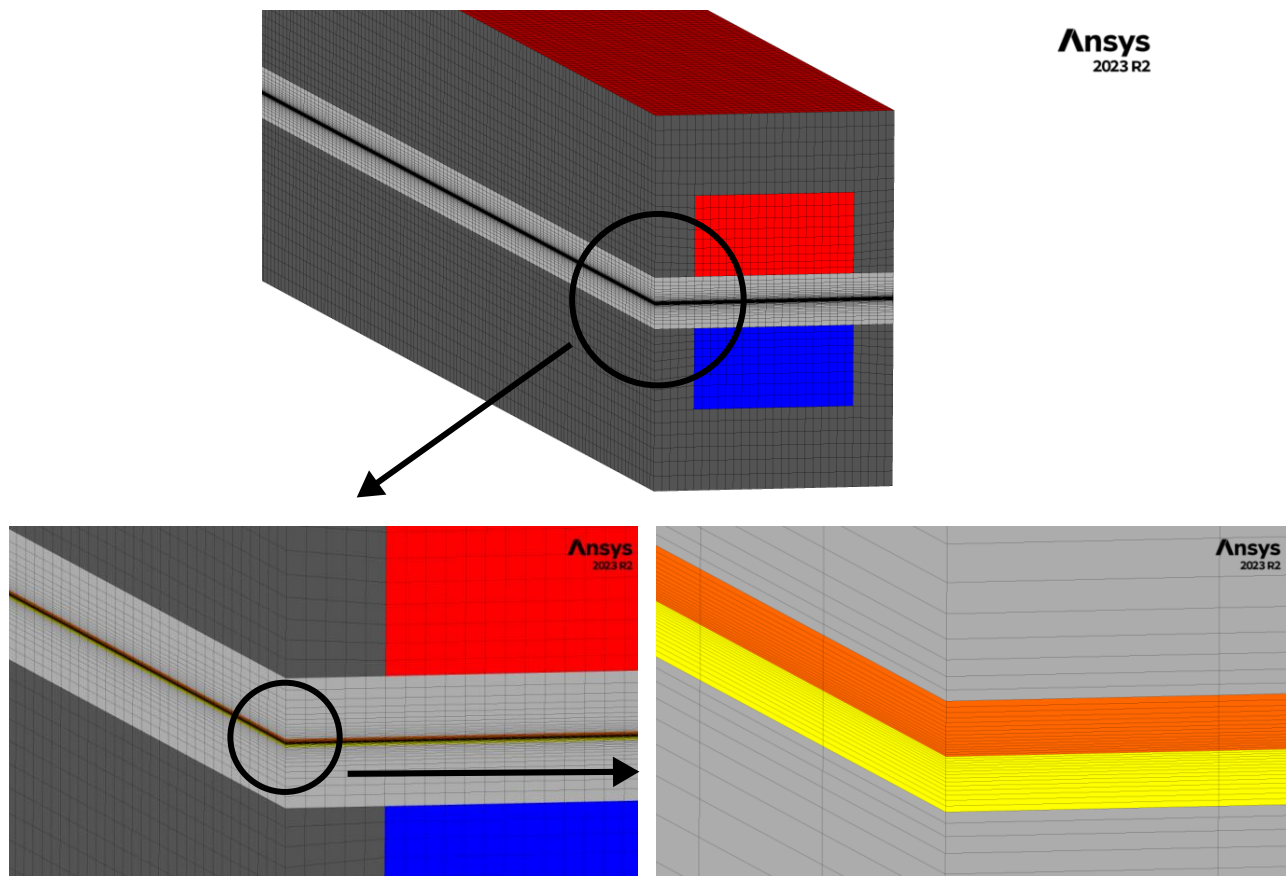


Figura 23. Mallado utilizado para simular el canal de la celda SOFC.

El número de elementos no se refinó en el plano XY debido a la capacidad computacional disponible y limitaciones de tiempo en el desarrollo del trabajo, evitando tiempos de simulación demasiado largo. Además, esta decisión está fundamentada también en la priorización de la correcta captura de la difusión de especies a lo largo del eje Y, hacia las zonas del electrolito, y por ende, mejorando la captura de la concentración de reactantes en las zonas activas. Así, se puede obtener una generación de calor realista a las condiciones físicas impuestas.

3.3 Configuración de geometría y condiciones de borde

En la Figura 24 se detallan las zonas usadas para la simulación del canal de la celda de combustible. Las configuraciones de cada zona están detalladas en la Tabla 3-1.

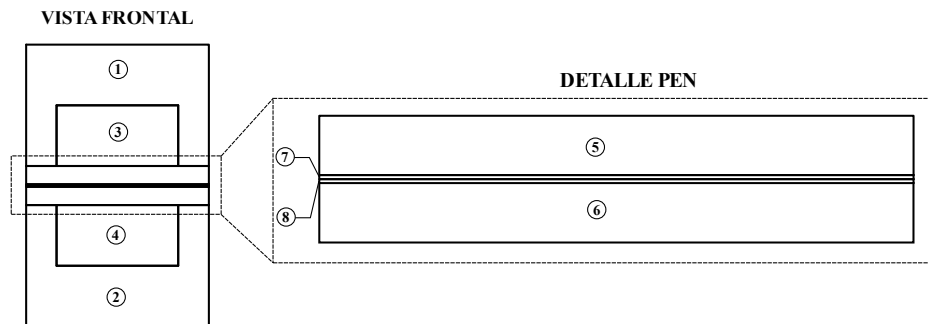


Figura 24. Detalle de las zonas utilizadas en el modelo en ANSYS Fluent

A continuación, en la Figura 25 se detalla la geometría utilizada para el canal en Fluent. El detalle de las distintas configuraciones aplicadas a sus respectivas superficies se encuentra en la Tabla 3-2

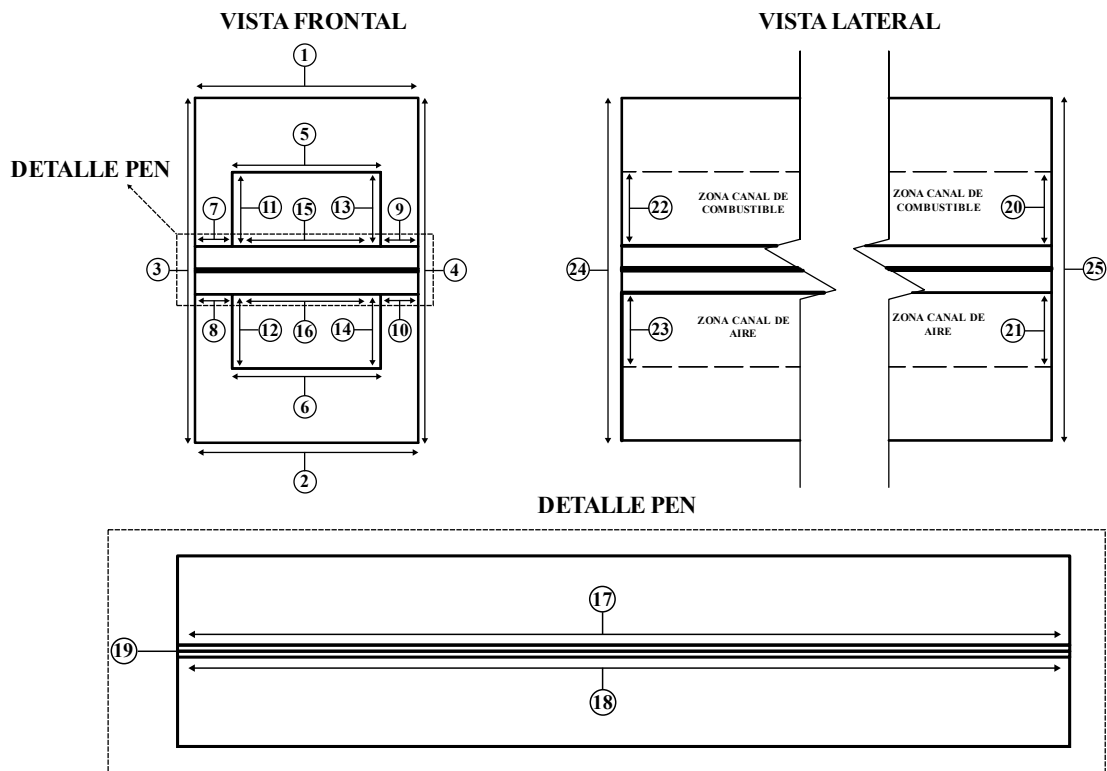


Figura 25. Configuración de superficies en ANSYS Fluent.

Tabla 3-1. Configuración de las zonas en ANSYS Fluent

Zona	Nombre	Tipo	Zona Porosa
1	Interconector Ánodo	Sólido	-
2	Interconector Cátodo	Sólido	-
3	Canal de combustible	Fluido	No
4	Canal de Aire	Fluido	No
5	Soporte del Ánodo	Fluido	Sí
6	Soporte del Cátodo	Fluido	Sí
7	Ánodo	Fluido	Sí
8	Cátodo	Fluido	Sí

Tabla 3-2. Condiciones de borde aplicadas a cada superficie en ANSYS Fluent

Zona	Tipo	Condiciones de Borde			
		Momentum	Térmico	Especies	Potencial Eléctrico
1	Pared	Estacionaria sin deslizamiento	Aislada	Flujo difusivo nulo	$V = 0$
2	Pared	Estacionaria sin deslizamiento	Aislada	Flujo difusivo nulo	$V = V_{out} ; I = I_{out}$
3	Simetría	-	-	-	-
4	Simetría	-	-	-	-
5	Pared	Estacionaria sin deslizamiento	Acoplada	Flujo difusivo nulo	Acoplada
6	Pared	Estacionaria sin deslizamiento	Acoplada	Flujo difusivo nulo	Acoplada
7	Pared	Estacionaria sin deslizamiento	Acoplada	Flujo difusivo nulo	Acoplada
8	Pared	Estacionaria sin deslizamiento	Acoplada	Flujo difusivo nulo	Acoplada
9	Pared	Estacionaria sin deslizamiento	Acoplada	Flujo difusivo nulo	Acoplada
10	Pared	Estacionaria sin deslizamiento	Acoplada	Flujo difusivo nulo	Acoplada
11	Pared	Estacionaria sin deslizamiento	Acoplada	Flujo difusivo nulo	Acoplada
12	Pared	Estacionaria sin deslizamiento	Acoplada	Flujo difusivo nulo	Acoplada
13	Pared	Estacionaria sin deslizamiento	Acoplada	Flujo difusivo nulo	Acoplada
14	Pared	Estacionaria sin deslizamiento	Acoplada	Flujo difusivo nulo	Acoplada
15	Interfaz	Acoplada	Acoplada	Acoplada	Acoplada
16	Interfaz	Acoplada	Acoplada	Acoplada	Acoplada
17	Interfaz	Acoplada	Acoplada	Acoplada	Acoplada
18	Interfaz	Acoplada	Acoplada	Acoplada	Acoplada
19	Bi-Pared	Estacionaria sin deslizamiento	Acoplada	Flujo difusivo nulo	Acoplada
20	Inlet	Flujo másico	Temperatura constante	Fracción másica constante	Flujo Nulo
21	Inlet	Flujo másico	Temperatura constante	Fracción másica constante	Flujo Nulo
22	Outlet	Presión de salida = 1 atm	Condición de Backflow	Condición de Backflow	Flujo Nulo
23	Outlet	Presión de salida = 1atm	Condición de Backflow	Condición de Backflow	Flujo Nulo
24	Pared	Estacionaria sin deslizamiento	Aislada	Flujo difusivo nulo	Flujo Nulo
25	Pared	Estacionaria sin deslizamiento	Aislada	Flujo difusivo nulo	Flujo Nulo

Con respecto a la pared 19, se nombra como bipared, ya que esta pared representa al electrolito, por lo que la superficie es una pared por ambos lados, comportándose en la cara superior como la interfaz ánodo-electrolito y en la cara inferior como la interfaz cátodo-electrolito.

En el documento redactado por Nordstrom [41], se plantea la necesidad de tener unas condiciones de borde bien planteadas para poder obtener resultados realistas y fiables. En el documento se menciona la importancia del tipo de condiciones y el número de condiciones. Según la literatura revisada, múltiples estudios realizan la combinación de inlets de velocidad o flujo másico, junto con outlets de presión, combinación de condiciones de borde que es ampliamente utilizada en la modelación CFD y que conduce a soluciones numéricas estables y fiables si son bien aplicadas.

Para la temperatura, en los inlets se establece una temperatura constante e igual a la temperatura de operación de la celda. Esto se condice con una condición más realista, ya que en la práctica los gases son precalentados antes de entrar a la celda, con el fin de evitar grandes shocks térmicos. Los flujos másicos están basados en los utilizados por Ghorbani [25].

Tanto la zona del canal de combustible como la zona del canal de aire son zonas fluidas con presencia de un fluido en forma de mezcla de especies. A continuación, se presenta una tabla con el detalle de la composición de especies, temperatura y flujo másico en los inlets y outlets.

Tabla 3-3. Condiciones de borde impuestas al canal de la celda.

Zona	Flujo másico [kg/s] / Presión manométrica [Pa]	Temperatura [K]	Composición %			
			O2	H2O	H2	N2
Inlet de combustible	4.48e-7	1023	0	3	97	0
Inlet de aire	2.17e-5	1023	21	0	0	79
Outlet de combustible	0	1100	0	40	60	0
Outlet de aire	0	1100	10	20	0	70

Para el caso de los outlets, las condiciones aplicadas de composición de especies y temperatura está impuestas para en el caso de presentarse Backflow en las iteraciones, lo cual ocurre en las primeras (Durante las primeras 5-10 iteraciones) y luego deja de ocurrir. Los valores son aproximados debido a la suposición de calentamiento del gas a lo largo del canal y la composición también es aproximada, basándose en simulaciones de prueba hechas en el canal.

En cuanto a las condiciones eléctricas, estas son fijadas en las superficies 1 y 2. En la superficie 1 se fija un valor de potencial eléctrico 0 y en la superficie 2, se fija el colector de corriente, fijándose aquí la condición de borde de voltaje o corriente total del sistema según corresponda, generando así un flujo de corriente por el conductor el cual se encuentra fuera del dominio.

Finalmente, dado que sólo se está simulando uno de los canales de la celda, es que se aplicó una condición de simetría a ambos lados. Es importante señalar que para los canales cercanos al borde de la celda esto puede no ser representativo.

3.4 Estrategia de simulación

Para obtener una convergencia rápida, según lo revisado en la tesis de Ghorbani [25], y basándose en las recomendaciones de los manuales y foros de ANSYS, las simulaciones se realizarán configurando como input un voltaje definido en el rango de operación de la celda, salvo en el caso en que se quiera obtener el voltaje de circuito abierto (V_{oc}), en cuyo caso se simulará usando como input una corriente total pequeña (0.01 [A]), lo que demora mucho más.

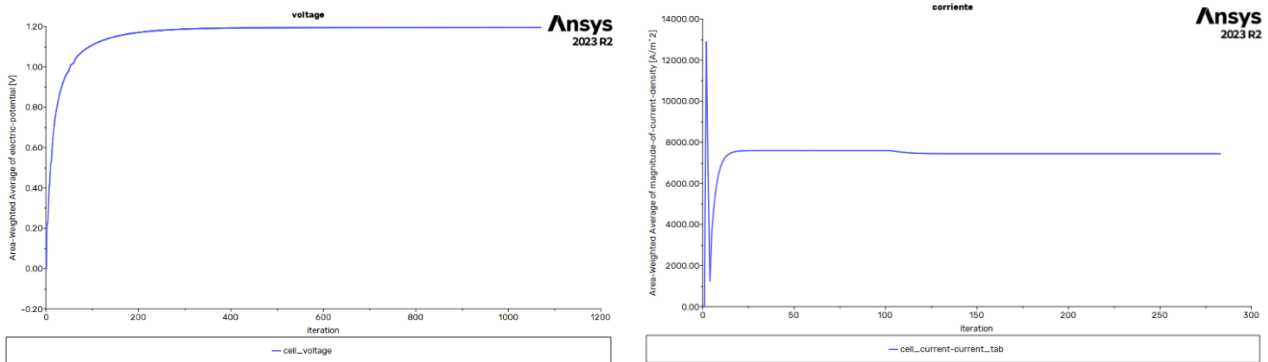


Figura 26. Comparación entre simulaciones. (a) La simulación convergió a una corriente total definida. (b) La simulación convergió a un voltaje definido.

En la Figura 26, se puede observar como a la solución le cuesta mucho más converger cuando se impone una corriente de objetivo (a), que cuando se impone un voltaje (b). Para el primer caso son necesarias alrededor de 1200 iteraciones, mientras que para el segundo basta con aproximadamente 280 iteraciones.

Para ayudar a converger más fácil cada simulación, basándose en la estrategia usada por Ghorbani [25] se procederá con la siguiente estrategia de simulación:

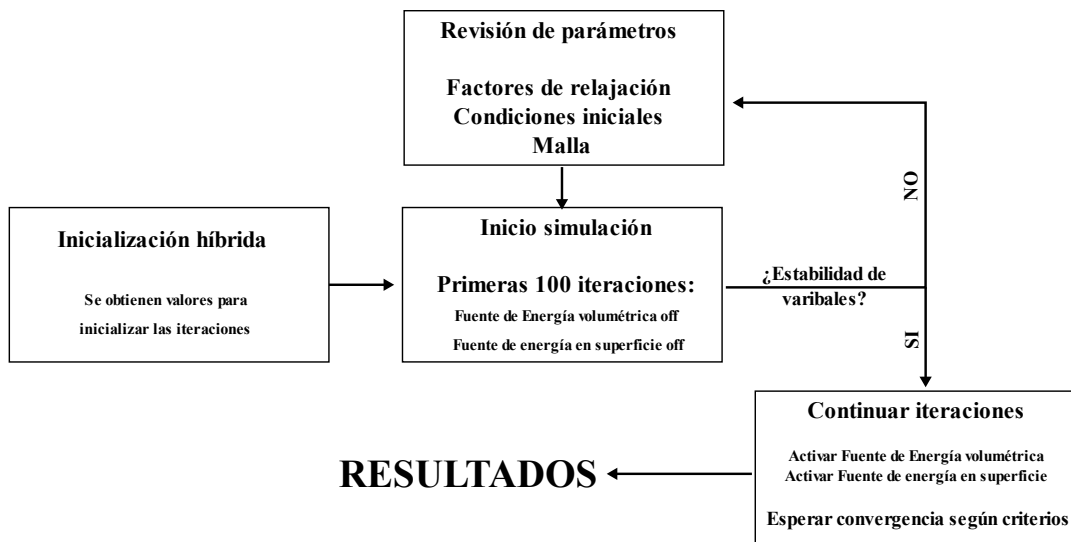


Figura 27. Estrategia de iteración.

La estrategia está orientada a resolver en las primeras iteraciones el sistema sin el calor producido por las reacciones, esto con el objetivo de evitar posibles crecimientos descontrolados en los residuos que conlleven divergencias en la simulación. Una vez estabilizadas las concentraciones de especies, la corriente y el voltaje, se activarán las fuentes energéticas, considerando el calor de las reacciones, con los residuos ya estabilizados

3.5 Criterios de Convergencia

Para analizar la convergencia y estabilidad de la solución obtenida, se monitorearán las siguientes variables:

3.5.1 Residuales

Se monitorearán los residuales, los cuales miden la discrepancia entre las soluciones calculadas en un paso de iteración y las ecuaciones de conservación (continuidad, momentum, energía, especies). Se utilizará un criterio de convergencia de 10^{-8} para detener la simulación.

3.5.2 Variables

Además de monitorear los residuales, se van a monitorear las variables calculadas, para ver si estas convergen a un valor, o presentan inestabilidades. Estas variables corresponden a la temperatura máxima. Para este caso, se monitoreará la temperatura máxima y mínima en la interfaz Ánodo-Electrolito y el potencial eléctrico y la densidad de corriente en el interconector del cátodo, en la superficie número 2 de la Figura 25, que es donde se recolecta la corriente producida por el canal. Para estas variables también se aplicó un criterio de convergencia de 10^{-8} en sus respectivos residuos.

La decisión de utilizar 10^{-8} como criterio de convergencia para las variables está basada en la revisión de la literatura, en donde para celdas SOFC.

En cuanto al factor de relajación, se utilizará un factor de relajación de 0.3, basándose en el factor utilizado por Krastev et. al. [22].

3.6 Características técnicas del computador utilizado

Para las simulaciones se utilizó un computador del laboratorio de mecánica computacional perteneciente al Departamento de Ingeniería Mecánica de la Universidad de Concepción. A continuación, en la Tabla 3-4 se exponen las características técnicas del computador utilizado.

Tabla 3-4. Características técnicas del computador utilizado

Procesador	12th Intel® Core™ i7-12700
Velocidad de base	2.10 GHz
Número de Núcleos	12
Procesadores Lógicos	20
Memoria RAM	16 Gb

CAPÍTULO IV: Resultados

En este capítulo se presentan los resultados de las simulaciones realizadas para el canal de la celda. Para facilitar la interpretación de los datos y la referencia a planos o perfiles a lo largo de las diferentes coordenadas, se define un sistema de referencia cartesiano, cuya orientación se muestra en la siguiente figura según la configuración establecida en Fluent.

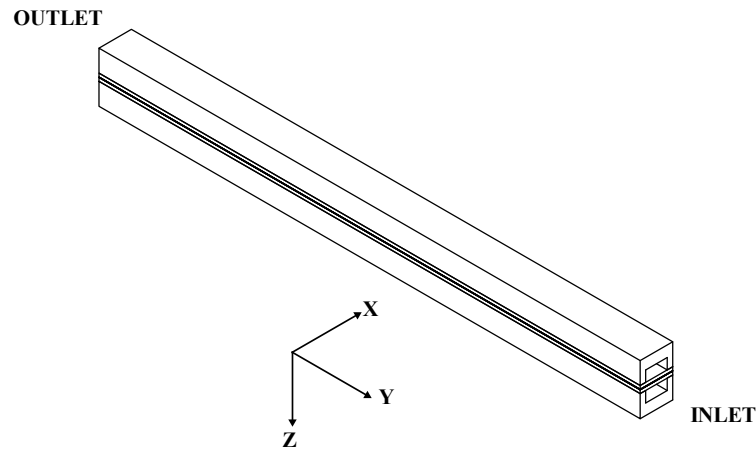


Figura 28. Orientación del sistema de coordenadas en el canal de la celda SOFC.

4.1 Velocidad en los canales

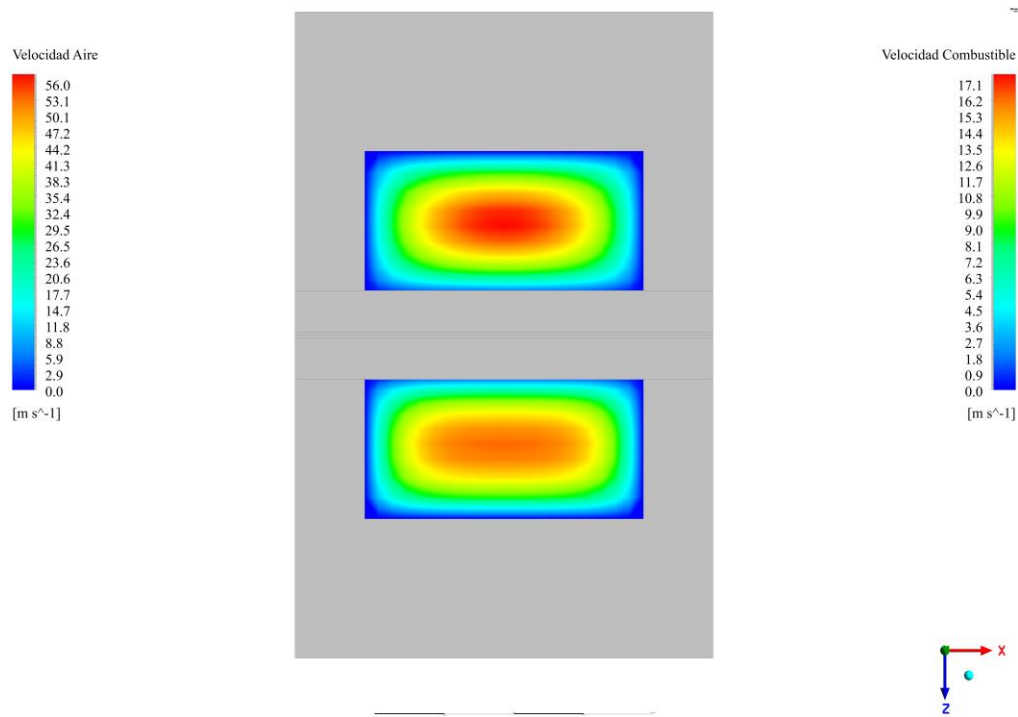


Figura 29. Perfil de velocidad del combustible y del aire en sus respectivos canales

La imagen presentada muestra un corte transversal de las velocidades en dos canales paralelos de flujo, donde el canal superior corresponde al combustible (hidrógeno) y el canal inferior corresponde al oxidante (aire). Se puede observar que, en el caso del canal de combustible, el rango de velocidades del hidrogeno oscila entre 0.0 y 17.1 m/s, mientras que, en el canal inferior, el rango de velocidades del aire está comprendido entre 0.0 y 56.0 m/s. Ambas escalas se presentan junto a la imagen, indicando los intervalos específicos de cada fluido.

Se observa cómo la distribución de velocidades sigue un comportamiento característico de flujo laminar dentro de canales estrechos y paralelos. Cerca de las paredes del canal, la velocidad disminuye gradualmente hasta alcanzar 0 [m/s], lo cual es consistente con la condición de no deslizamiento en las paredes, además a distribución del perfil de velocidad es simétrica, con un gradiente suave, característico de un flujo laminar con bajos números de Reynolds

La verificación de la condición de régimen laminar será hecha en el capítulo siguiente correspondiente al CAPÍTULO V: Análisis de Resultados.

4.2 Curvas de Polarización de la celda

A continuación, se presentan las curvas de polarización y la curva de potencia de una celda de combustible de óxido sólido (SOFC) para diferentes valores de porosidad.

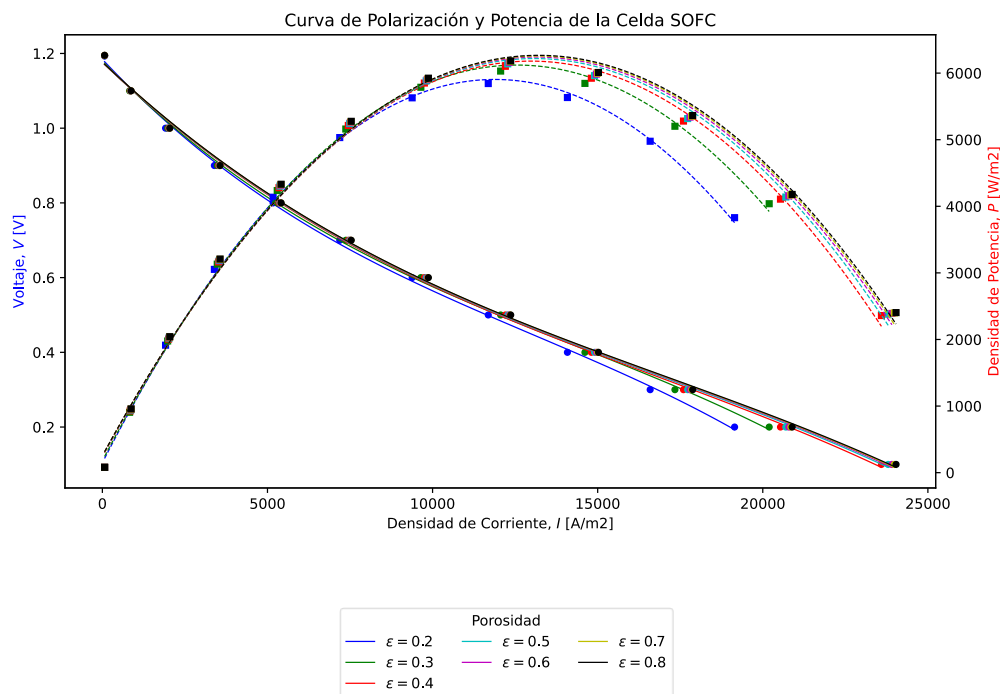


Figura 30. Curva de polarización de la celda operando según las condiciones descritas en la sección 2.8

Como se puede observar, la potencia se maximiza para un rango de corrientes correspondientes a un voltaje de 0.5 [V], por lo que todos los resultados expuestos y los posteriores análisis serán realizados con los datos simulados a dicho voltaje, buscando estudiar el comportamiento de la celda en su punto

óptimo. La forma de la curva será discutida a profundidad en el CAPÍTULO V: Análisis de Resultados.

4.3 Difusión del combustible y oxígeno

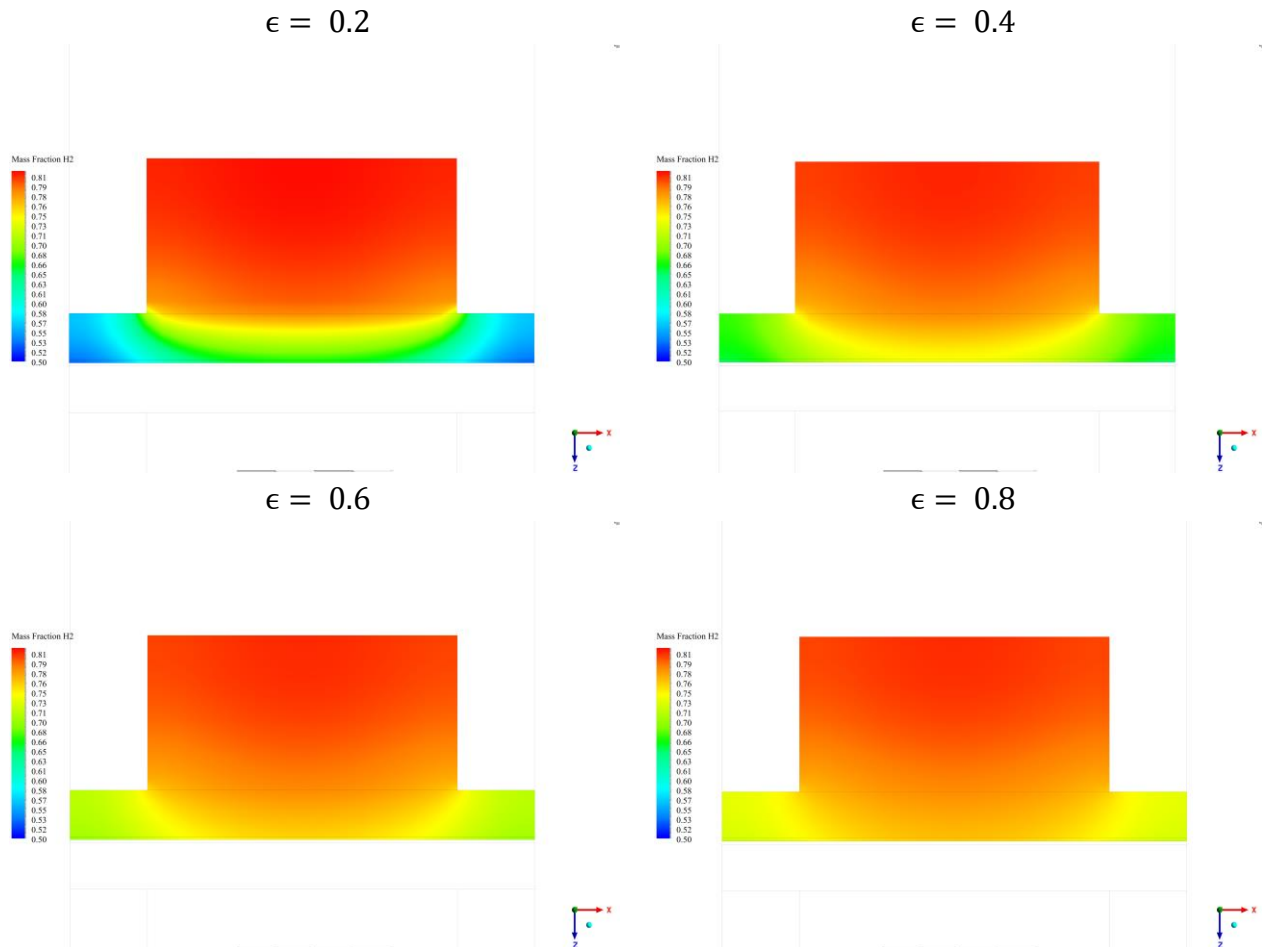


Figura 31. Difusión del hidrógeno desde el canal a través del soporte y ánodo.

En la Figura 31 se muestran la difusión del hidrógeno a través de las capas porosas, para soportes con porosidad $\epsilon = 0.2 - 0.8$. Los demás perfiles pueden encontrarse en el ANEXO I. El perfil fue obtenido en un punto a la mitad de la celda, de manera de ser aproximadamente representativa al resto de la celda sin captar los fenómenos cercanos a los Inlets y Outlets.

En cuanto a la difusión de oxígeno, en la Figura 32 se muestra la concentración de oxígeno a través del soporte y cátodo, hasta llegar al electrolito, para porosidades del soporte de $\epsilon = 0.2 - 0.8$. Al igual que en la Figura 31, los demás perfiles se encuentran en el ANEXO I. En el ANEXO II se pueden encontrar los perfiles de concentración de reactivos a lo largo de la celda.

Se puede observar como a medida que la porosidad aumenta, la concentración de reactivos en el ánodo y por ende en el TPB (Zona baja del gráfico), así como también en el cátodo y electrolito, aumenta, lo cual es comportamiento esperable debido a la mayor permeabilidad de los soportes.

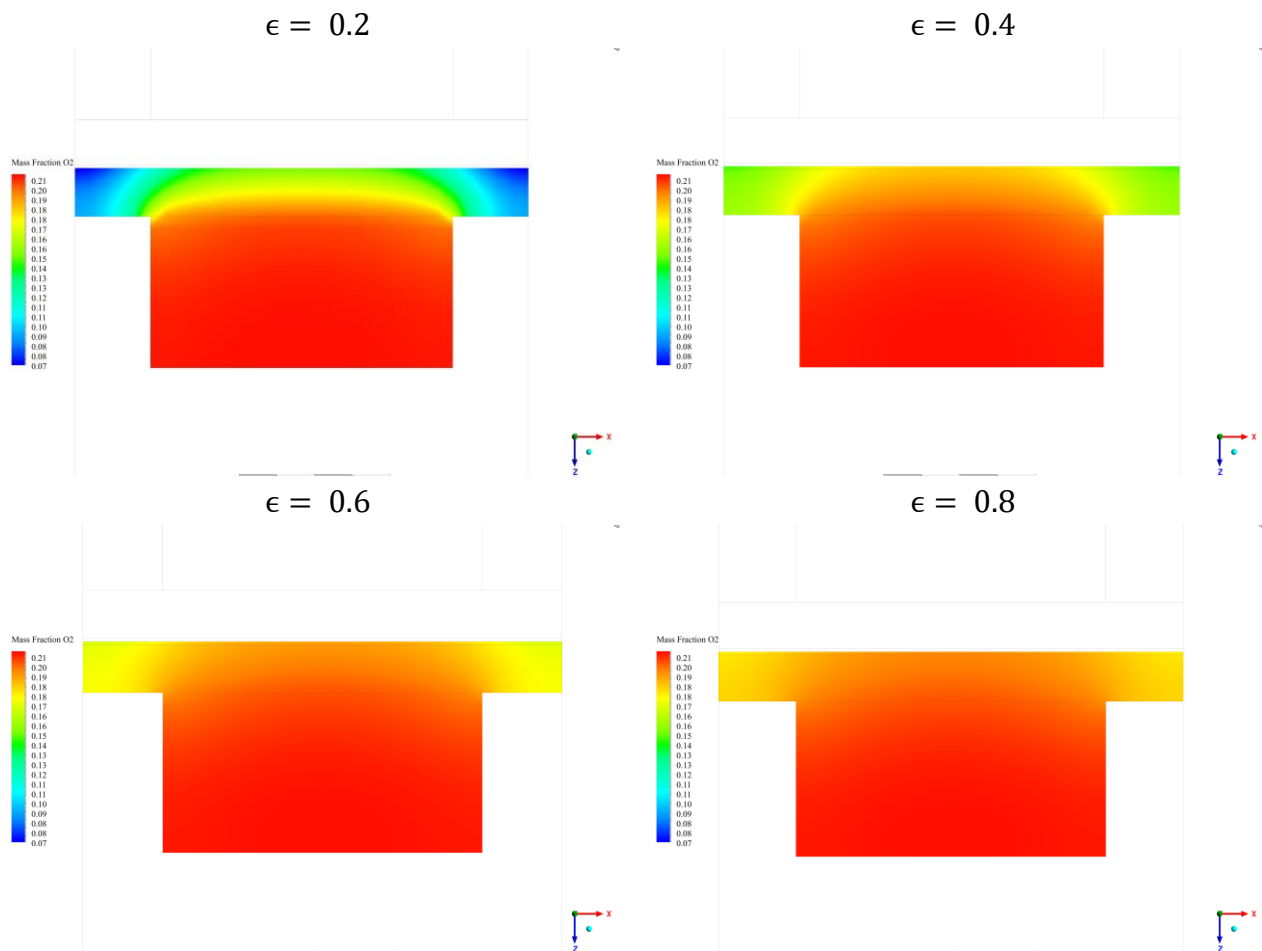


Figura 32. Difusión del oxígeno desde el canal a través del soporte y cátodo.

4.4 Temperatura de los gases

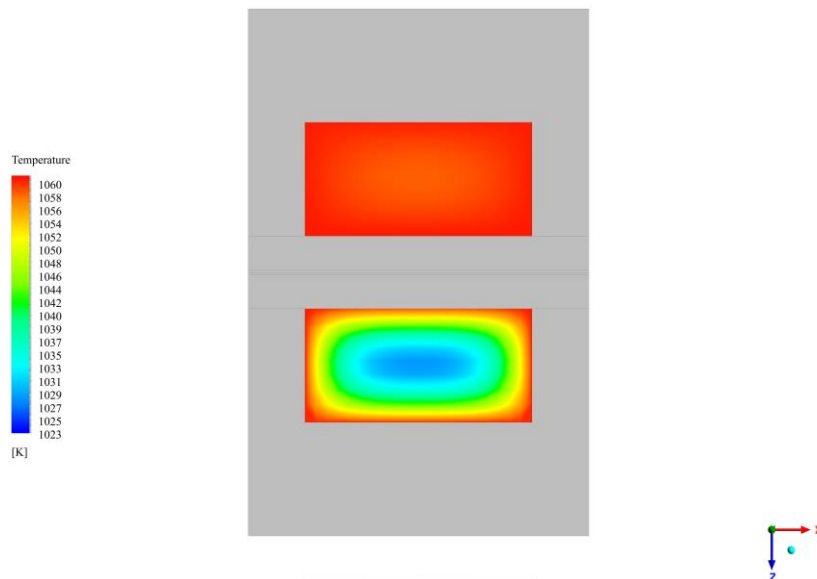


Figura 33. Perfil de temperatura de los gases en sus respectivos canales en el plano XZ medio de la celda.

La Figura 33 muestra el perfil de temperatura del hidrógeno en el canal de combustible y del aire en su respectivo canal. Se observa que la distribución de temperatura del hidrógeno es bastante homogénea, mientras que el aire presenta una distribución más heterogénea. En el caso del aire, su temperatura es significativamente más baja en el interior del canal y aumenta cerca de las paredes, probablemente debido a la influencia de la temperatura del interconector que lo contiene.

4.5 Temperaturas y gradientes térmicos al interior de la celda

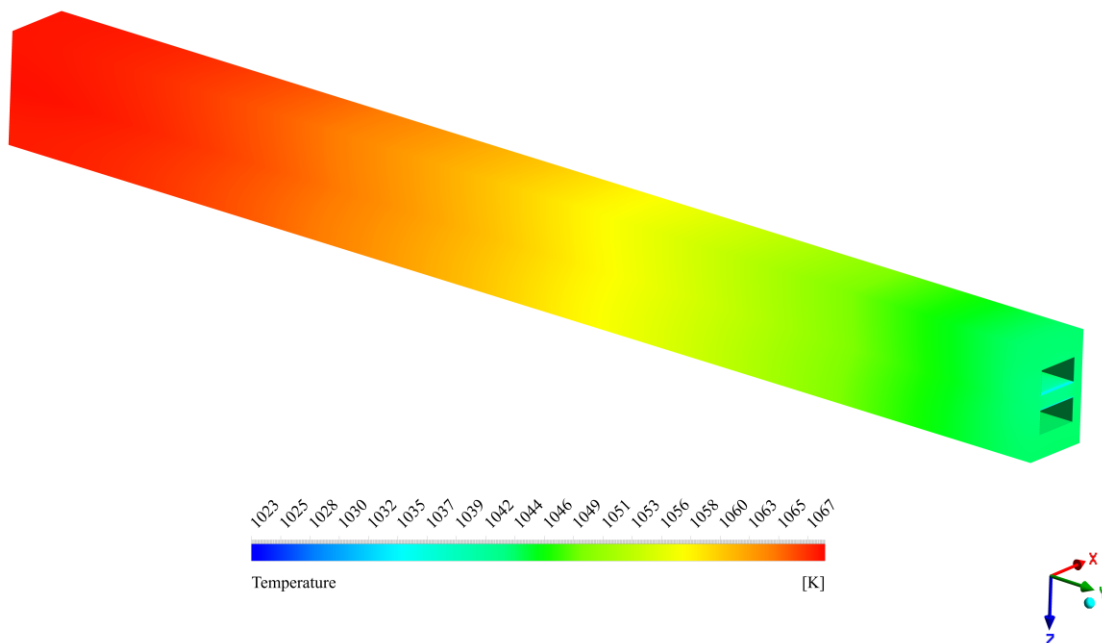


Figura 34. Temperatura de la celda para una porosidad de los soportes de $\epsilon = 0.2$.

En la Figura 34 se puede observar que la temperatura de la celda a lo largo de los distintos planos XZ es bastante homogénea, por lo que los principales cambios en la temperatura ocurren a lo largo de la celda.

A continuación, en la Figura 35 se presentan perfiles de temperatura en un plano XZ al centro del canal de la celda. En el ANEXO III se pueden encontrar estos y el resto de los perfiles. Se puede observar como a medida que la porosidad de los soportes aumenta, la temperatura del perfil es más heterogénea, presentando siempre puntos calientes cercanos al electrolito y al centro de la celda. También se observan cambios mucho más pronunciados de temperatura en el soporte del cátodo, en la zona contigua al canal de aire (Zona baja del canal inferior). Eso se debe al enfriamiento causado por el aire, el cual presenta una menor temperatura según lo descrito en la Figura 29.

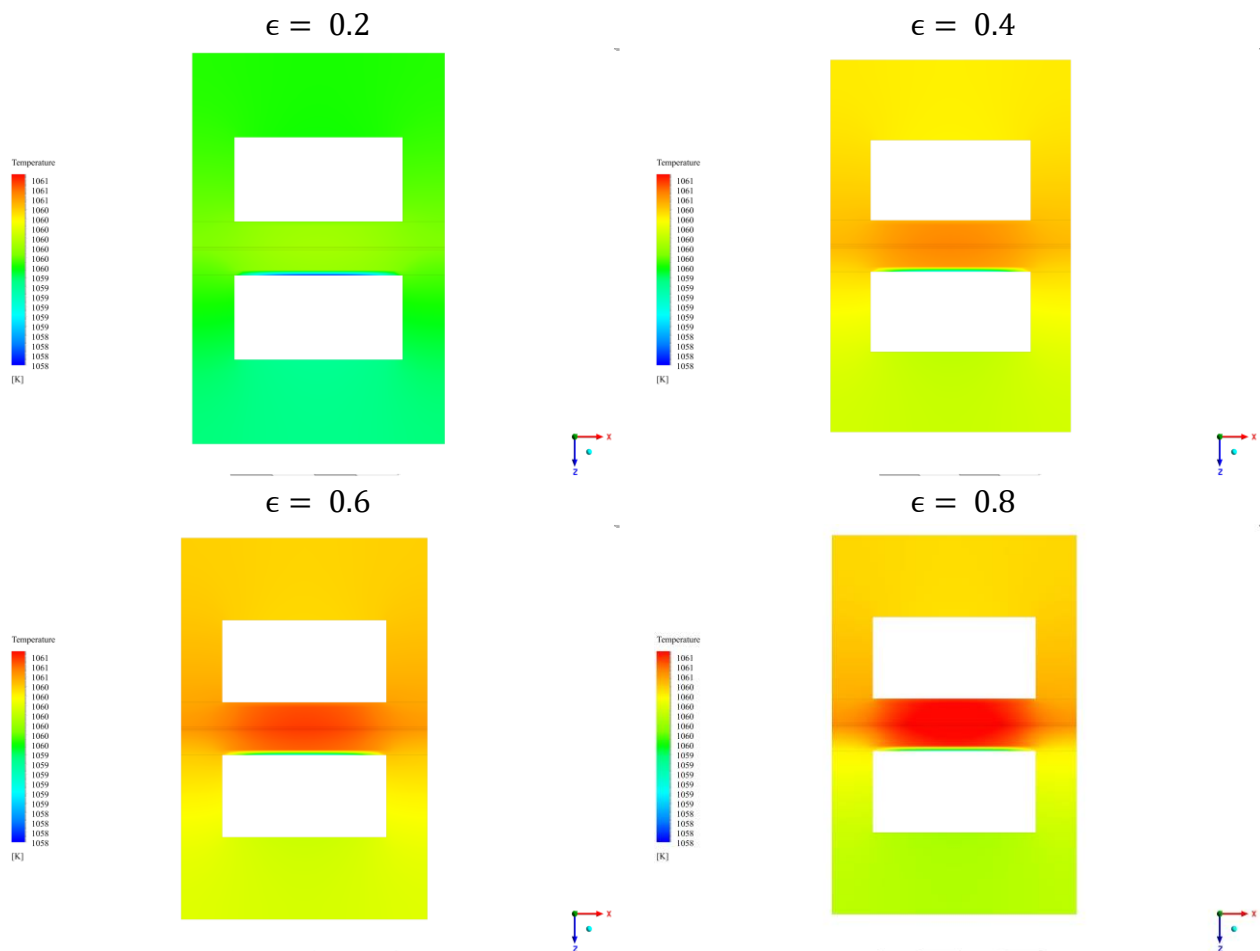


Figura 35. Perfil de temperaturas al interior de la celda en el plano XZ medio de la celda.

En la Figura 36 se muestran las temperaturas promedio a lo largo del eje Z para el Ánodo, el Cátodo, el soporte del Ánodo y el soporte del Cátodo para una porosidad de los soportes de $\epsilon = 0.6$. Estas temperaturas promedio fueron obtenidas para el plano XY, a lo largo de la coordenada Z local, la cual parte en la parte superior de cada capa.

Se puede observar una variación de temperatura lineal para todas las capas, exceptuando los puntos cercanos a los canales de distribución de combustible y aire (Punto de menor coordenada Z en el soporte del Ánodo y punto de mayor coordenada Z en el soporte del Cátodo), similar a lo observado en la Figura 35. Estos puntos fueron sacados del ajuste al no ser representativos del resto de la estructura del soporte. Las implicancias de esto y las posibles causas de este fenómeno serán discutidas en el CAPÍTULO V: Análisis de Resultados.

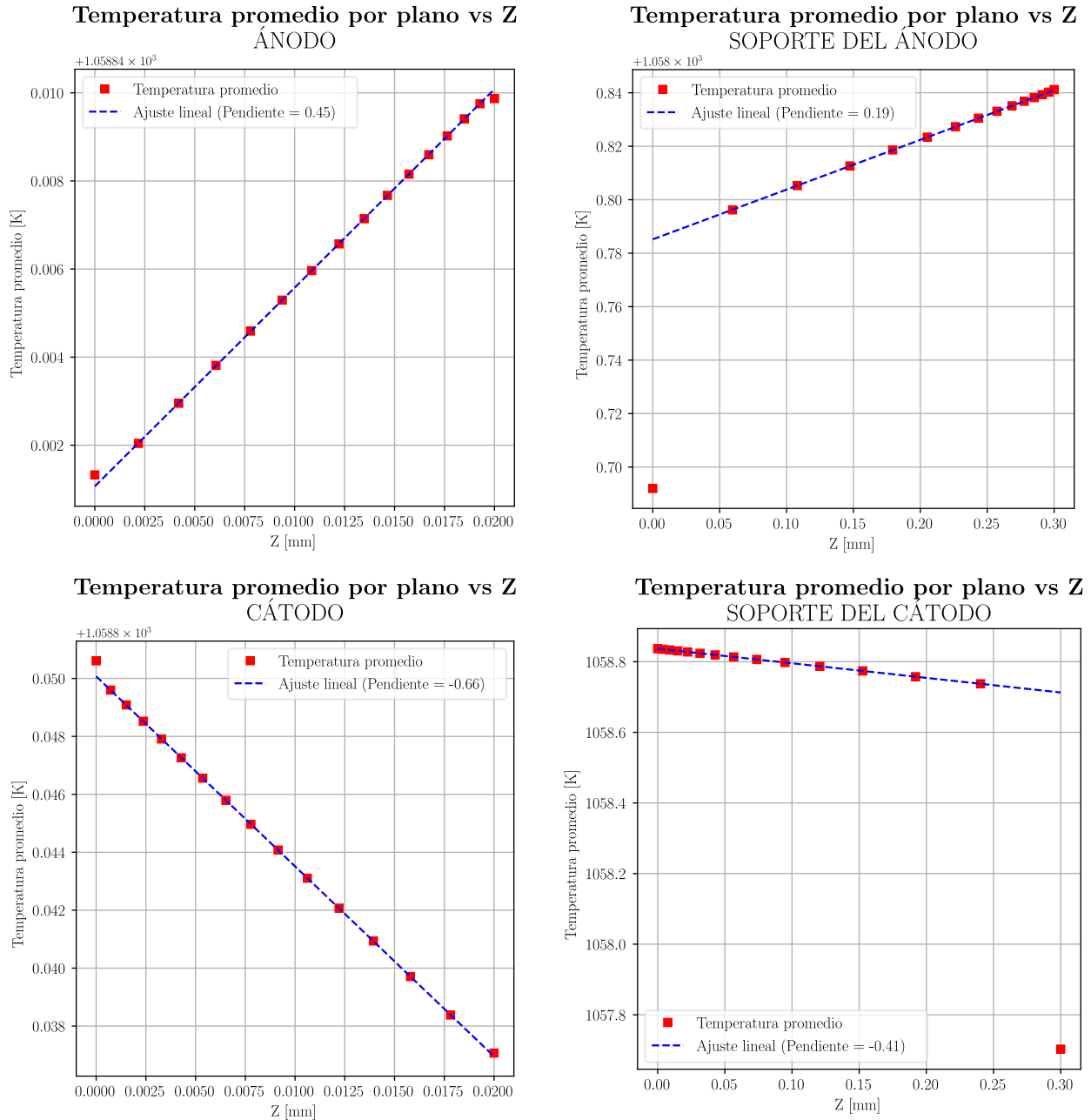


Figura 36. Temperatura promedio en plano XZ en función de la coordenada z local para el ánodo (a) el soporte del Ánodo (b), el Cátodo (c) y el soporte del cátodo (d) para una porosidad de $\epsilon = 0.6$.

El resto de las imágenes para las distintas porosidades pueden encontrarlas en el ANEXO IV. Para el resto de las porosidades, el comportamiento es similar, aunque la pendiente varía de acuerdo a la porosidad, como se puede observar en la Figura 37, en donde se grafican las pendientes de las curvas de temperatura en función de la coordenada Z, con respecto a la porosidad de los soportes, obteniéndose un gradiente de la temperatura promedio a lo largo del eje vertical del canal simulado.

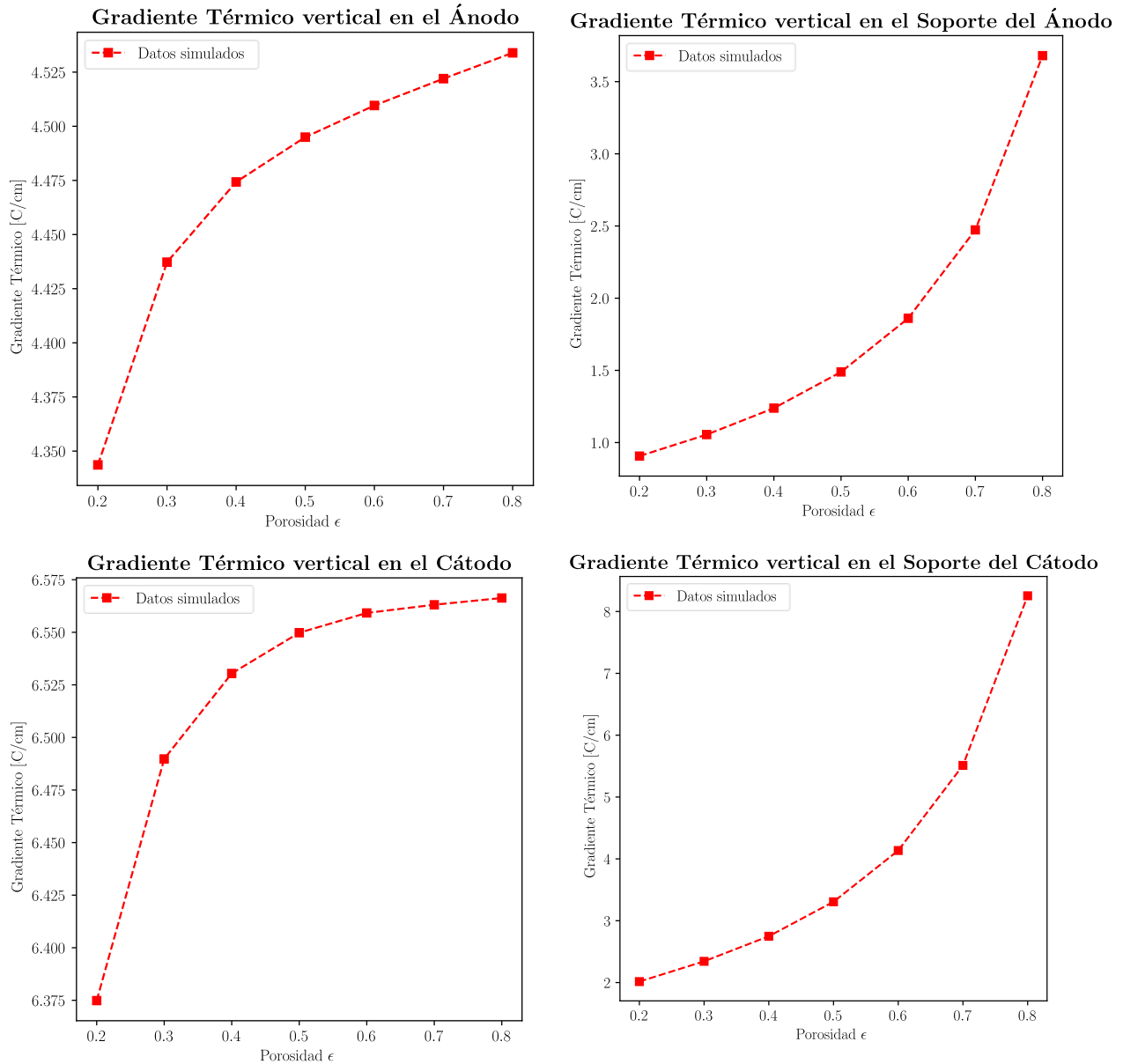


Figura 37. Gradiente de temperaturas promedio a lo largo del eje Z en función de la porosidad para el Ánodo (a) el soporte del Ánodo (b), el Cátodo (c) y el soporte del cátodo (d).

En la Figura 37 se puede observar que la pendiente o el gradiente aumenta en función de la porosidad, sin embargo, los comportamientos varían dependiendo si es un electrodo o un soporte. Esto será discutido más adelante en el CAPÍTULO V: Análisis de Resultados.

Debido a que a partir de la Figura 34 se observa que los principales cambios de temperaturas se observan a lo largo del eje y, sumado a lo descrito en los Capítulos 1 y 2 sobre la mayor sensibilidad de los electrodos y electrolitos a los cambios de temperatura debido a su composición cerámica, es que a continuación, se presentan los mapas de contornos correspondientes a las temperaturas y gradientes térmicos para las interfaces: Ánodo-Electrolito, Cátodo-Electrolito, Ánodo-Soporte y

Cátodo Soporte, las cuales serán objeto de un estudio más detallado en el CAPÍTULO V: Análisis de Resultados.

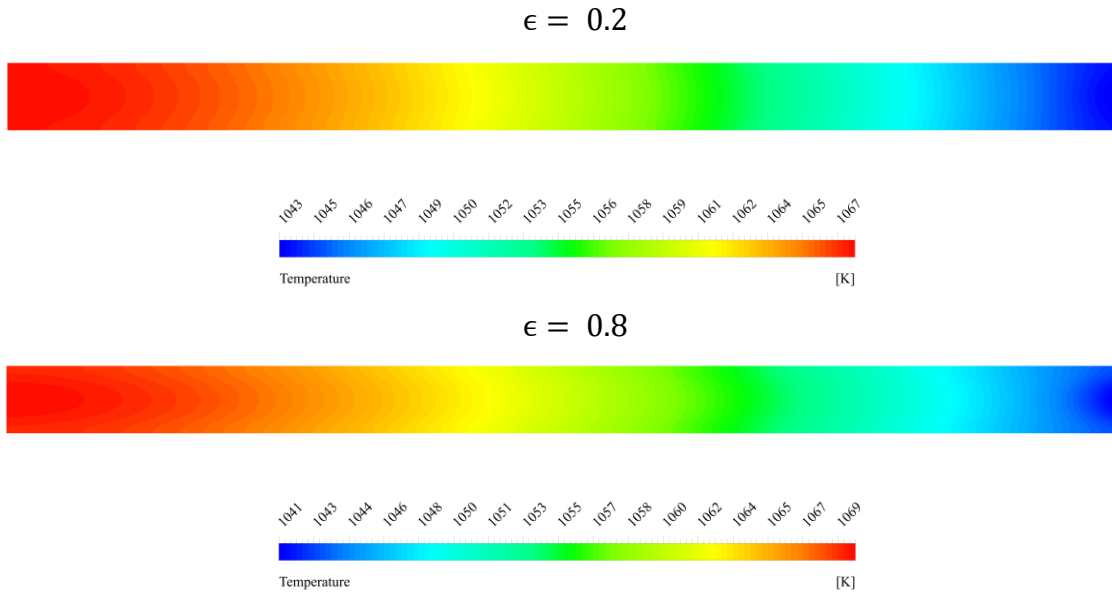


Figura 38. Temperatura de la interfaz Ánodo-Electrolito para porosidades de $\epsilon = 0.2$ y $\epsilon = 0.8$.

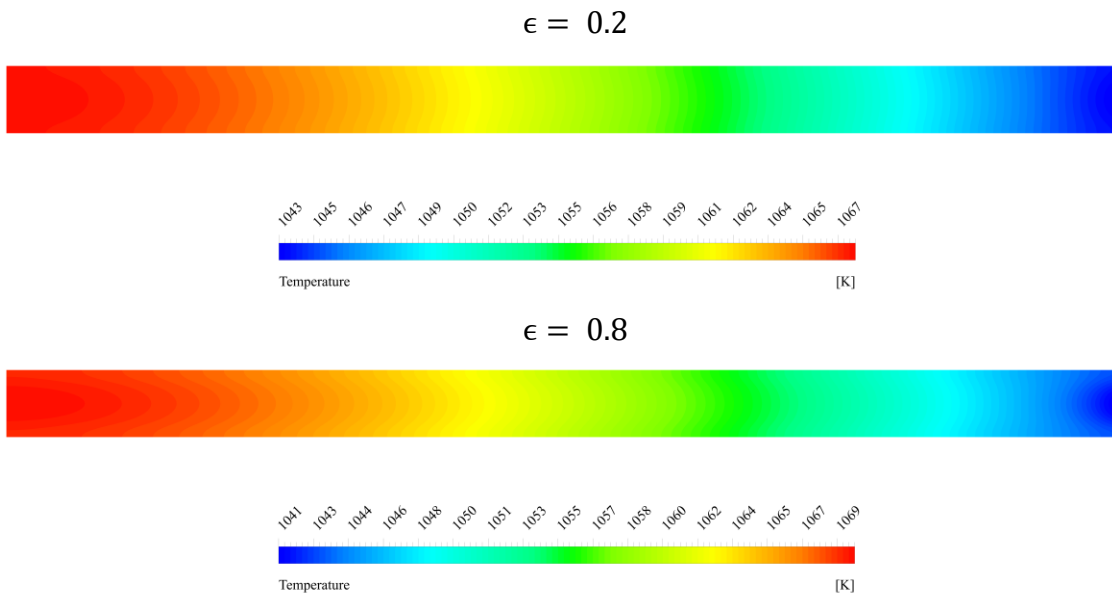


Figura 39. Temperatura de la interfaz Cátodo-Electrolito para porosidades de $\epsilon = 0.2$ y $\epsilon = 0.8$.

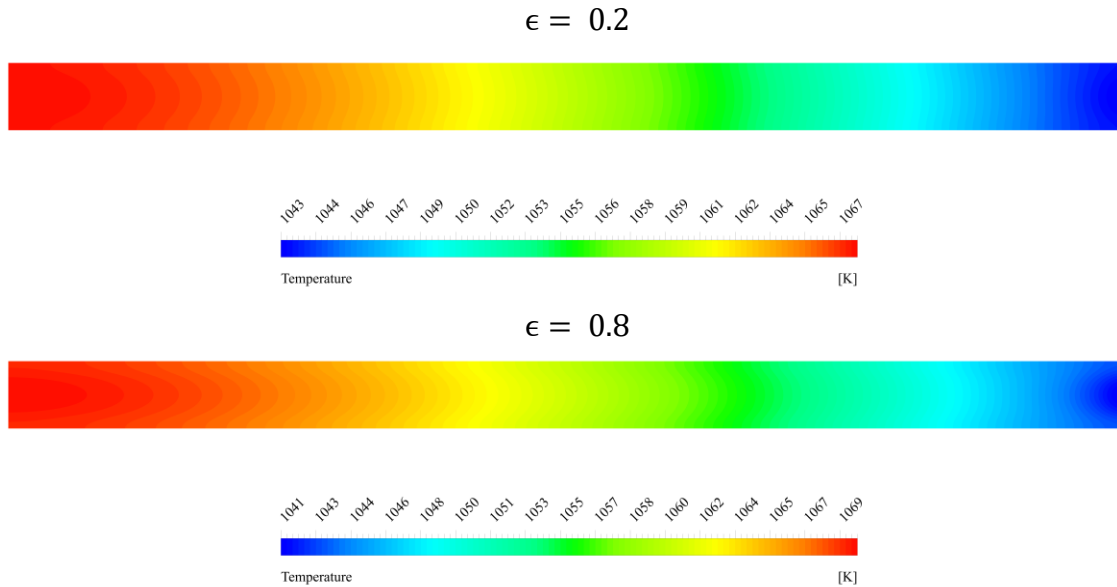


Figura 40. Temperatura de la interfaz Ánodo-Soporte para porosidades de $\epsilon = 0.2$ y $\epsilon = 0.8$.

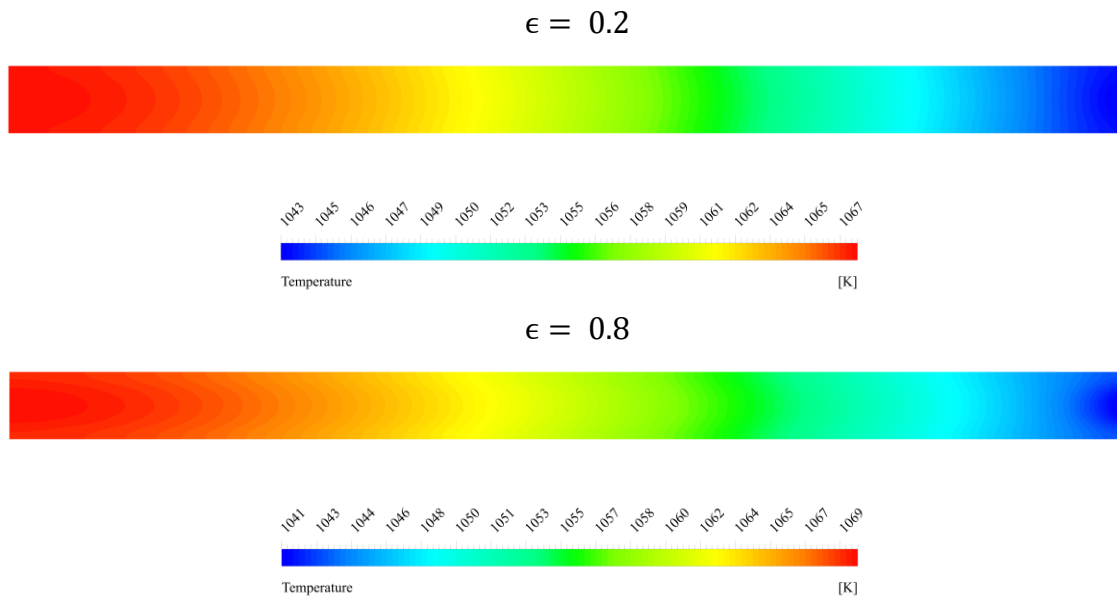


Figura 41. Temperatura de la interfaz Cátodo-Soporte para porosidades de $\epsilon = 0.2$ y $\epsilon = 0.8$.

En las Figuras 38, 39, 40 y 41, se pueden observar los mapas de temperatura para porosidades de $\epsilon = 0.2$ y $\epsilon = 0.8$. Los mapas de temperatura para todas las porosidades pueden encontrarse en el ANEXO V.

Se puede observar que los mapas de temperaturas de las distintas interfaces presentan temperaturas similares para una misma porosidad, lo que puede indicar poca variación térmica a lo largo del eje Z, lo cual se condice con las pequeñas variaciones en Z presentadas en la Figura 36 . Sin embargo, al

variar la porosidad si se pueden apreciar diferencias, alargándose las líneas de contorno cercanas a la zona caliente. También se observa como la zona fría de las interfaces disminuye con el aumento de la porosidad, viéndose cambios más bruscos de temperatura en esa zona.

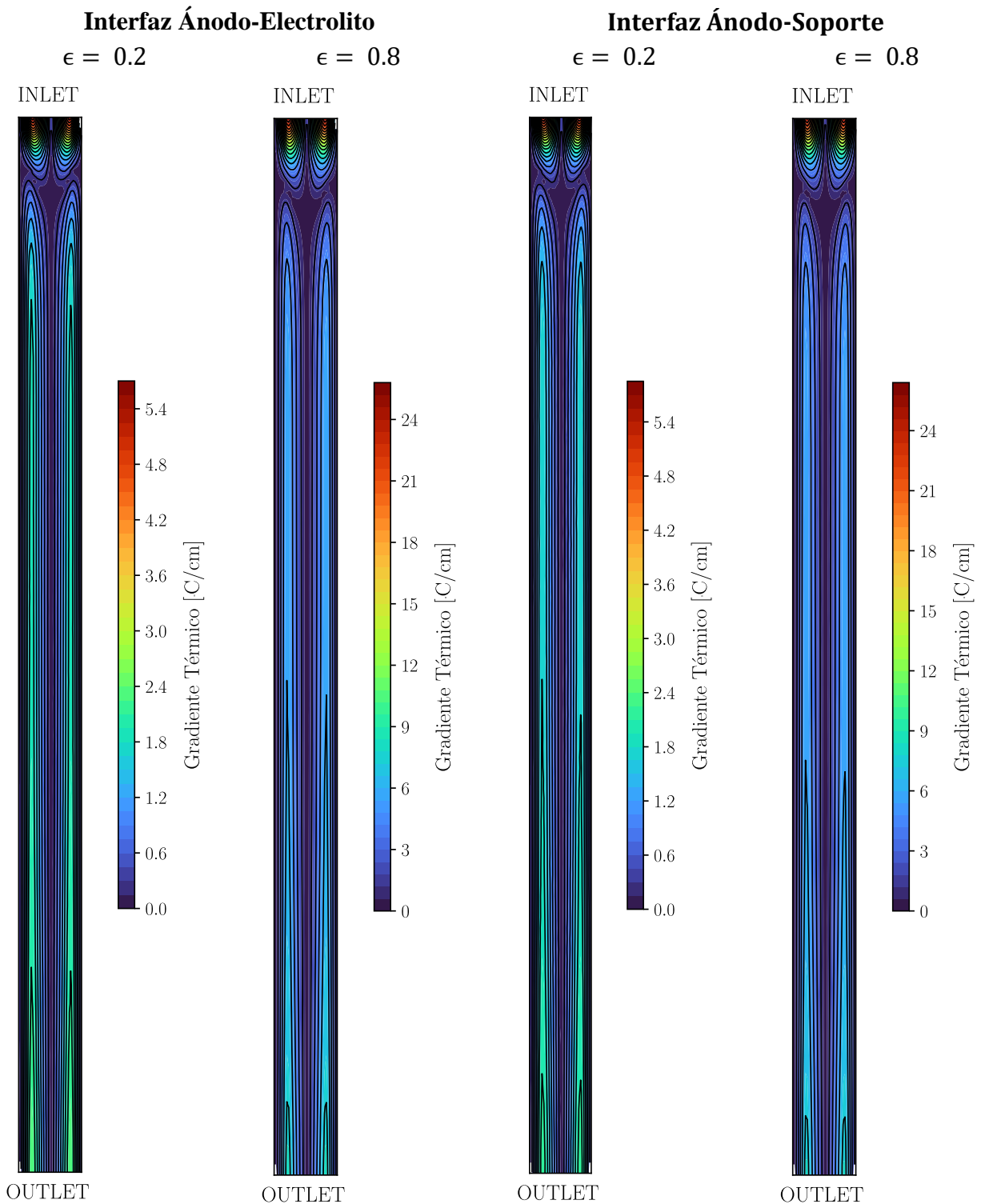


Figura 42. Mapa de contorno de los gradientes térmicos en las interfaces del Ánodo

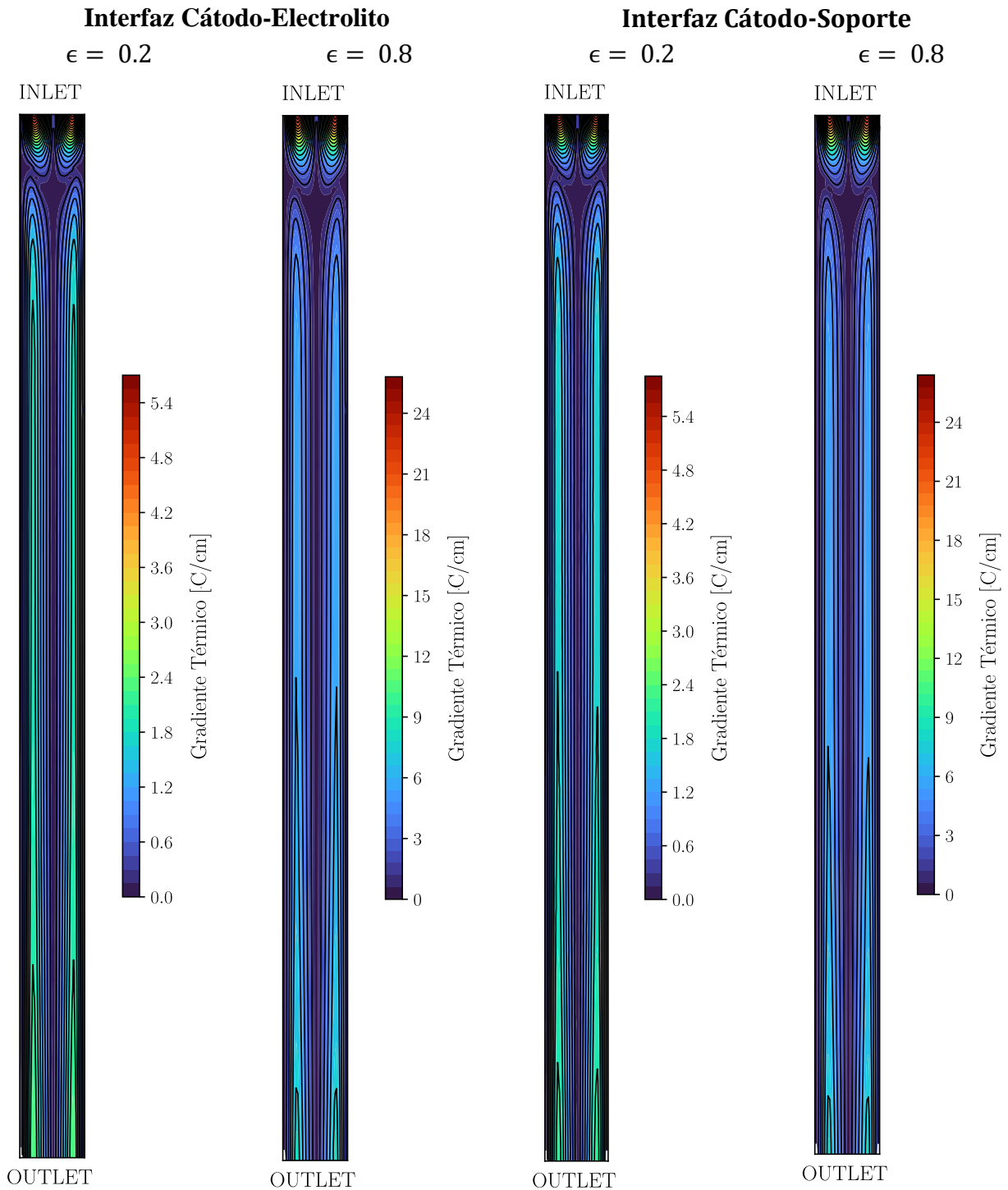


Figura 43. Mapa de contorno de los gradientes térmicos en las interfaces del Cátodo

En las Figuras 42 y 43, se muestran los mapas de contorno de los gradientes térmicos de las interfaces de los electrodos, para porosidades de $\epsilon = 0.2$ y $\epsilon = 0.8$. El resto de los gráficos pueden encontrarse en el ANEXO VI. Se puede observar cómo los gradientes se concentran en las zonas cercanas al INLET en todos los casos, aumentando considerablemente al aumentar la porosidad de los soportes. Esto será discutido en el CAPÍTULO V: Análisis de Resultados.

CAPÍTULO V: Análisis de Resultados

En primer lugar, se verifica la condición de régimen Laminar impuesta en los canales de la celda. La Tabla 5-1 está realizada con información obtenida de la Figura 29. El coeficiente de Reynolds fue obtenido mediante la ecuación (14) y el diámetro hidráulico mediante la ecuación (15). Las propiedades termodinámicas como densidad ρ y viscosidad dinámica μ fueron obtenidos del software EES [42] para las condiciones de temperatura de 1060 [K] para el hidrógeno y 1040 [K] para el aire, basándose en temperaturas representativas del dominio según lo observado en la Figura 33

Tabla 5-1. Velocidades y Reynolds alcanzados en los canales de la celda

	Hidrógeno	Aire
Velocidad Representativa [m/s]	9.4	32
Velocidad Máxima [m/s]	17.1	51.9
Viscosidad dinámica [kg/m-s]	2.16e-5	4.26e-5
Densidad [kg/m ³]	0.024	0.35
Reynolds Representativo	13.72	350.3
Reynolds Máximo	24.97	568.2

Los valores representativos de velocidad corresponden al promedio ponderado por área de la velocidad observada en el perfil correspondiente a la Figura 29, mientras que las velocidades máximas corresponden a los puntos de mayor intensidad del flujo.

Los números de Reynolds calculados son bajos (Reynolds representativo de 13.72 para el hidrógeno y 350.3 para el aire), indicando que el régimen laminar se mantiene en los canales. Esto es consistente con los perfiles de velocidad suaves y simétricos observados en la Figura 29, lo que reafirma la validez de las condiciones impuestas en la simulación.

En cuanto a la curva de polarización obtenida para la celda SOFC en la Figura 30, se muestra el comportamiento esperado de las pérdidas electroquímicas en función de la corriente, destacando las pérdidas por activación y óhmicas como principales contribuyentes. En la región de baja corriente, las pérdidas por activación están bien marcadas, reflejando la energía requerida para iniciar las reacciones electroquímicas en la triple fase (TPB). Estas pérdidas son similares en todas las configuraciones, indicando que la variación en la porosidad de los soportes no afecta significativamente la cinética de las reacciones.

En la región intermedia, dominada por las pérdidas óhmicas, el voltaje decae de forma aproximadamente lineal, lo cual es característico del comportamiento resistivo de los materiales de la celda. Este decaimiento también es parecido entre las configuraciones con distintas porosidades, lo que sugiere que los cambios en la microestructura de los soportes no alteran en gran manera la resistencia eléctrica global de la celda. Esto podría deberse a que las propiedades eléctricas del electrolito y los electrodos tienen un impacto predominante en las pérdidas óhmicas, en comparación con los soportes.

Finalmente, en cuanto a las pérdidas por concentración, que afectan la región de alta corriente, se observa que la curva correspondiente a la configuración con menor porosidad es la que decae primero y de forma más abrupta. Esto evidencia una limitante en la difusión de reactivos hacia los sitios activos

debido a la baja porosidad de los soportes. Por otro lado, las configuraciones con mayor porosidad presentan una caída más suave en esta región, lo que indica un transporte de reactivos más eficiente. Sin embargo, a medida que la porosidad de los soportes aumenta, las curvas tienden a parecerse más, lo que podría implicar que la mejora en la difusión de gases llega a un punto de saturación. Esto podría deberse a la gran diferencia de porosidades entre los electrodos ($\epsilon = 0.2$) y los soportes (Para $\epsilon > 0.5$), generándose posibles cuellos de botella en el transporte de reactivos.

En cuanto a la curva de potencia, se observa un máximo bien definido que corresponde a la corriente óptima para la operación eficiente de la celda. Este máximo es similar entre las configuraciones, lo que indica que las variaciones en la porosidad de los soportes no afectan drásticamente el desempeño global de la celda, aunque sí permiten un aumento en la potencia generada a medida que mejora el transporte de reactivos.

A continuación, en la Figura 44 y la Figura 45 se evidencia lo dicho anteriormente cerca de la similitud de las curvas a medida que la porosidad aumenta. En ellas se puede observar como a medida que aumenta las porosidades de los soportes, aumenta la concentración de reactivos en las interfaces de los electrodos con el electrolito. Ambas curvas de concentración de reactivos tienen un comportamiento asintótico, ajustándose bastante bien a una función sigmoïdal, con valores de R^2 bastante cercanos a 1 y errores pequeños. Esto valida el comportamiento la asintótico de los datos, evidenciando el cuello de botella en la difusión de reactivos, generado al aumentar demasiado la porosidad de los soportes.

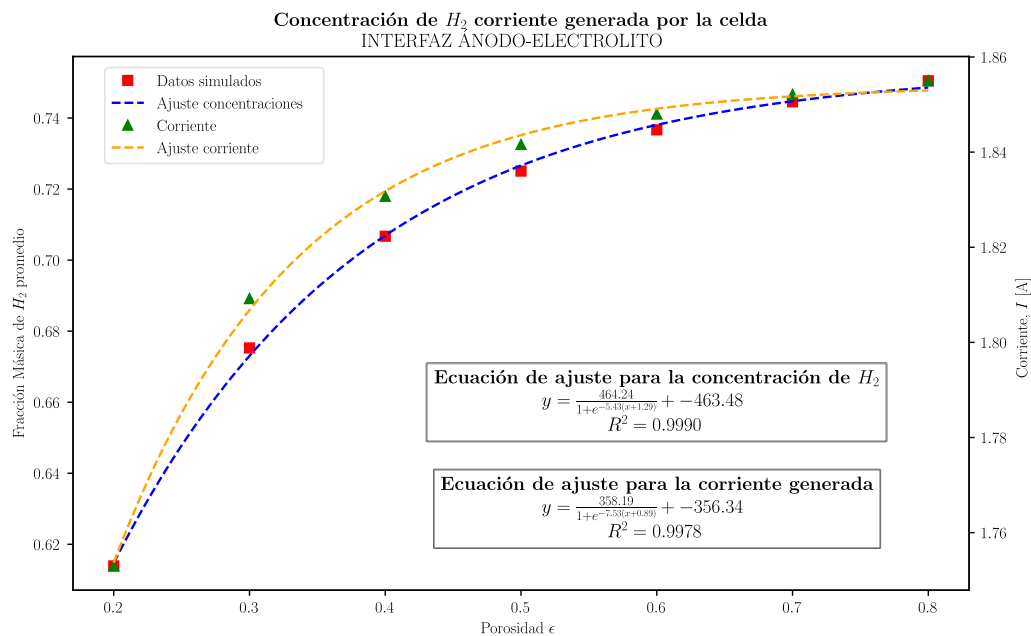


Figura 44. Concentración promedio de hidrógeno en la interfaz Ánodo-Electrolito y la corriente generada por la celda.

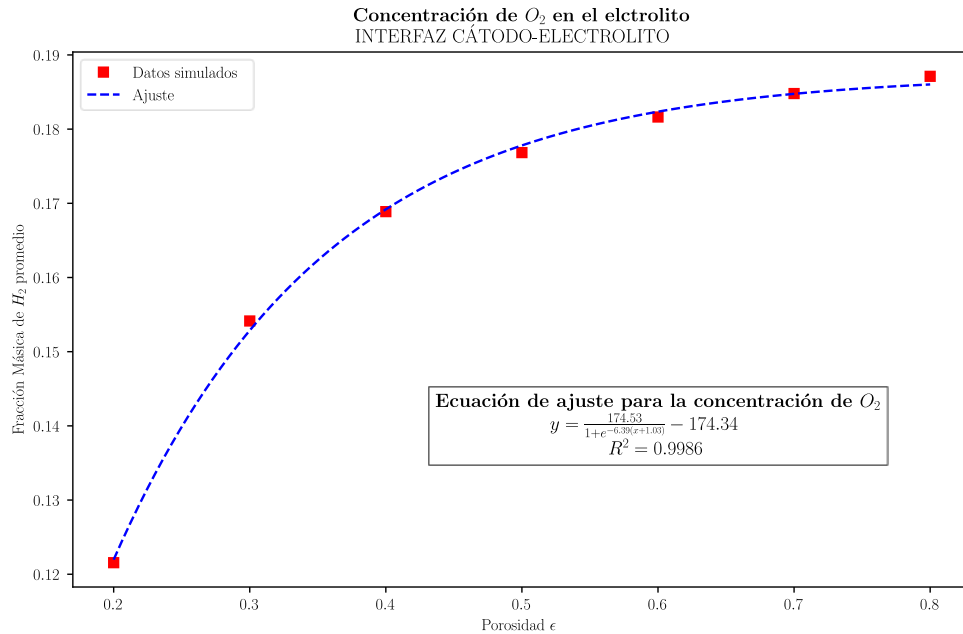


Figura 45. Concentración promedio de oxígeno en la interfaz Cátodo-Electrolito.

Este comportamiento también se observa claramente en la Figura 31 y la Figura 32, donde se analiza la distribución de reactantes (hidrógeno y oxígeno, respectivamente) en los soportes y electrodos a diferentes niveles de porosidad. A medida que la porosidad aumenta, se evidencia un incremento en la concentración de los reactantes dentro de los soportes, con un impacto menor pero visible en los electrodos. Este efecto es especialmente notorio en el rango de porosidad de 0.2 a 0.4, donde se forma una región de alta concentración con forma parabólica, resaltada en color rojo en las figuras.

Sin embargo, a medida que la porosidad sigue aumentando ($\epsilon < 0.4$), esta región de alta concentración se expande, pero pierde intensidad, lo que se traduce en una distribución más amplia pero menos definida. Esto sugiere que, aunque un mayor nivel de porosidad facilita el transporte de los reactantes, también puede generar efectos de saturación, disminuyendo la concentración máxima alcanzada en el material. Este comportamiento destaca la importancia de un diseño equilibrado de la porosidad entre soportes y electrodos para maximizar la difusión de los reactantes sin comprometer su concentración en las zonas activas.

Con respecto a la distribución de temperaturas en el canal de la celda, se observa en la Figura 34 y Figura 35, que las temperaturas varían principalmente a lo largo del eje longitudinal de la celda, generándose un calentamiento a medida que se consume el hidrógeno a lo largo del canal, lo que es físicamente concordante con la química de la celda, ya que la reacción electroquímica genera calor a medida que se consume el reactante.

En la Figura 34 se puede observar que externamente, el canal presenta una buena distribución de la temperatura, calentándose progresivamente a lo largo del eje, mientras que los perfiles mostrados en la Figura 35 muestran que al interior se pueden generar variabilidades en las temperaturas, sobre todo a medida que la porosidad de los soportes aumenta, permitiendo mayor paso de reactivos y por ende, mayor calentamiento óhmico.

5.1 Gradiente térmico en la celda

En relación con los gradientes térmicos presentes en la canal de la celda, la Figura 36 muestra cómo la temperatura promedio por plano XY varía a lo largo del eje Z. En los electrodos, la variación de temperatura sigue una tendencia lineal bien definida, mientras que, en los soportes, el ajuste lineal es válido en todos los nodos excepto en aquellos adyacentes a los canales de combustible y aire. Este comportamiento puede explicarse por la interacción térmica entre los gases y los soportes, como se observa en la Figura 35, donde las diferencias de temperatura entre los gases y la celda generan un enfriamiento localizado en los soportes. Este fenómeno provoca un salto térmico en los gráficos, especialmente cerca de los canales. Cabe destacar que el análisis detallado de este salto térmico requiere un refinamiento de la malla en esa región, lo cual no se implementó en este caso debido a que la malla se diseñó con mayor densidad hacia la zona del electrolito, en lugar de los soportes.

Por otro lado, la Figura 37 analiza las pendientes de los ajustes lineales obtenidos, que corresponden al gradiente térmico promedio en la dirección vertical, en función de la porosidad de los soportes. Los resultados muestran que el gradiente térmico aumenta con el incremento de la porosidad, lo cual es un comportamiento esperado. Sin embargo, se observa un comportamiento diferenciado entre los soportes y los electrodos: en los soportes, el crecimiento del gradiente térmico es acelerado, mientras que en los electrodos este crecimiento es más moderado y tiende a desacelerarse.

El comportamiento descrito anteriormente puede explicarse por varios factores. En los soportes, el aumento de porosidad reduce la proporción de material sólido, lo que disminuye la conductividad térmica y facilita la acumulación de calor en ciertas regiones. Además, una mayor porosidad permite un mayor flujo de reactantes, intensificando las reacciones electroquímicas y, por ende, generando más calor. Por el contrario, en los electrodos, la porosidad se mantiene fija, por lo que la conducción del no debiera verse afectada en gran manera por cambios en la porosidad del soporte.

La Figura 44 y la Figura 45, sumadas al análisis previo sobre el transporte y difusión de reactivos, junto con los cuellos de botella observados, refuerzan esta idea, ya que las curvas de concentración y de corriente presentan comportamientos asintóticos similares a medida que la porosidad de los soportes aumenta. Este efecto evidencia que el transporte de reactivos hacia las zonas activas mejora con el incremento de la porosidad, lo que explica el mayor calentamiento observado en los electrodos.

Es importante señalar que los gradientes térmicos en la celda, como se observa en la Figura 37, no superan los 10 [°C/cm], lo que indica un bajo riesgo para la integridad estructural de la celda. En los electrodos, los gradientes se mantienen bajos y crecen desaceleradamente sin superar los 10 [°C/cm], minimizando las tensiones térmicas en los componentes cerámicos. En los soportes, aunque el gradiente crece más aceleradamente, esto no representa un problema crítico debido a la alta tolerancia térmica de los materiales metálicos.

En cambio, en las interfaces de los electrodos, según lo observado en la Figura 42 y en la Figura 43, los gradientes térmicos son mucho mayores.

En la Figura 46 y en la Figura 47 se grafican los gradientes térmicos máximos observados en cada mapa de contorno (Ver Figura 42, Figura 43 Y anexo ANEXO VI), para las interfaces Ánodo-

Electrolito y Cátodo-Electrolito (Para las demás interfaces revisar ANEXO VII). Los gradientes térmicos fueron calculados mediante diferencias finitas, según lo explicado en la sección 2.8 Caso de estudio, con las temperaturas nodales de cada interfaz.

Gradiente Térmico Máximo en función de la porosidad de los soportes
INTERFAZ ÁNODO-ELECTROLITO

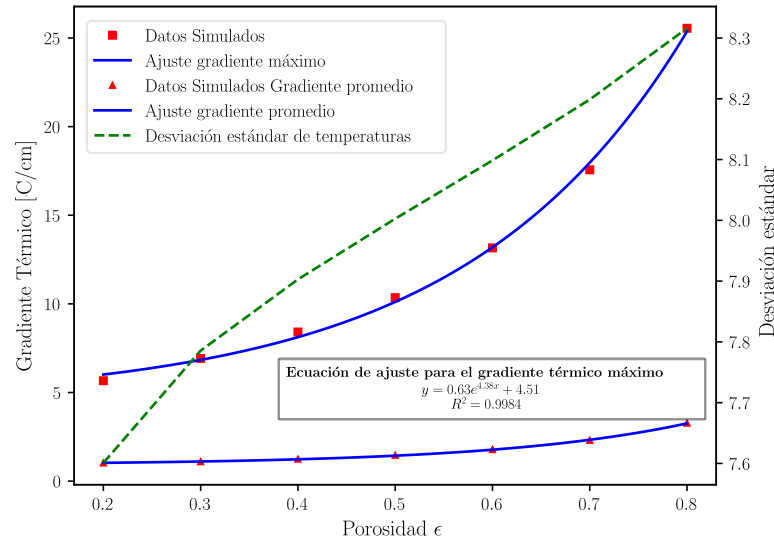


Figura 46. Gradiente térmico máximo en la interfaz Ánodo-Electrolito.

Gradiente Térmico Máximo en función de la porosidad de los soportes
INTERFAZ CÁTODO-ELECTROLITO

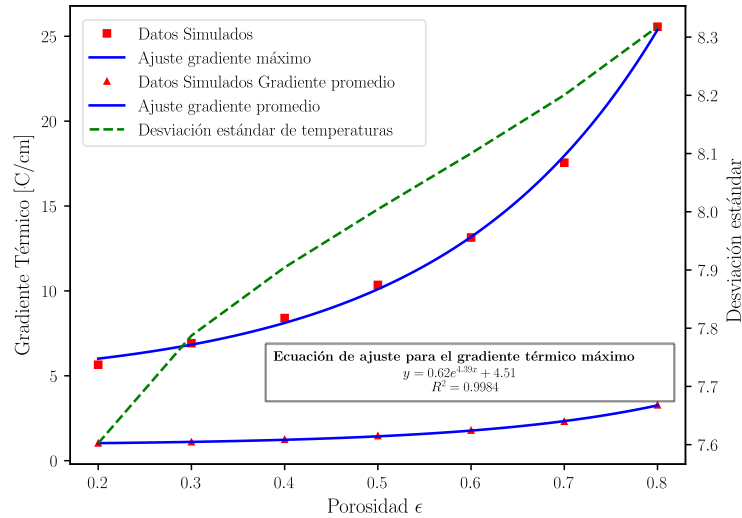


Figura 47. Gradiente térmico máximo en la interfaz Cátodo-Electrolito

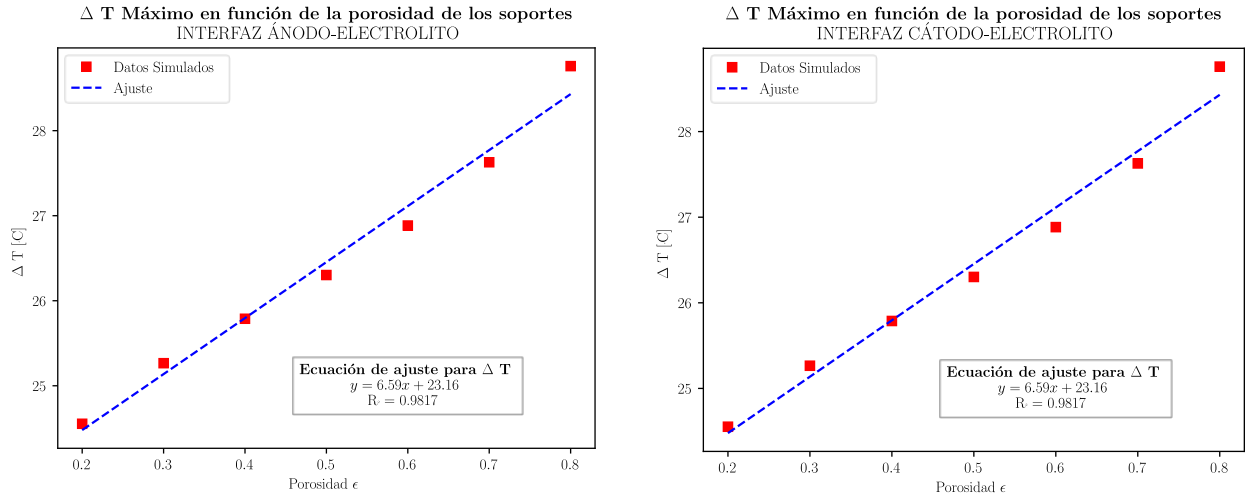


Figura 48. ΔT máximo en las interfaces Ánodo-Electrolito y Cátodo-Electrolito.

Los resultados presentados en la Figura 46 y en la Figura 47 destacan un aspecto clave en el comportamiento térmico de la celda. Si bien las temperaturas globales no aumentan de forma significativa con el incremento de la porosidad de los soportes, la desviación estándar de las temperaturas aumenta de manera consistente. Este incremento sugiere una mayor dispersión térmica en la celda, es decir, una distribución más heterogénea de las temperaturas. Este fenómeno es relevante, ya que una mayor dispersión puede indicar zonas localizadas de mayor calentamiento o enfriamiento, lo que podría impactar la operación uniforme de la celda.

Además, el gradiente térmico promedio también experimenta un aumento, aunque en menor proporción en comparación con el gradiente máximo. Esto refuerza la idea de que, a medida que la porosidad de los soportes crece, las variaciones térmicas dentro de la celda se vuelven más marcadas, incluso si las temperaturas promedio no presentan incrementos significativos. En conjunto, estos resultados evidencian que el aumento de porosidad no solo afecta el transporte de reactivos, como se ha discutido previamente, sino también la distribución térmica en las distintas zonas de la celda, lo que podría ser crítico para la estabilidad y durabilidad de las celdas.

El aumento en la desviación estándar de las temperaturas y la dispersión térmica observada con el incremento de la porosidad de los soportes puede atribuirse a factores relacionados con el transporte de reactivos y las propiedades térmicas de los materiales. Al incrementarse la porosidad, se mejora el flujo de reactivos hacia los electrodos, intensificando las reacciones electroquímicas y generando más calor en las interfaces ánodo-electrolito y cátodo-electrolito, lo que resulta en un calentamiento más localizado. Paralelamente, la mayor porosidad reduce la proporción de material sólido en los soportes metálicos, disminuyendo su capacidad de conducir y redistribuir el calor, según lo mencionado también por Reiss et. al. [28], lo que afecta directamente la conductividad térmica en la interfaz soporte-electrodo. Esto explica el incremento en los gradientes térmicos promedio y máximos, especialmente en las regiones de interfaz.

Adicionalmente, los gradientes térmicos más elevados se concentran en la zona del INLET (Ver Figura 42, Figura 43 y ANEXO VI), donde ingresan reactivos más fríos y se inician las reacciones electroquímicas, generando un diferencial térmico significativo. Este contraste entre los gases que

entran más fríos y los electrodos calentados, combinado con la pérdida de efectividad del soporte metálico al aumentar su porosidad, limita la disipación de calor en esta región crítica. Por tanto, la zona del INLET destaca como un punto crucial tanto para el transporte reactivo como para el manejo térmico de la celda, sugiriendo que debe considerarse en futuros diseños.

Estos resultados enfatizan que la porosidad de los soportes afecta no solo el transporte de reactivos sino también la distribución térmica, destacando la necesidad de un balance óptimo para maximizar el rendimiento electroquímico sin comprometer la estabilidad térmica.

CAPÍTULO VI: Conclusiones

Este trabajo permitió identificar configuraciones óptimas y sus implicaciones para el rendimiento térmico y electroquímico. Los resultados confirman que, a partir de una porosidad de 0.4 en los soportes metálicos, los gradientes térmicos exceden los 10 °C/cm, lo que puede comprometer la estabilidad estructural de la celda en aplicaciones prácticas. Asimismo, las curvas de polarización y de potencia revelaron que, aunque un aumento en la porosidad mejora la difusión de reactivos, este efecto se satura más allá de dicho umbral, debido a cuellos de botella formados en las interfaces electrodos-electrolito.

Desde la perspectiva térmica, el aumento de porosidad reduce la capacidad de disipación térmica de los soportes, intensificando la dispersión de gradientes térmicos en las interfaces críticas, como ánodo-electrolito y cátodo-electrolito. Se encontró una relación exponencial para los gradientes locales en función de la porosidad de los soportes. Sin embargo, las simplificaciones empleadas en este estudio, como la modelación uniforme de la porosidad y el uso del modelo de Bruggeman para la tortuosidad, pueden subestimar los efectos locales asociados con la microestructura heterogénea de los materiales.

En cuanto a la difusión de reactivos, se observó que, aunque el aumento en la porosidad de los soportes mejora el transporte hacia el electrolito, porosidades excesivas generan cuellos de botella en las interfaces ánodo-electrolito y cátodo-electrolito. Esto resulta en un comportamiento asintótico tanto de la corriente generada como de la concentración de reactivos en estas zonas críticas. Los resultados subrayan la importancia de optimizar parámetros macroscópicos, como la porosidad y el flujo de gases, para equilibrar el transporte y evitar limitaciones estructurales, destacando también la importancia de la microestructura porosa de los materiales

Se recomienda una configuración de porosidad de 0.4 para los soportes metálicos, dado que esta proporciona un balance adecuado entre la distribución de temperatura y el transporte de reactivos, manteniendo los gradientes térmicos dentro de límites seguros y optimizando el rendimiento de la celda.

6.1 Limitaciones

Entre las limitaciones principales se encuentra la simplificación del electrolito como una barrera ideal delgada que realiza el módulo de ANSYS *SOFC With Unresolved Electrolyte*, lo que excluye detalles microestructurales, así como también el transporte de iones, los que podrían influir en el comportamiento de la celda. Además, el modelo simplifica el flujo de gases utilizando modelos de transporte en medios porosos, así como también las reacciones electroquímicas, utilizando aproximaciones macroscópicas para dichas reacciones, excluyendo detalles microscópicos que pueden presentarse en pequeñas escalas al interior de los materiales, como alteración en la velocidad de las reacciones dependientes de condiciones locales como temperatura y presión.

La microestructura de los soportes y electrodos se modeló de forma uniforme, suponiendo una distribución homogénea de tamaños y formas de poros. Esto omite las anisotropías que, según estudios previos, pueden influir significativamente en las propiedades de transporte térmico y la conductividad. Asimismo, la exclusión de la difusión de Knudsen, aunque razonable para poros grandes en el caso

de los soportes, podría subestimar los efectos locales en zonas donde los poros se reduzcan o cambie la conectividad.

La resistencia específica de área (REA) se trató como un valor constante, ignorando la dependencia de las interfaces y posibles efectos de degradación a largo plazo. También se asumieron propiedades térmicas y eléctricas constantes con la temperatura, lo que limita la capacidad del modelo para reflejar el comportamiento real de los materiales en condiciones de operación. Por último, el acero AISI 430 fue modelado en estado puro, sin considerar la oxidación y volatilización del cromo, que pueden alterar la conductividad eléctrica y térmica del soporte.

6.2 Mejoras, trabajos futuros y proyecciones

Dadas las limitaciones y las implicancias descritas, se recomienda validar experimentalmente los resultados obtenidos para comparar con la realidad y confirmar la precisión del modelo CFD utilizado. La validación experimental es especialmente relevante debido a la escasa disponibilidad en la literatura de estudios que aborden explícitamente la relación entre la variación de la porosidad de los soportes y la distribución de temperaturas. Una revisión bibliográfica más exhaustiva sería fundamental para identificar cualquier dato complementario que refuerce el análisis teórico y numérico.

Además, se recomienda realizar un refinamiento de las interfaces, disminuyendo el tamaño de los elementos en el plano XY, con el fin de realizar una comparación de resultados y comprobar si existe una mejora en la captura de los gradientes térmicos en dichas interfaces.

En términos de proyecciones, los datos de temperatura obtenidos en este estudio podrían ser utilizados para realizar simulaciones de esfuerzos térmicos, con el objetivo de identificar zonas críticas y complementar el análisis actual. Esto fortalecería el diseño de las celdas al abordar no solo aspectos térmicos y electroquímicos, sino también estructurales.

Aunque estudios como los de Zhang et al. [26], Reza et al. [27] y Reiss et al. [28] destacan cómo las heterogeneidades microestructurales, como la distribución desigual de poros y tortuosidad, pueden generar anisotropías térmicas y másicas que influyen en el transporte reactivo y en la eficiencia del sistema, estos no se enfocan directamente en la relación porosidad-temperatura. Por ello, sería beneficioso desarrollar modelos que representen la porosidad de manera variable, reflejando mejor las complejidades microestructurales.

Para mejorar los experimentos futuros, se recomienda:

- Obtener valores específicos de REA para cada interfaz a fin de lograr una modelación más precisa.
- Incluir el electrolito como dominio en el modelo computacional, lo que permitiría una representación más realista de la transferencia de calor y del transporte iónico, además de una modelación electroquímica más detallada.
- Estratificar las capas porosas asignando distintas configuraciones de porosidad para reflejar mejor la heterogeneidad de los materiales.

- Estratificar la conductividad térmica de los soportes, considerando efectos como la oxidación y la volatilización de cromo, que impactan tanto la REA como la conductividad térmica de los materiales.

Para lograr llevar a cabo estas mejoras, se recomienda utilizar computadores con mejor capacidad computacional, con el fin de lograr simular exitosamente y en un tiempo prudente los cambios en las escalas más pequeñas, permitiendo estratificar de mejor manera el mallado y refinar aún más zonas de mayor interés.

Finalmente, los resultados obtenidos en este trabajo subrayan la importancia de desarrollar modelos computacionales robustos y fiables que reflejen de manera precisa la realidad. Esto permitiría optimizar el diseño de las celdas SOFC, reduciendo la necesidad de realizar experimentos físicos costosos y demandantes en recursos monetarios y humanos para cada nueva configuración.

Referencias

- [1] E. T. A. Boudghene Stambouli, «Solid oxide fuel cells (SOFCs): a review of an environmentally clean and efficient source of energy,» *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 6, pp. 433-455, 2002.
- [2] R. T.-M. John Bateman, «International report confirms record-high global temperatures, greenhouse gases in 2023,» *NOAA*, 22 08 2024.
- [3] Ministerio de Energía, Gobierno de Chile, «Estrategia Nacional de Hidrógeno Verde,» Santiago, 2020.
- [4] T. B. J. Blunden, «State of the Climate in 2023,» *Bulletin of the American Meteorological Society*, vol. 105, n° 8, 2024.
- [5] ONU Cambio Climático, «unfccc.int,» [En línea]. Available: <https://unfccc.int/es/acerca-de-las-ndc/el-acuerdo-de-paris>. [Último acceso: 2024 08 30].
- [6] Gobierno de Chile, «Estrategia Climática de largo Plazo de Chile,» Santiago, 2021.
- [7] A. A. Kulikovskiy, *Analytical Modeling of Fuel Cells*, Elsevier, 2019.
- [8] US Department of Energy, «energy.gov,» 11 2015. [En línea]. Available: <https://www.energy.gov/eere/fuelcells/articles/fuel-cells-fact-sheet#:~:text=A%20conventional%20combustion-based%20power,and%20even%20higher%20with%20cogeneration>). [Último acceso: 2024 08 30].
- [9] S.-W. C. W. G. C. F. B. P. Ryan O'Hayre, *Fuel Cell Fundamentals*, New jersey: John Wiley & Sons, Inc., 2016.
- [10] Y. Q. Y. Z. C. H. D. D. W. Z. Zezhi Zeng, «A review of heat transfer and thermal management methods for temperature gradient reduction in solid oxide fuel cell (SOFC) stacks,» *Applied Energy*, vol. 280, 2020.
- [11] Y. W. ., a. Y. S. Jiawei Ren, «Numerical simulation and thermal stress analysis of direct internal reforming SOFCs,» *INTERNATIONAL JOURNAL OF GREEN ENERGY*, vol. 19, n° 4, p. 399–409, 2022.
- [12] M. P. K. K. A. Al-Masri, «3D multiphysics modeling aided APU development for vehicle applications: A thermo-structural investigation,» *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 44, n° 23, pp. 12094-12107, 2019.

- [13] K. S. B. R. N Manjunath, «Thermal expansion of Crofer 22 APU steel used for SOFC interconnect using in-situ high temperature X-ray diffraction,» *Material Today*, 2023.
- [14] L. Z. Kai Xu, «Long-Term Oxidation Studies on Porous Stainless Steel 430L Substrate Relevant to Its Application in Metal-Supported SOFC,» *Metals*, vol. 14, n° 475, 2024.
- [15] C. Pacheco, «MODELACIÓN DEL EFECTO DEL % DE POROSIDAD DE UN ACERO FERRÍTICO Y SU IMPLICANCIA SOBRE LA DISTRIBUCIÓN DE TEMPERATURAS EN UNA CELDA DE COMBUSTIBLE DE ÓXIDO SÓLIDO SOPORTADAS SOBRE UNA PLACA METÁLICA (METAL SUPPORTED SOLID OXIDE FUEL CELLS, MS-SOFC),» Valdivia, 2021.
- [16] Y. S. L. A. O. V. R. H. P. H. M. Y. M. A. S. A. K. A. Anitha Dhanasekaran, «Computational Fluid Dynamics for Protonic Ceramic Fuel Cell Stack modelling: A Brief Review,» *Energies*, vol. 16, n° 208, 2022.
- [17] B. S. Fereshteh Salimi Nanadegani, «Review of exergy and energy analysis of fuel cells,» *International journal of Hydrogen*, vol. 48, pp. 32875-32942, 2023.
- [18] C. H. D. X. H. Z. Y. Y. G. L. Bingyao Yi, «A numerical study of the performance of solid oxide fuel cell with bi-layer interconnector,» *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 87, pp. 1233-1244, 2024.
- [19] W. L. D. Y. M. L. R. C. I.-s. L. Y.-S. L. c. J. H. Inseo Woo, «Electrochemical performance analysis of a commercial-scale planar solid oxide fuel cell stack and its sensitivity to operating parameters,» *Jorunal of Power Sources*, vol. 592, 2024.
- [20] W. K. W. Y. C. J. A. B. T. S. WANG Mingyuan, «Effect of Operation Parameters on the Thermal Characteristics in a Planar Solid Oxide Fuel Cell,» *Journal of Thermal Science*, vol. 33, n° 5, pp. 1974-1989, 2024.
- [21] L. O. J. S. J.O. Ceballos, «Numerical simulation of a PEM fuel cell: Effect of tortuosity parameters on the construction of polarization curves,» *Intenrational journal o f hydrogen energy*, vol. 47, pp. 30291-30302, 2022.
- [22] A. A. F. A. A. C. N. D. C. P. G. K. Iliya Krastev Iliev, «Computational and Experimental Research on the Influence of Supplied Gas Fuel Mixture on High-Temperature Fuel Cell Performance Characteristics,» *Energies*, vol. 17, n° 11, 2024.
- [23] M.-H. C. Tsung Leo Jiang, «Thermal-stress analyses of an operating planar solid oxide fuel cell with the bonded compliant seal design,» *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 34, pp. 8229-8234, 2009.

- [24] A. C. A. D. Jacopo Neri, «Experimental and Model Investigation of a Solid Oxide Fuel Cell Operated Under Low Fuel Flow Rate,» *Journal of The Electrochemical Society*, vol. 170, n° 12, 2023.
- [25] B. Ghorbani, «Modelling and Diagnosis of Solid Oxide Fuel Cell,» Simon Fraser University, Burnaby, Canadá, 2021.
- [26] D. Y. M. X. A. N. E.-A. T. L. J. T. S. I. M. A. Xiaoqiang Zhang, «Analysing Tortuosity for Solid Oxide Fuel Cell Anode Material: Experiments and Modelling,» *Journal of The Electrochemical Society*, vol. 170, 2023.
- [27] S. S. S. V. A. R. H. M. S. Amir Reza Razmi, «Modeling and microstructural study of anode-supported solid oxide fuel cells: Experimental and thermodynamic analyses,» *International Journal of hydrogen Energy*, vol. 54, n° 7, pp. 613-634, 2024.
- [28] G. Reiss, H. Fransen, W. Branstatter y A. Weber, «Numerical evaluation of micro-structural parameters of porous supports in metal-supported solid oxide fuel cells,» *Journal of Power Sources*, vol. 273, pp. 1006-1015, 2015.
- [29] R. O. JOSEPH D. FEHRIBACH, «TRIPLE PHASE BOUNDARIES IN SOLID-OXIDE CATHODES,» *Society for Industrial and Applied Mathematics*, vol. 70, n° 2, pp. 510-530, 2009.
- [30] E. S. M. Y. W. B. S. B. A. H. Hui Hui Lim, «Ceramic Nanocomposites for Solid Oxide Fuel Cells,» *Sol-gel Based Nanoceramic Materials: Preparation, Properties and Applications*, pp. 157-183, 2016.
- [31] T. M. M. M. T. W. Barry M O'Connell, «Factors that affect mass transport from drug eluting stents into the artery wall,» *Biomed Eng Online*, 2010.
- [32] D. H. Jeon, «The impact of rib structure on the water transport behavior in gas diffusion layer of polymer electrolyte membrane fuel cells,» *Journal of the Energy Institute*, vol. 92, n° 3, pp. 755-767, 2019.
- [33] ANSYS, Inc., Ansys Fluent Tutorial Guide, Canonsburg, 2023.
- [34] C. E. W. R. E. W. G. L. R. James R. Welty, *Fundamentals of Momentum, Heat and Mass Transfer*, Oregon: John Wiley & Sons, Inc., 2008.
- [35] H. Ebrahimifar y M. Zandrahimi, «Influence of oxide scale thickness on electrical conductivity of coated AISI 430 steel for use as interconnect in solid oxide fuel cells,» *Ionics*, vol. 18, pp. 615-624, 2012.

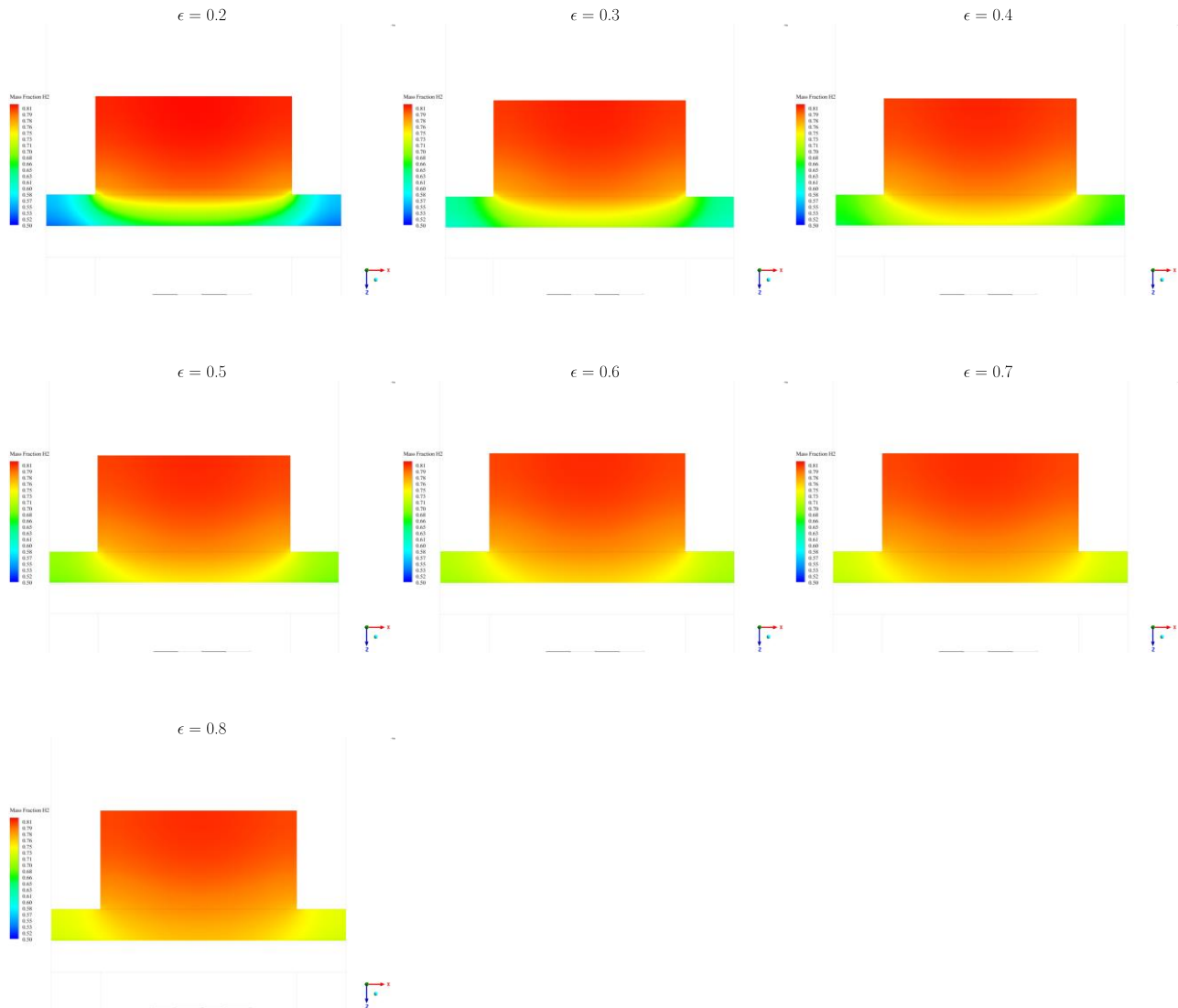
- [36] T. C. J. S. J. F. M.J. Reddy, *International journal o f hydrogen energy*, vol. 48, pp. 12893-12904, 2023.
- [37] M. Z. Hadi Ebrahimifar, «Mn coating on AISI 430 ferritic stainless steel by pack cementation method for SOFC interconnect applications,» *Solid State Ionics*, vol. 183, pp. 71-79, 2011.
- [38] thyssenkrupp AG, «thyssenkrupp-materials.co.uk,» [En línea]. Available: <https://www.thyssenkrupp-materials.co.uk/stainless-steel-430-14016.html>. [Último acceso: 2024 10 25].
- [39] V. Laue, F. Roder y I. Krewer, «Joint structural and electrochemical modeling: Impact of porosity on lithium-ion battery performance,» *Electrochimica Acta*, vol. 314, pp. 20-31, 2019.
- [40] ANSYS Inc., «ansyshelp.ansys.com,» 2024. [En línea]. Available: https://ansyshelp.ansys.com/public/account/secured?returnurl=////////Views/Secured/corp/v242/en/flu_th/flu_fuelcells_sec_sofc_model.html. [Último acceso: 2024 10 1].
- [41] J. Nordstrom, «Well Posed Problems and Boundary Conditions in Computational Fluid Dynamics,» 2015.
- [42] F-Chart Software, «Engineering Equation Solver (EES),» [En línea]. Available: <https://www.fchartsoftware.com/>.
- [43] R. A. L. H. M. M. R. S. B. v. W. Bengt Andersson, *Computational Fluid Dynamics for Engineers*, New York: Cambridge University Press, 2012.
- [44] M. K. R. S.-W. Majid Ghassemi, *Fundamentals of Heat and Fluid Flow in High Temperature Fuel Cells*, Chennai: ElSevier, 2020.
- [45] S. A. T. S. A. K. Darjat, «Designing Hydrogen and Oxygen Flow Rate Control on a Solid Oxide Fuel Cell Simulator Using the Fuzzy Logic Control Method,» *Processes*, vol. 8, n° 154, 2020.
- [46] M. M. O. U. A. B. Y. K. T. H. Y. Tugce Uzun, «Effect of cold sintering on the sintering shrinkage matching of NiO-GDC anode with GDC electrolytes in making anode-supported solid oxide fuel cells,» *Solid State Ionics*, vol. 408, 2024.
- [47] B. H. Y. W. Y. L. Y. S. W. G. X. Z. M. C. S. C. S. Nan Huang, «On the dependence of interfacial resistance on contact materials between cathode and interconnect in solid oxide fuel cells,» *International journal of Hydrogen*, vol. 46, n° 38, pp. 20078-20086, 2021.
- [48] A. M. M. R. S. M. I. R. N. A. B. N. S. K. Nurul Ashikin Mohd Nazrul Aman, «A short review on the modeling of solid-oxide fuel cells by using computational fluid dynamics: assumptions and boundary conditions,» *Mechanical Engineering*, vol. 10, n° 5, pp. 87-92, 2018.

- [49] L. O. Ameztegui, «DESARROLLO DE CELDAS DE COMBUSTIBLE DE TIPO SOFC TUBULARES DE SOPORTE METÁLICO,» Universidad de Navarra, Donostia, España, 2013.
- [50] D. & R. J. & N. R. & B. C. & T. F. & S. W. & M. N. & H. L. & N. A. & O. A. & G. O. & B. M. Udomsilp, «Metal-Supported Solid Oxide Fuel Cells with Exceptionally High Power Density for Range Extender Systems,» *Cell Reports Physical Science*, vol. 1, n° 100072, 2020.

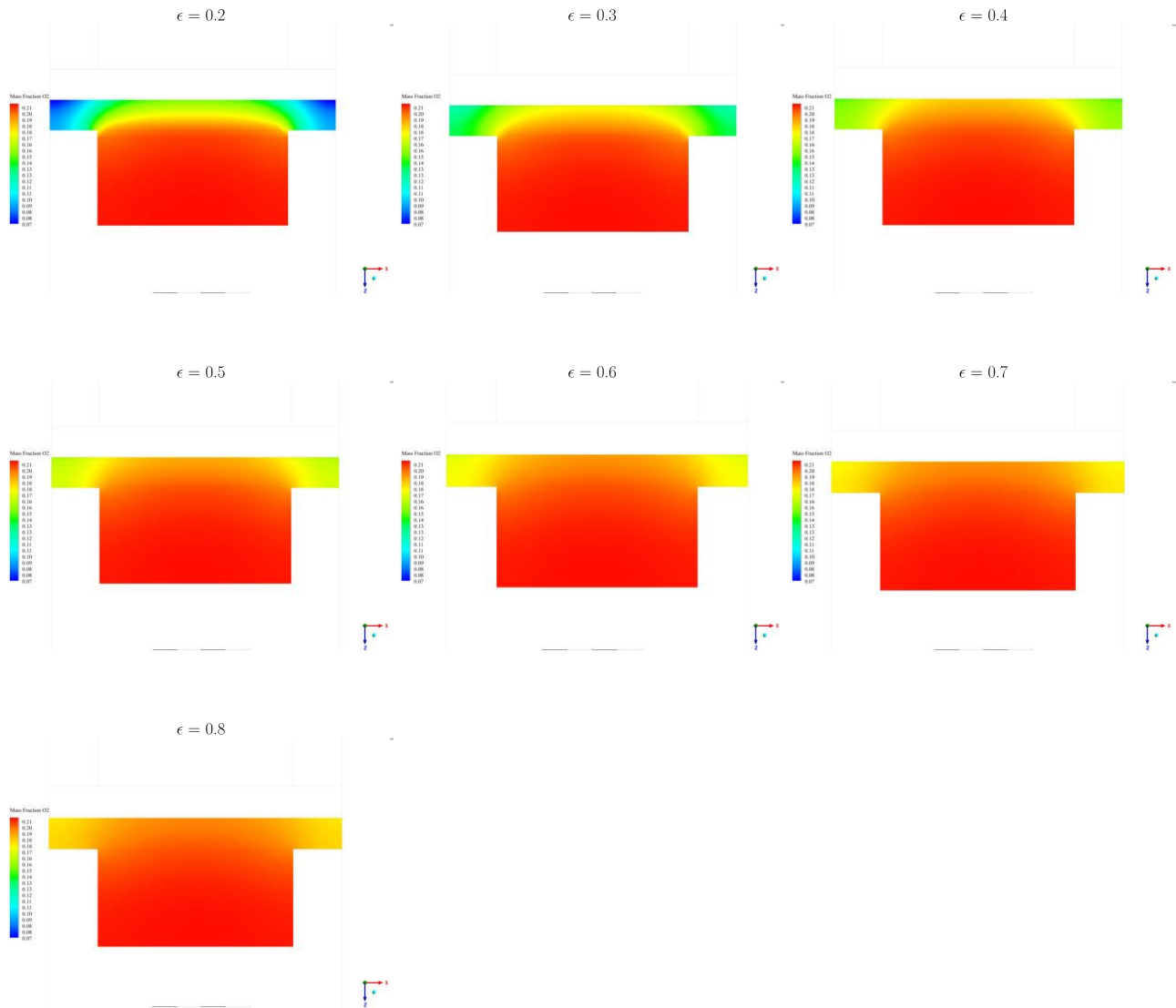
ANEXOS

8.1 ANEXO I: Concentración de reactantes a través de las capas porosas.

Concentración de H_2 a lo través de la celda
 Canal-Soporte-Ánodo plano XZ medio de la celda



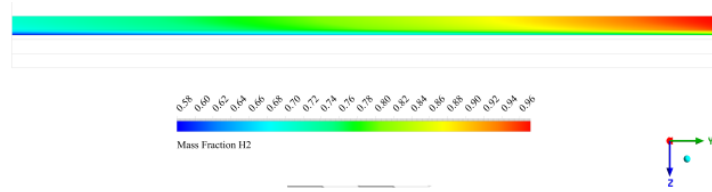
Concentración de O_2 a lo través de la celda
Canal-Soporte-Cátodo plano XZ medio de la celda



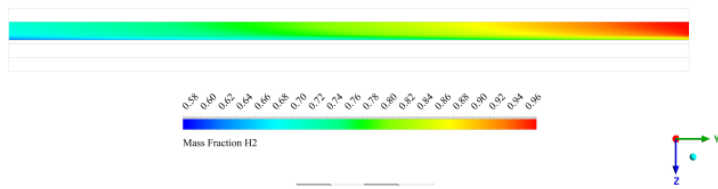
8.2 ANEXO II: Perfil de concentración de Reactantes a lo largo de la celda.

Concentración de H_2 a lo largo de la celda
Canal-Soporte-Ánodo

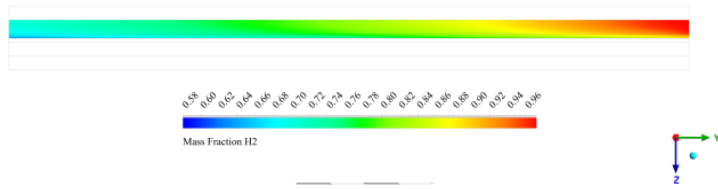
$\epsilon = 0.2$



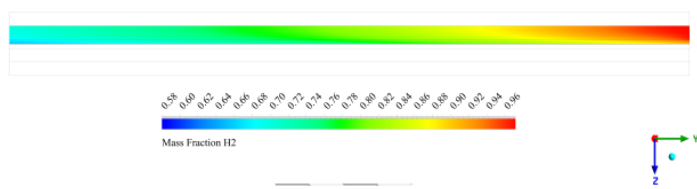
$\epsilon = 0.3$



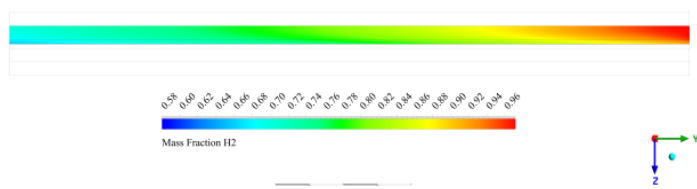
$\epsilon = 0.4$



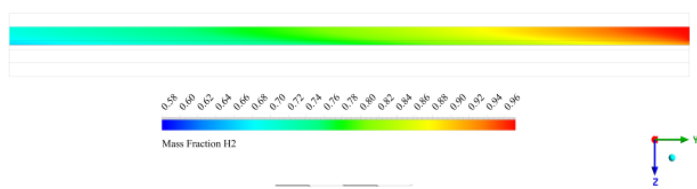
$\epsilon = 0.5$



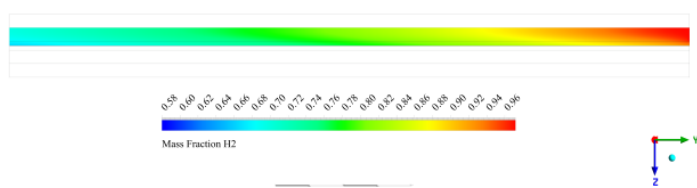
$\epsilon = 0.6$



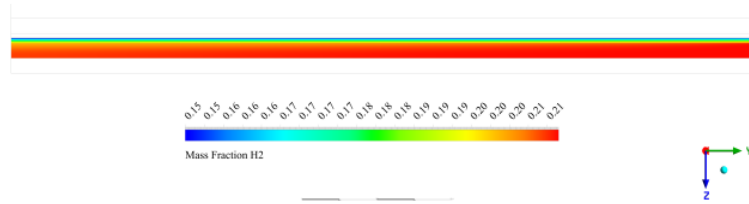
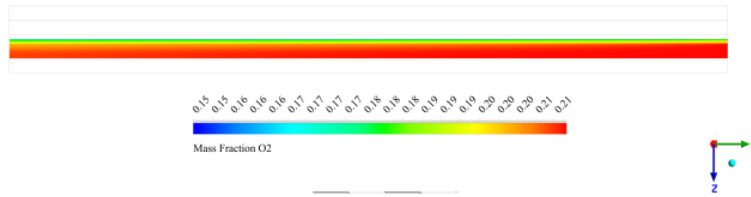
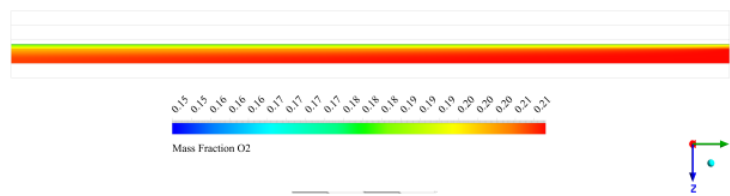
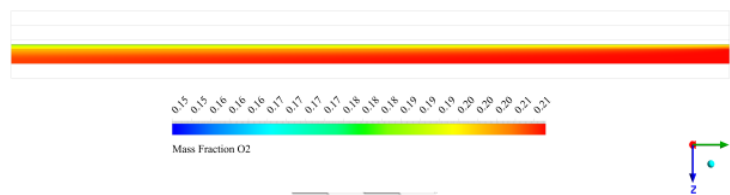
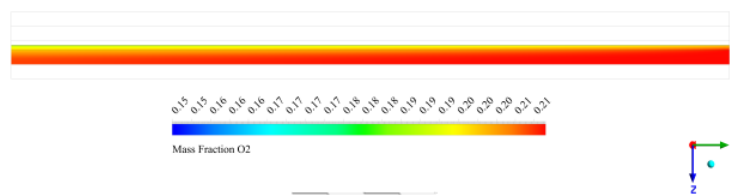
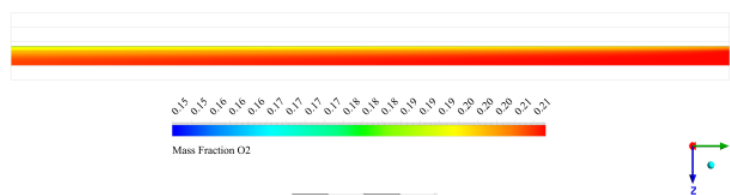
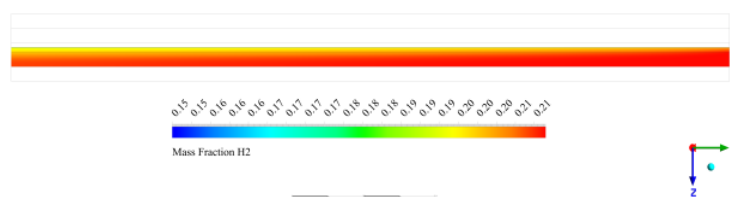
$\epsilon = 0.7$



$\epsilon = 0.8$

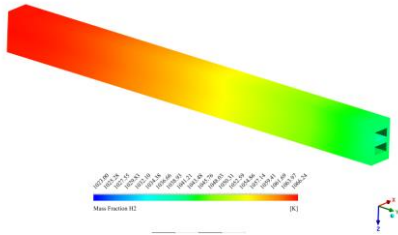
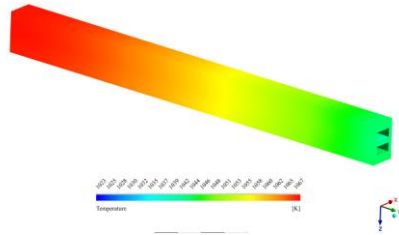
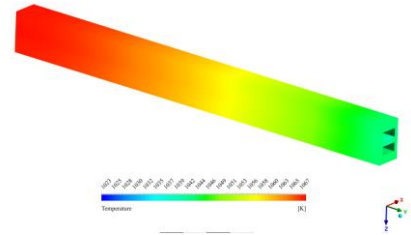
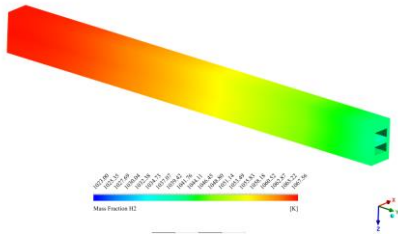
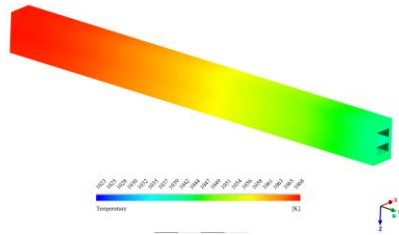
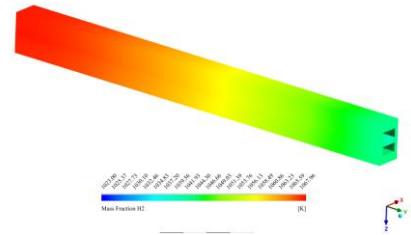
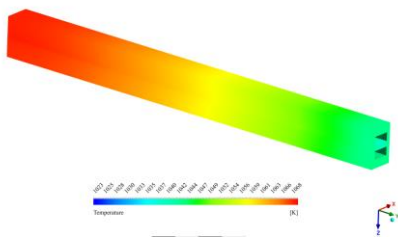


Concentración de O_2 a lo largo de la celda Canal-Soporte-Cátodo

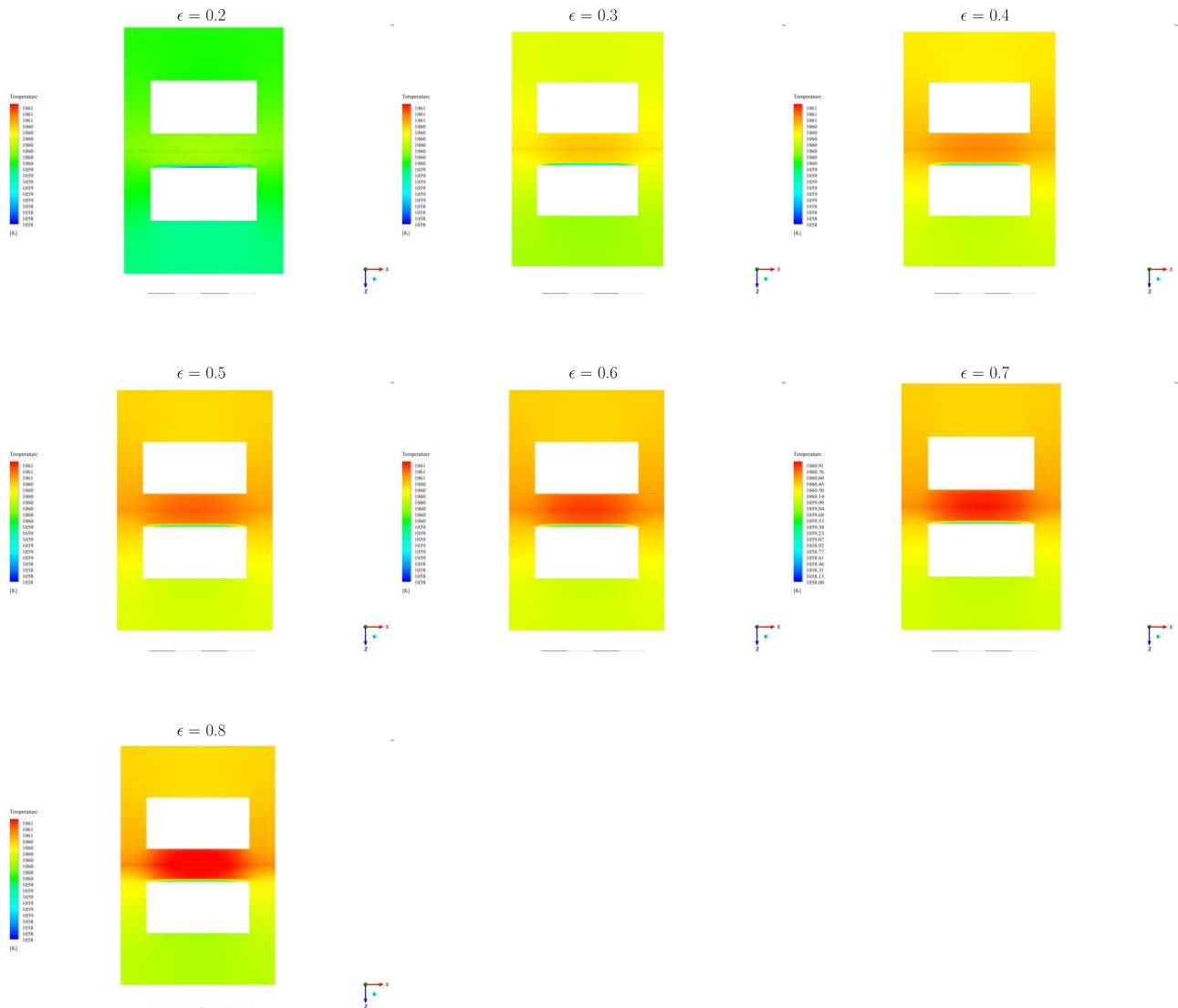
 $\epsilon = 0.2$  $\epsilon = 0.3$  $\epsilon = 0.4$  $\epsilon = 0.5$  $\epsilon = 0.6$  $\epsilon = 0.7$  $\epsilon = 0.8$ 

8.3 ANEXO III: Temperaturas de la celda

Temperatura de la celda

 $\epsilon = 0.2$  $\epsilon = 0.3$  $\epsilon = 0.4$  $\epsilon = 0.5$  $\epsilon = 0.6$  $\epsilon = 0.7$  $\epsilon = 0.8$ 

Temperatura de la celda Plano XZ medio de la celda

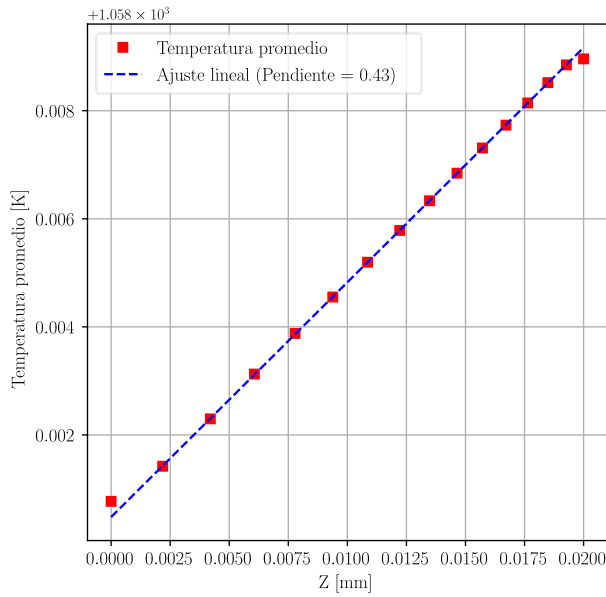


8.4 ANEXO IV: Gráficos de temperaturas promedio a lo largo del eje Z

ÁNODO

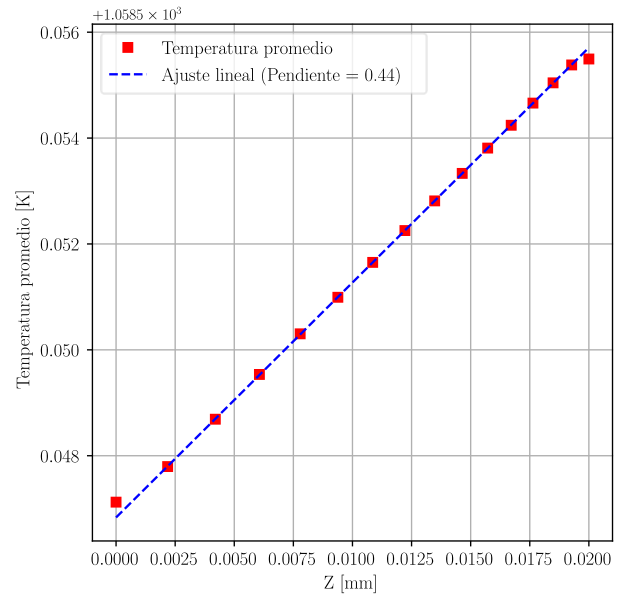
$\epsilon = 0.2$

Temperatura promedio por plano vs Z
ÁNODO



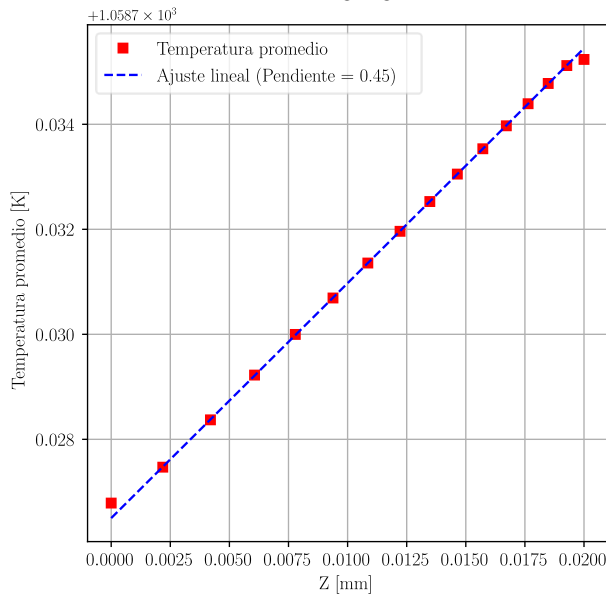
$\epsilon = 0.3$

Temperatura promedio por plano vs Z
ÁNODO



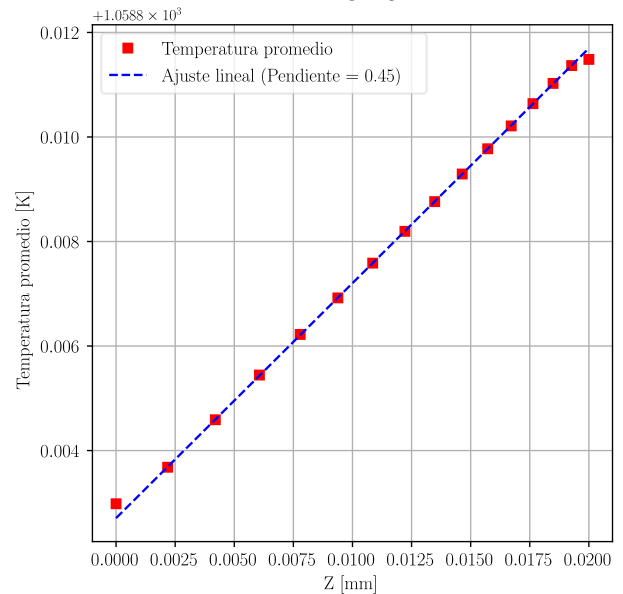
$\epsilon = 0.4$

Temperatura promedio por plano vs Z
ÁNODO



$\epsilon = 0.5$

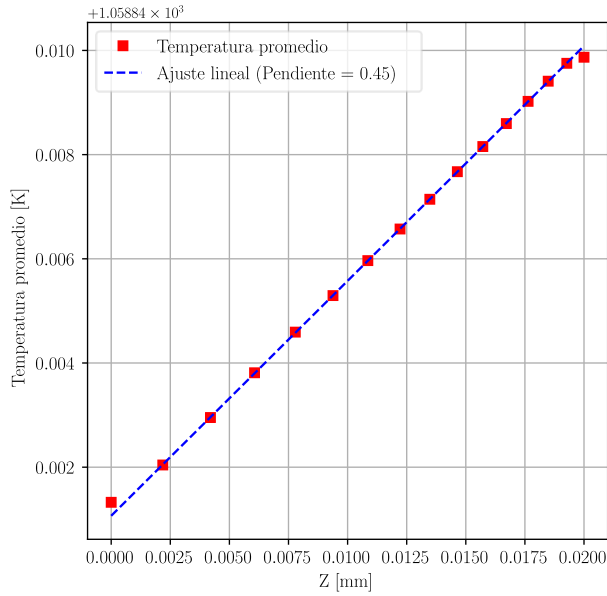
Temperatura promedio por plano vs Z
ÁNODO



ANODO

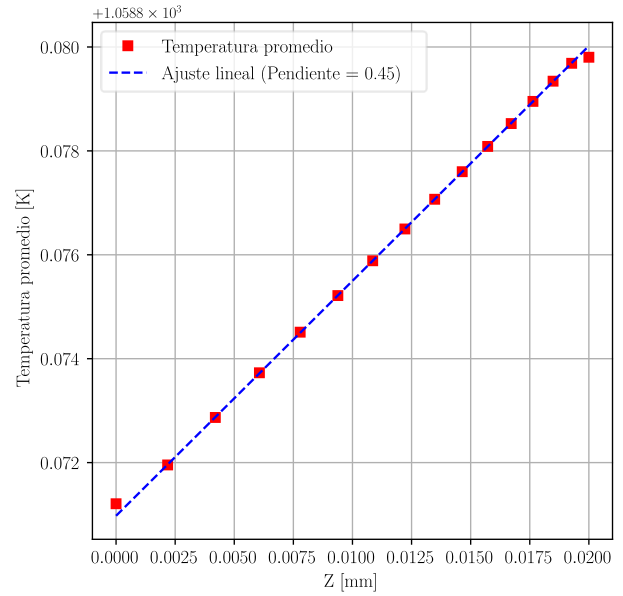
$$\epsilon = 0.6$$

Temperatura promedio por plano vs Z
ÁNODO



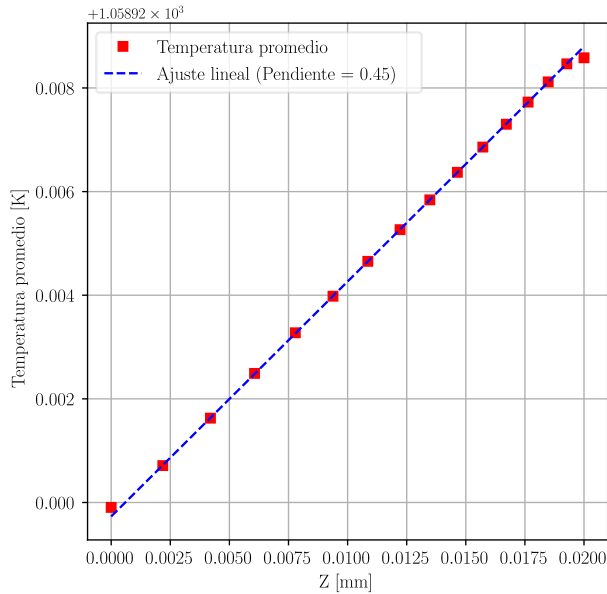
$$\epsilon = 0.7$$

Temperatura promedio por plano vs Z
ÁNODO



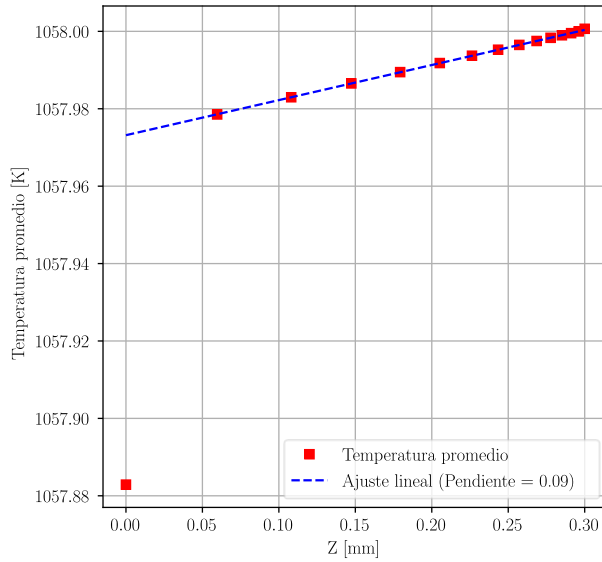
$$\epsilon = 0.8$$

Temperatura promedio por plano vs Z
ÁNODO

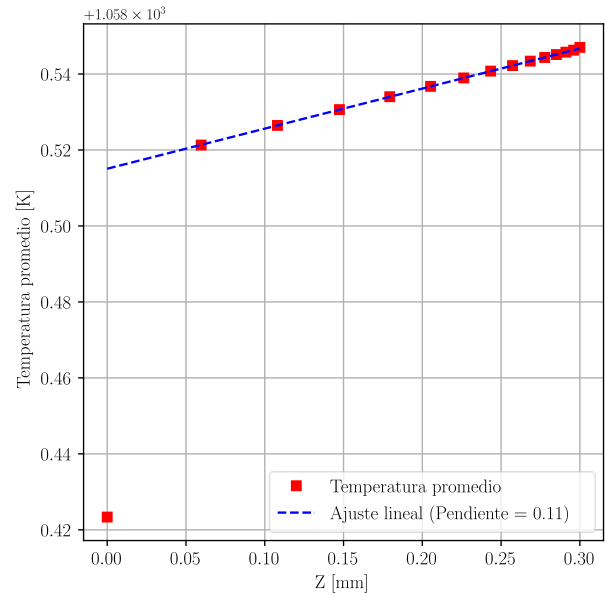


SOPORTE DEL ANODO

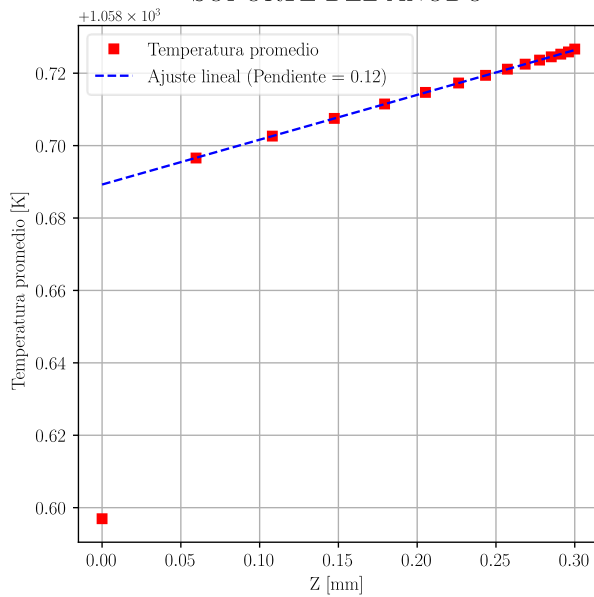
$\epsilon = 0.2$

Temperatura promedio por plano vs Z
SOPORTE DEL ÁNODO

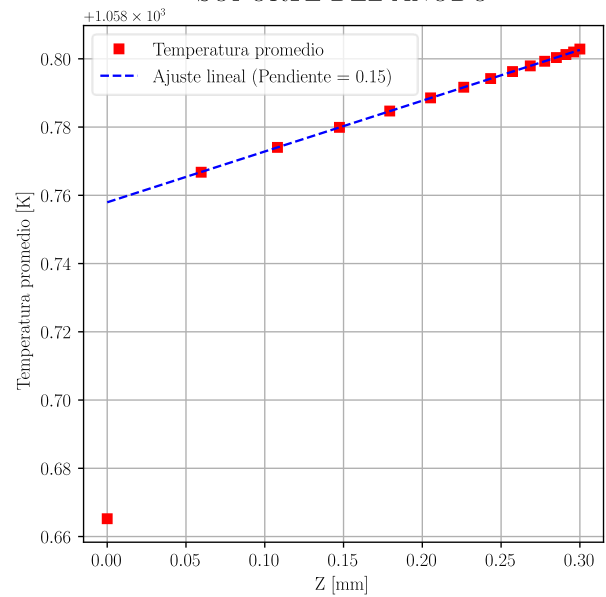
$\epsilon = 0.3$

Temperatura promedio por plano vs Z
SOPORTE DEL ÁNODO

$\epsilon = 0.4$

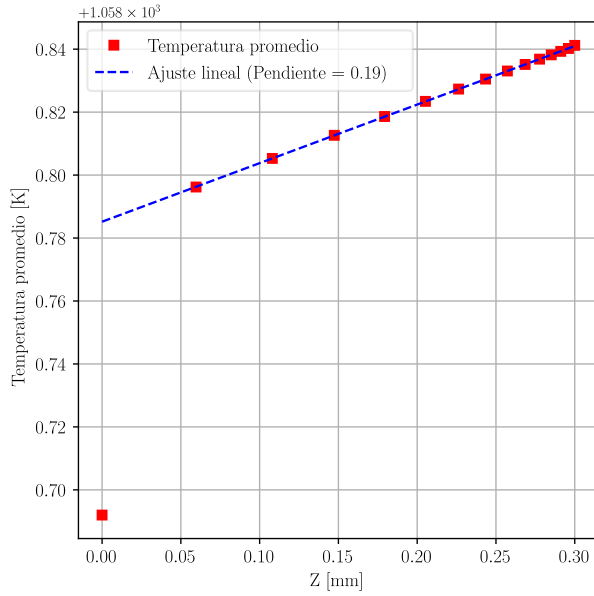
Temperatura promedio por plano vs Z
SOPORTE DEL ÁNODO

$\epsilon = 0.5$

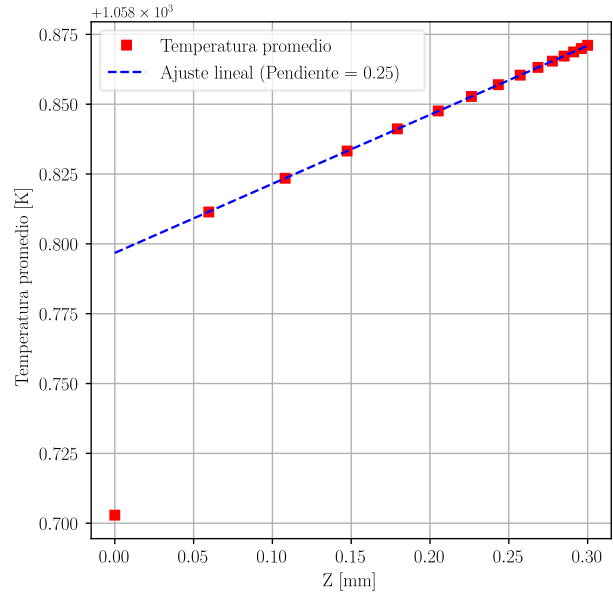
Temperatura promedio por plano vs Z
SOPORTE DEL ÁNODO

SOPORTE DEL ANODO

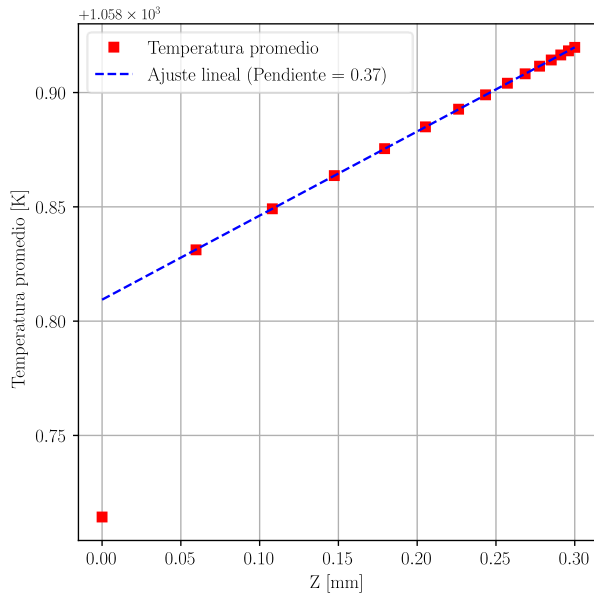
$\epsilon = 0.6$

Temperatura promedio por plano vs Z
SOPORTE DEL ÁNODO

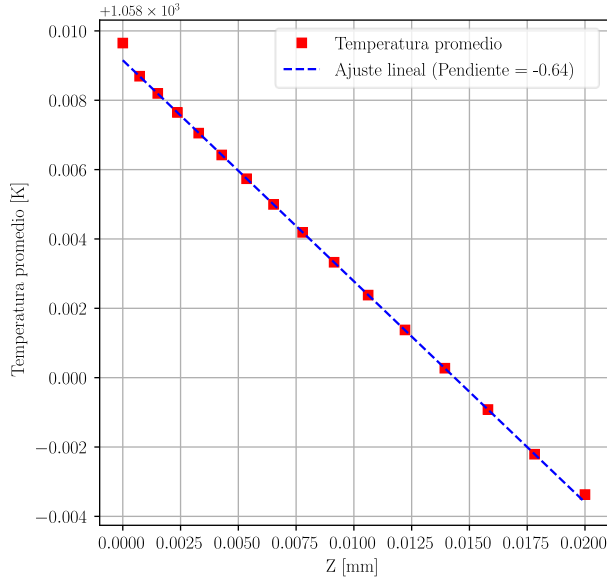
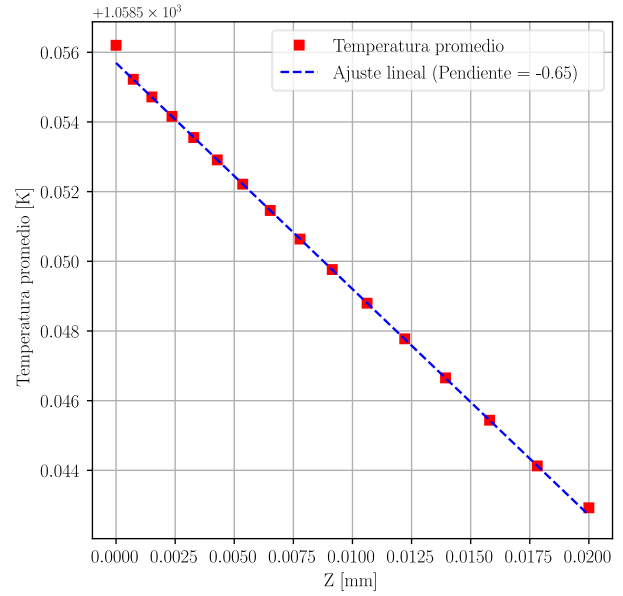
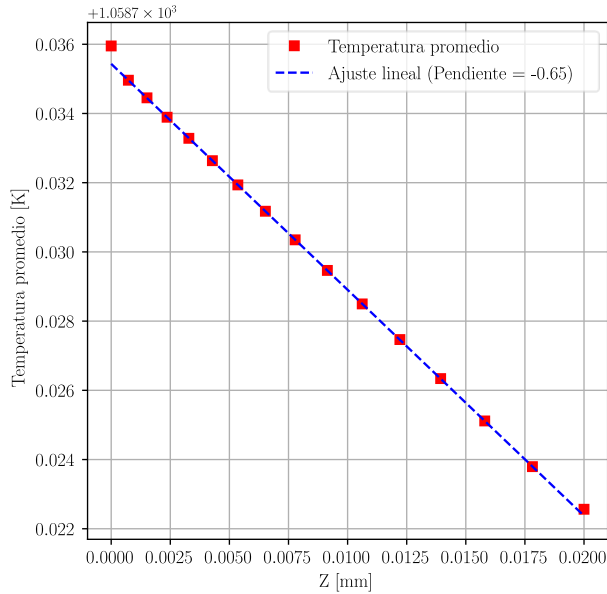
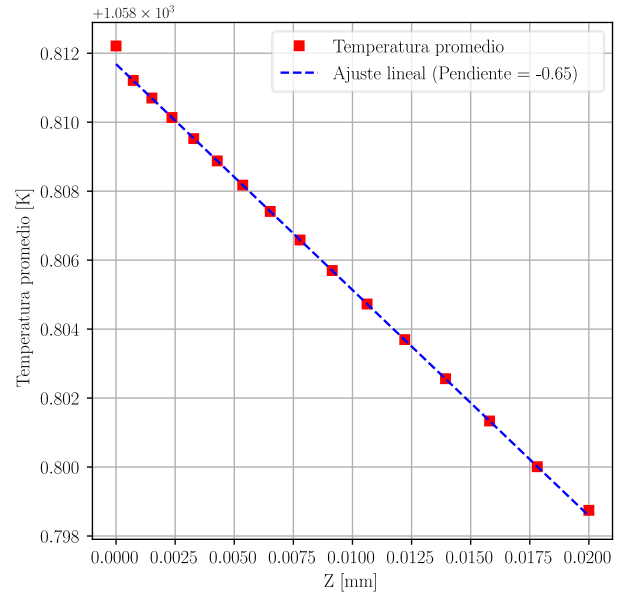
$\epsilon = 0.7$

Temperatura promedio por plano vs Z
SOPORTE DEL ÁNODO

$\epsilon = 0.8$

Temperatura promedio por plano vs Z
SOPORTE DEL ÁNODO

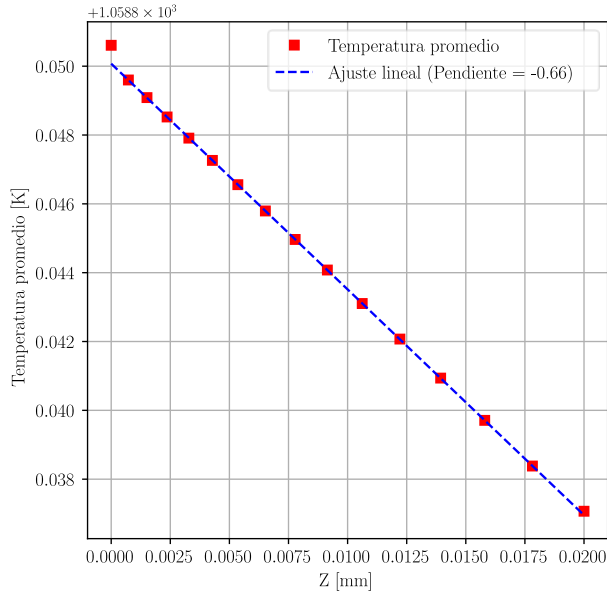
CATODO

 $\epsilon = 0.2$ Temperatura promedio por plano vs Z
CÁTODO $\epsilon = 0.3$ Temperatura promedio por plano vs Z
CÁTODO $\epsilon = 0.4$ Temperatura promedio por plano vs Z
CÁTODO $\epsilon = 0.5$ Temperatura promedio por plano vs Z
CÁTODO

CATODO

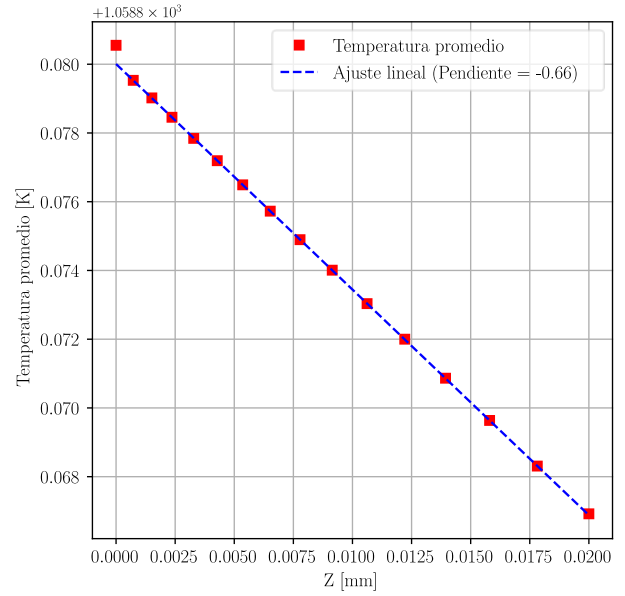
$$\epsilon = 0.6$$

Temperatura promedio por plano vs Z
CÁTODO



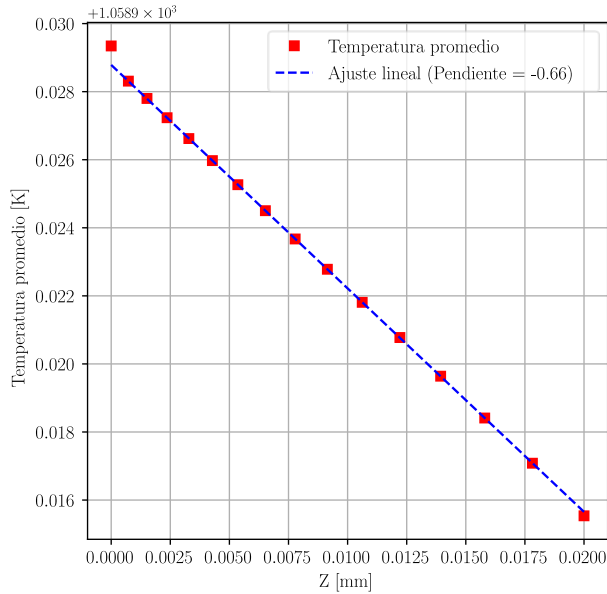
$$\epsilon = 0.7$$

Temperatura promedio por plano vs Z
CÁTODO



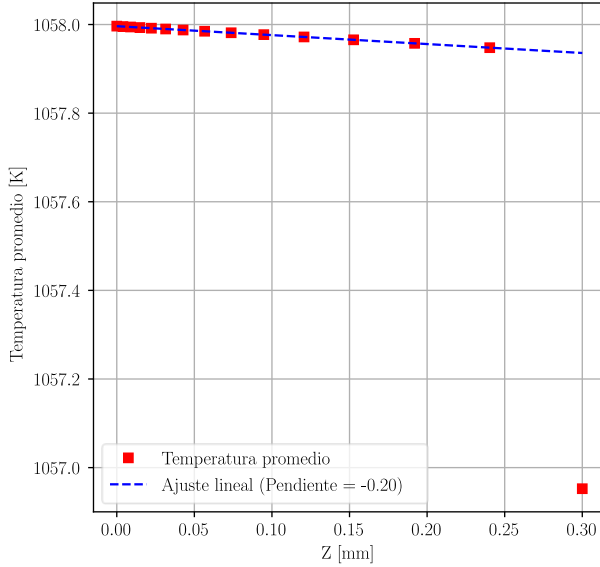
$$\epsilon = 0.8$$

Temperatura promedio por plano vs Z
CÁTODO

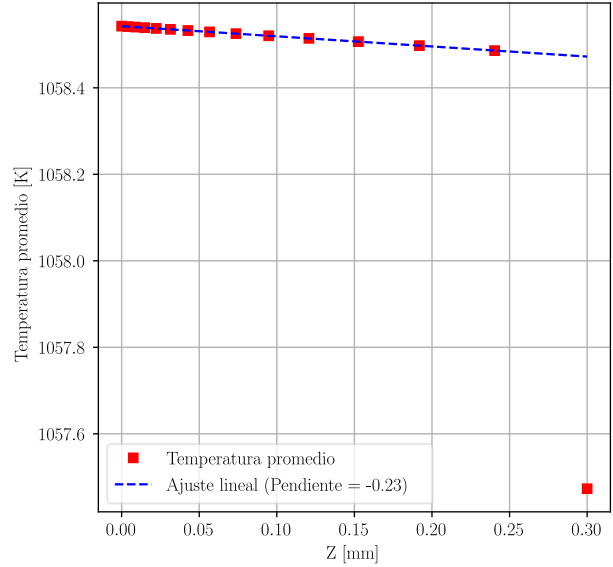


SOPORTE DEL CATODO

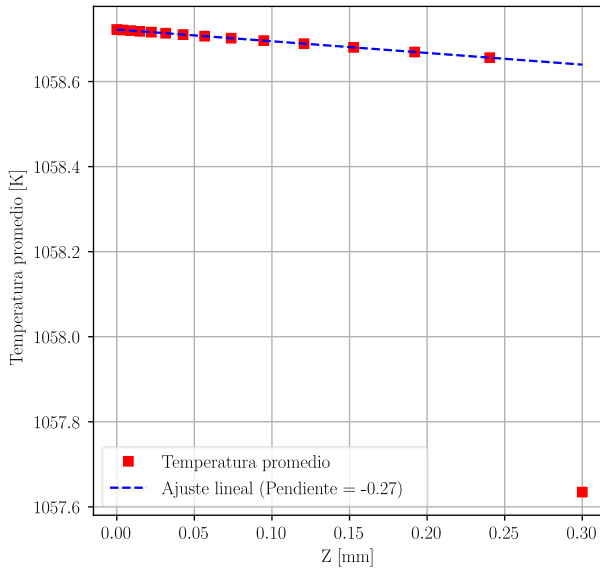
$\epsilon = 0.2$

Temperatura promedio por plano vs Z
SOPORTE DEL CATODO

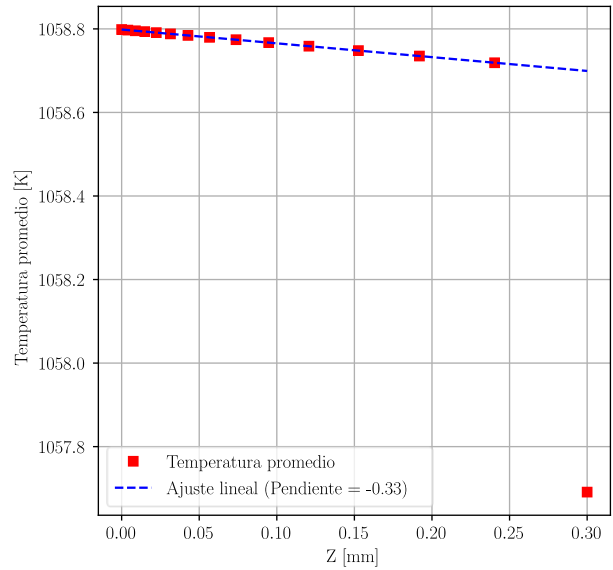
$\epsilon = 0.3$

Temperatura promedio por plano vs Z
SOPORTE DEL CATODO

$\epsilon = 0.4$

Temperatura promedio por plano vs Z
SOPORTE DEL CATODO

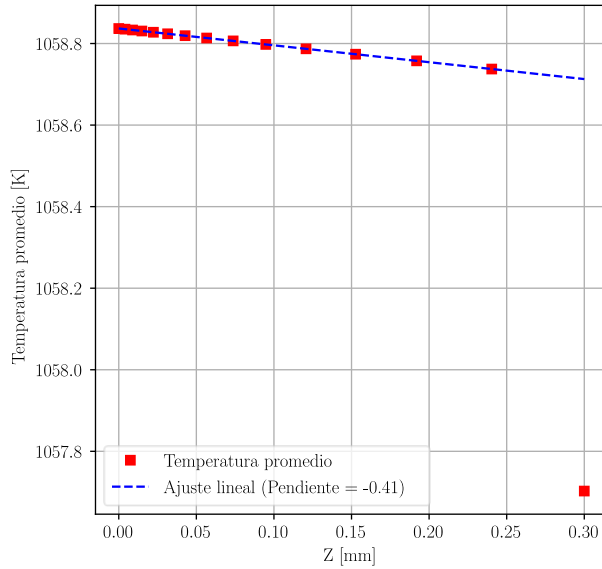
$\epsilon = 0.5$

Temperatura promedio por plano vs Z
SOPORTE DEL CATODO

SOPORTE DEL CATODO

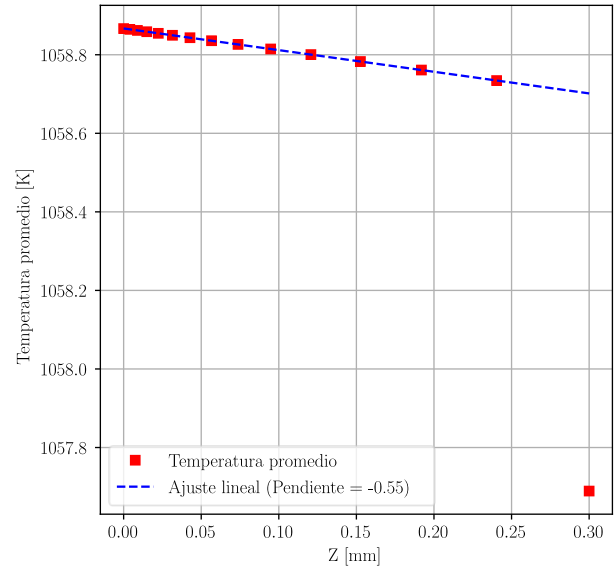
$$\epsilon = 0.6$$

Temperatura promedio por plano vs Z
SOPORTE DEL CÁTODO



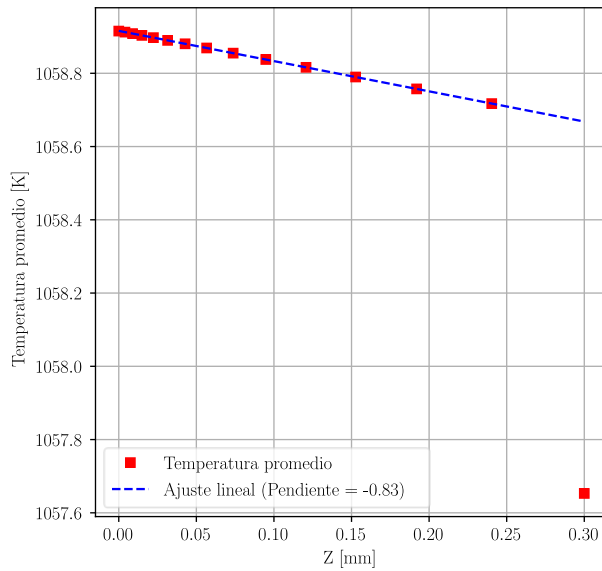
$$\epsilon = 0.7$$

Temperatura promedio por plano vs Z
SOPORTE DEL CÁTODO



$$\epsilon = 0.8$$

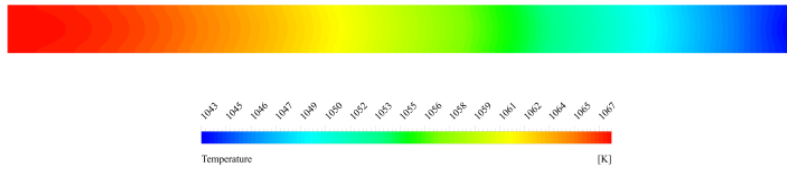
Temperatura promedio por plano vs Z
SOPORTE DEL CÁTODO



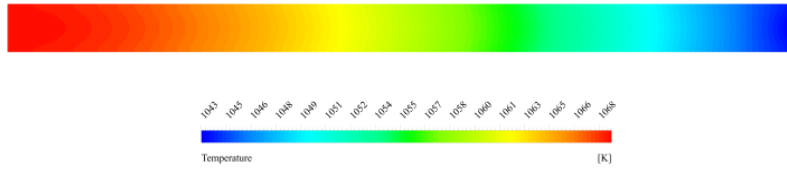
8.5 ANEXO V: Temperaturas de las interfaces

Mapa de Temperaturas para la interfaz **ÁNODO-ELECTROLITO**

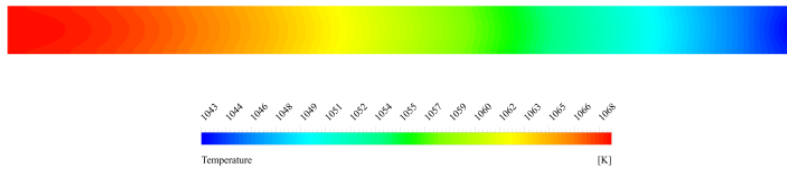
$\varepsilon = 0.2$



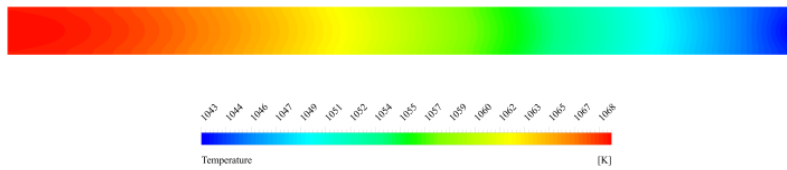
$\varepsilon = 0.3$



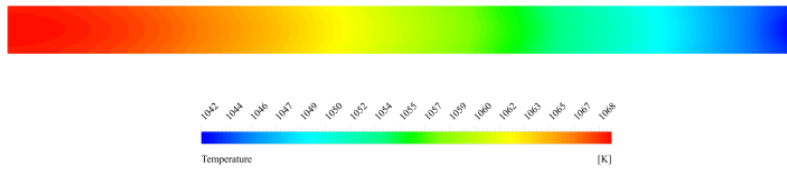
$\varepsilon = 0.4$



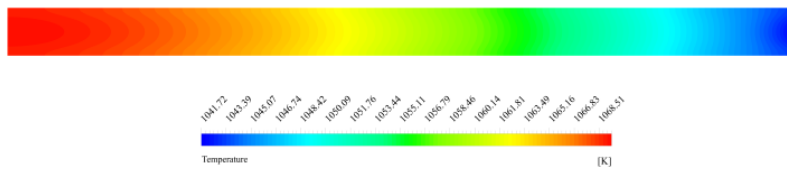
$\varepsilon = 0.5$



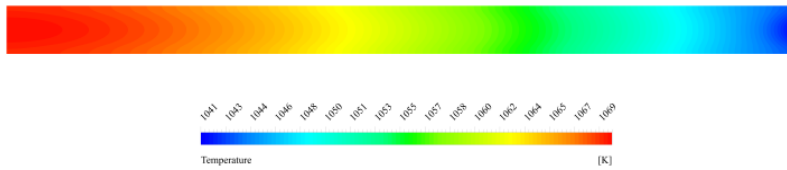
$\varepsilon = 0.6$



$\varepsilon = 0.7$

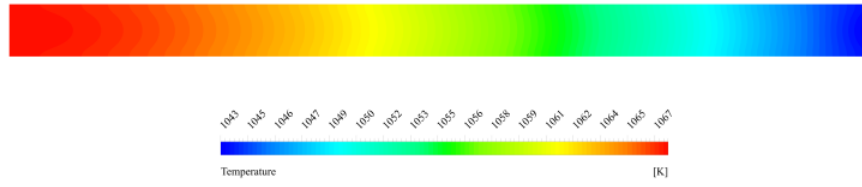


$\varepsilon = 0.8$

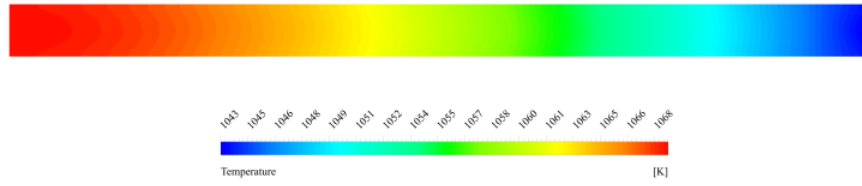


Mapa de Temperaturas para la interfaz CÁTODO-ELECTROLITO

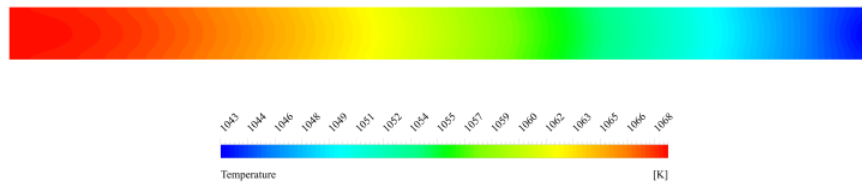
$\epsilon = 0.2$



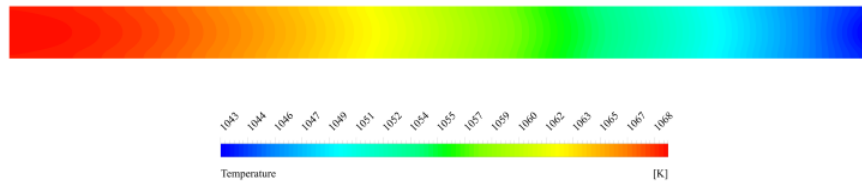
$\epsilon = 0.3$



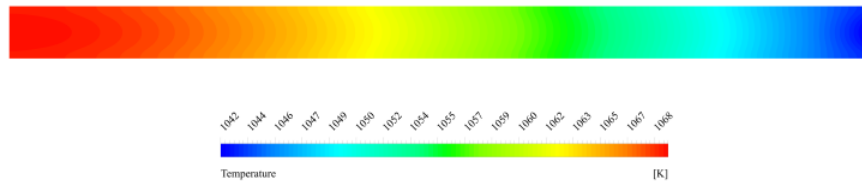
$\epsilon = 0.4$



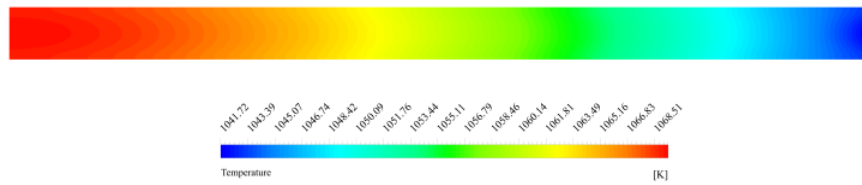
$\epsilon = 0.5$



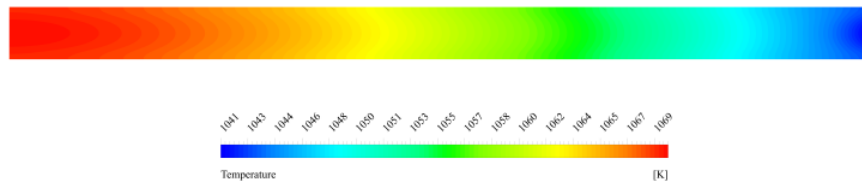
$\epsilon = 0.6$



$\epsilon = 0.7$

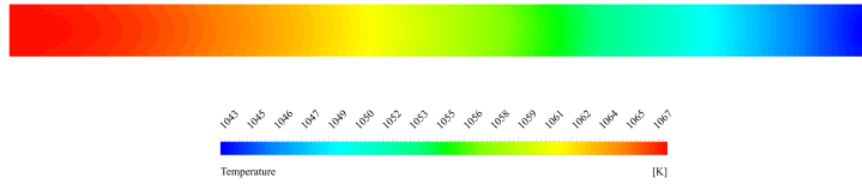


$\epsilon = 0.8$

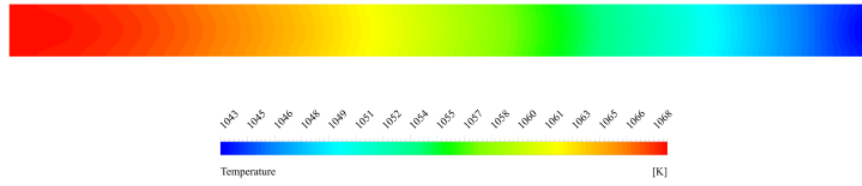


Mapa de Temperaturas para la interfaz ÁNODO-SOPORTE

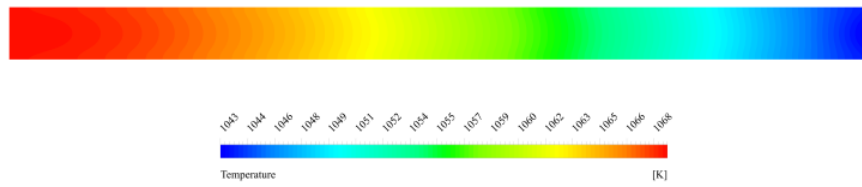
$\epsilon = 0.2$



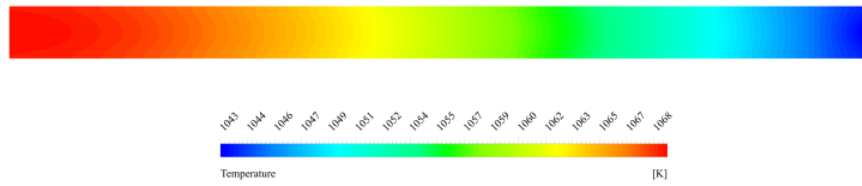
$\epsilon = 0.3$



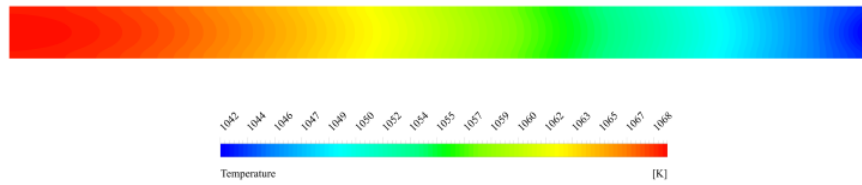
$\epsilon = 0.4$



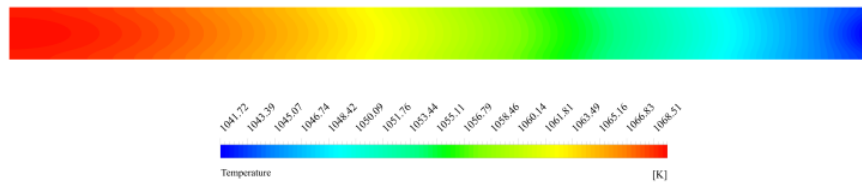
$\epsilon = 0.5$



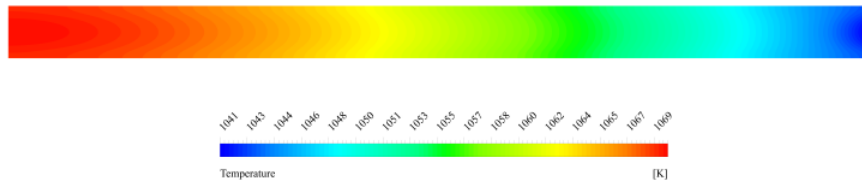
$\epsilon = 0.6$



$\epsilon = 0.7$

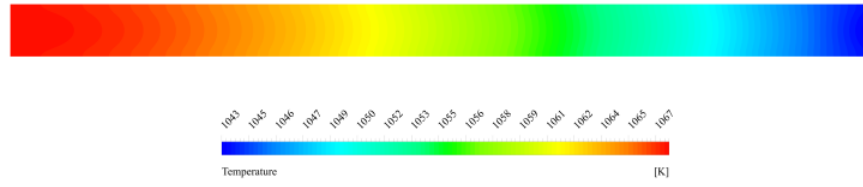


$\epsilon = 0.8$

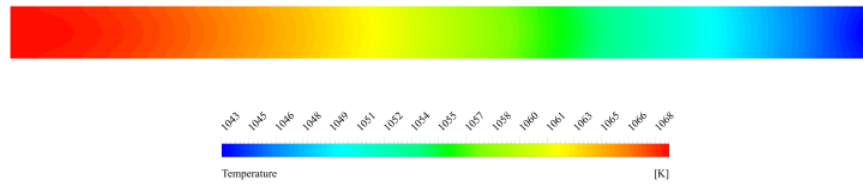


Mapa de Temperaturas para la interfaz CÁTODO-ELECTROLITO

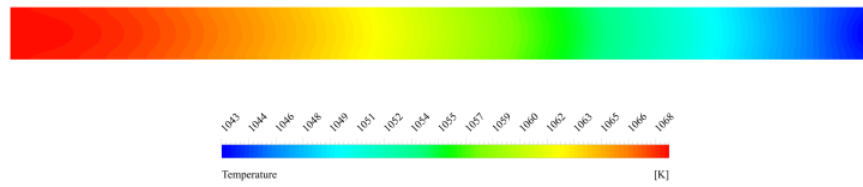
$\epsilon = 0.2$



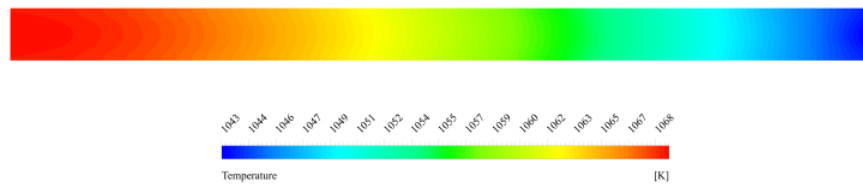
$\epsilon = 0.3$



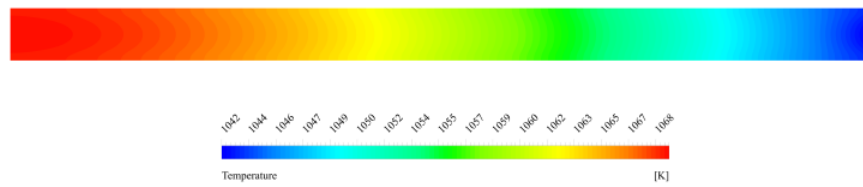
$\epsilon = 0.4$



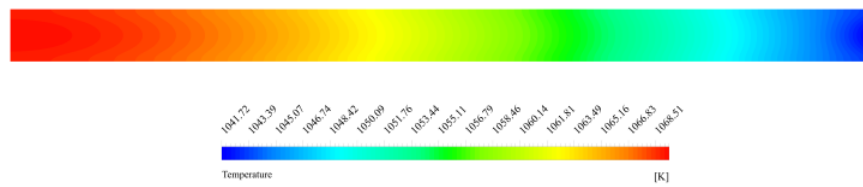
$\epsilon = 0.5$



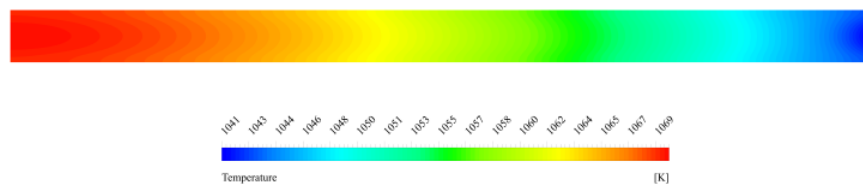
$\epsilon = 0.6$



$\epsilon = 0.7$

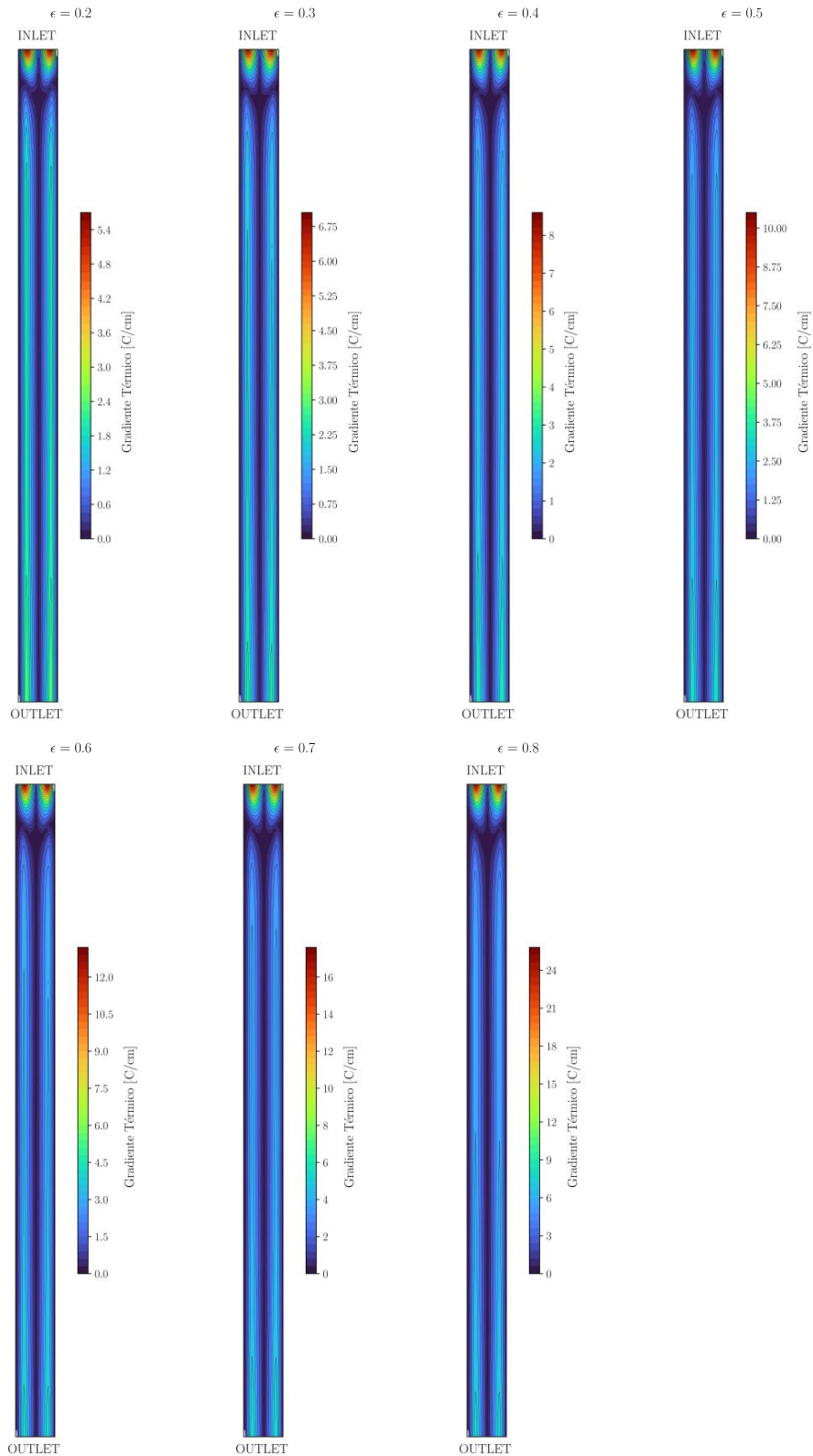


$\epsilon = 0.8$

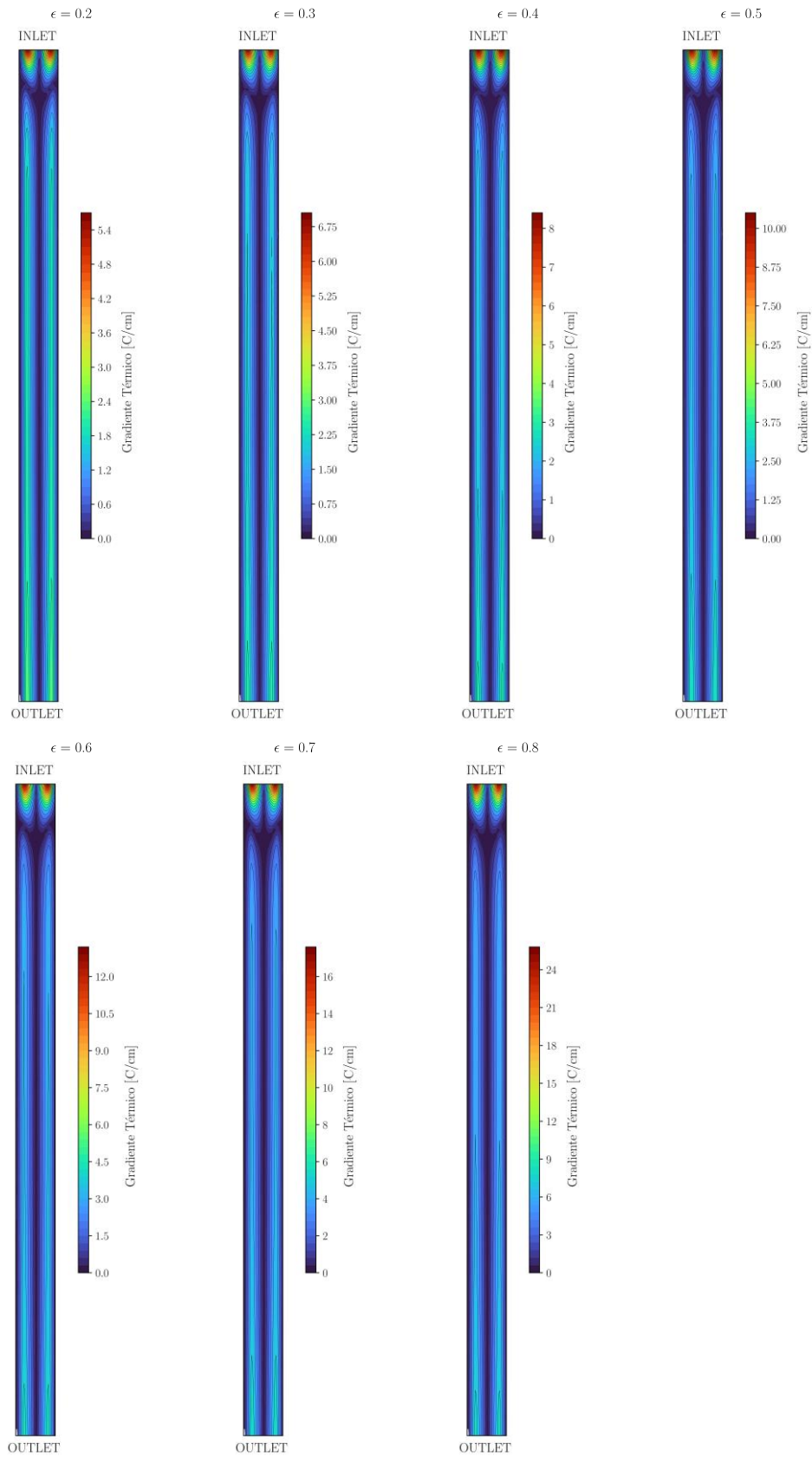


8.6 ANEXO VI: Mapa de gradientes térmicos para las distintas interfaces

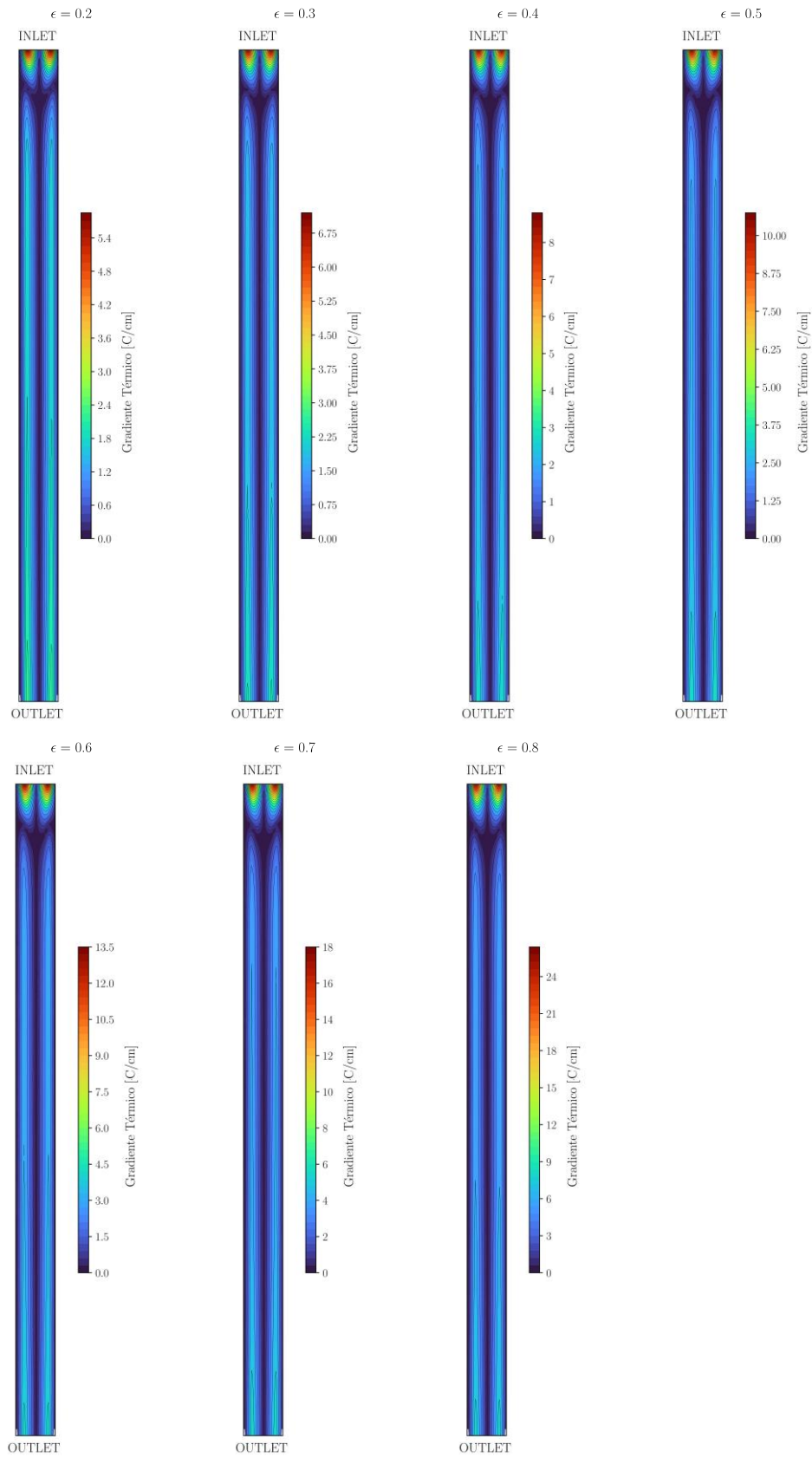
Distribución del Gradiente Térmico para diferentes porosidades
INTERFAZ ÁNODO-ELECTROLITO



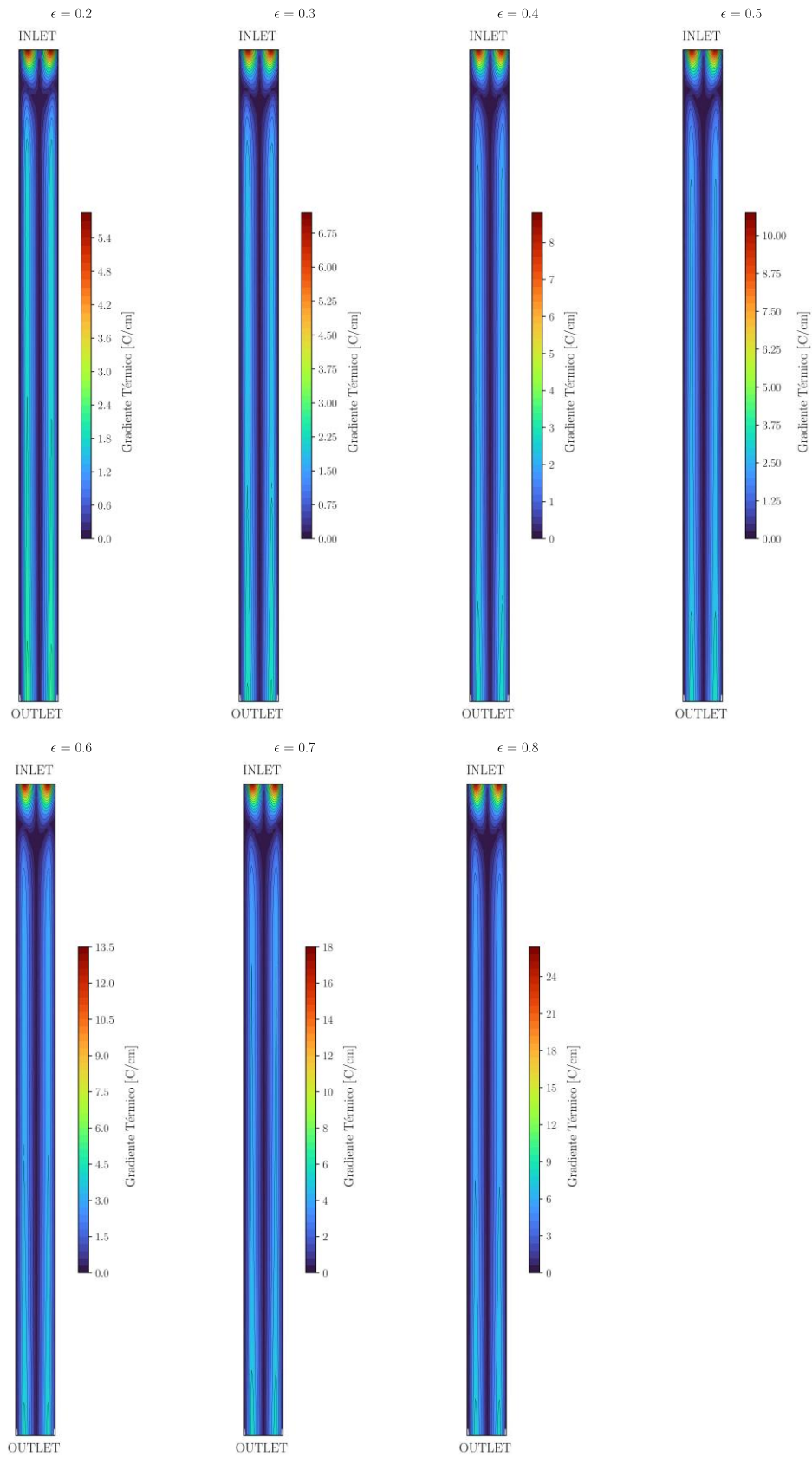
Distribución del Gradiente Térmico para diferentes porosidades INTERFAZ CÁTODO-ELECTROLITO



Distribución del Gradiente Térmico para diferentes porosidades INTERFAZ ANODO-SOPORTE

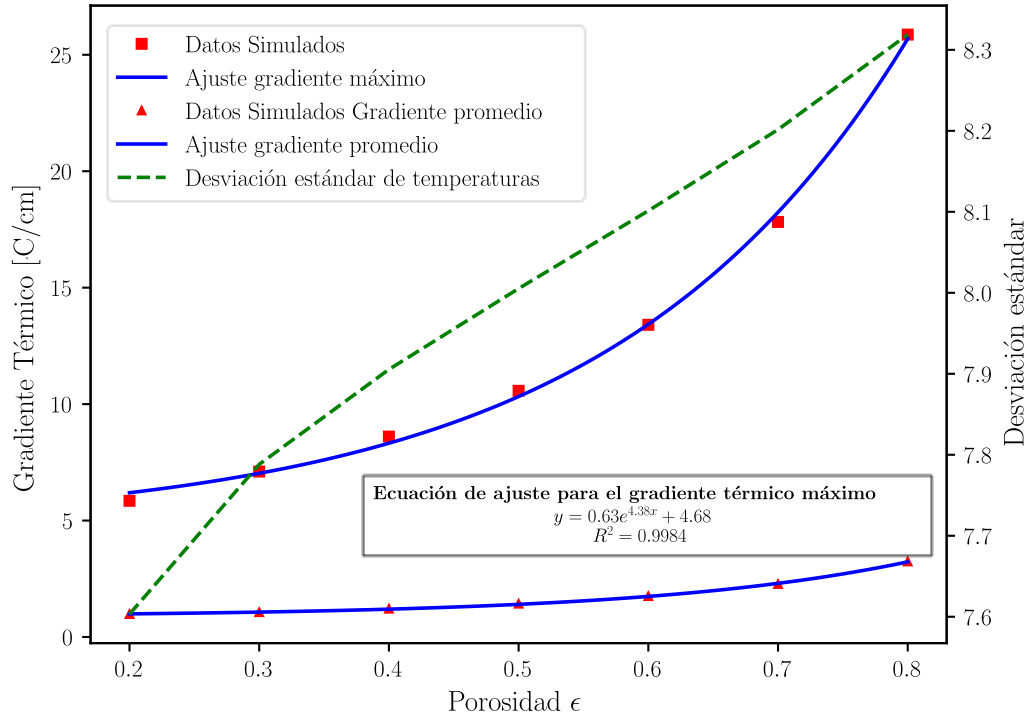


Distribución del Gradiente Térmico para diferentes porosidades INTERFAZ CÁTODO-SOPORTE



8.7 ANEXO VII: Gradiente térmico máximo y promedio en función de la porosidad

Gradiente Térmico Máximo en función de la porosidad de los soportes
INTERFAZ ÁNODO-SOPORTE



Gradiente Térmico Máximo en función de la porosidad de los soportes
INTERFAZ CÁTODO-SOPORTE

