

UNIVERSIDADE FEDERAL DE JUIZ DE FORA

FELIPE LANA DAHER

**ESTUDO E SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE MODELOS
DE CÉLULA COMBUSTÍVEL PARA GERAÇÃO DE
ENERGIA EM INSTALAÇÕES DE BAIXA TENSÃO**

Juiz de Fora, MG - Brasil

Dezembro de 2016

FELIPE LANA DAHER

**ESTUDO E SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE MODELOS
DE CÉLULA COMBUSTÍVEL PARA GERAÇÃO DE
ENERGIA EM INSTALAÇÕES DE BAIXA TENSÃO**

Relatório final, apresentado a Universidade Federal de Juiz de Fora, como parte das exigências para a obtenção do título de engenheiro eletricitista.

Orientador: Leonardo Willer de Oliveira

Juiz de Fora, MG - Brasil

Dezembro de 2016

Modelo disponível no site da biblioteca

<http://www.ufjf.br/biblioteca/servicos/usando-a-ficha-catalografica/>

Daher, Felipe Lana.

ESTUDO E SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE
MODELOS DE CÉLULA COMBUSTÍVEL PARA GERAÇÃO
DE ENERGIA EM INSTALAÇÕES DE BAIXA TENSÃO/

Felipe Lana Daher -- 2016.

81 f. : il.

Orientador: Leonardo Willer de Oliveira

Trabalho de Conclusão de Curso (graduação) -
Universidade

Federal de Juiz de Fora, Faculdade de Engenharia, 2016.

1. Células a combustível. 2. Simulação de células a combustível. 3.

I. Lana Daher, Felipe. II. Estudo e Simulação Computacional de

Modelos de Célula Combustível para Geração de Energia Em

Instalações de Baixa Tensão

FELIPE LANA DAHER

**ESTUDO E SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE MODELOS
DE CÉLULA COMBUSTÍVEL PARA GERAÇÃO DE
ENERGIA EM INSTALAÇÕES DE BAIXA TENSÃO**

Relatório final, apresentado a Universidade Federal de Juiz de Fora, como parte das exigências para a obtenção do título de engenheiro eletricitista.

Orientador: Leonardo Willer de Oliveira

Aprovada em 22 de dezembro de 2016

Prof. Leonardo Willer de Oliveira, D.Sc. (Orientador)

Prof. Bruno Henriques Dias, D.Sc.

Prof. Flávio Vanderson Gomes, D.Sc.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente aos meus pais por serem exemplos na minha vida e darem todo o apoio necessário.

Aos meus avós que estão descansando agora, mas que sempre motivaram os filhos e netos aos estudos.

Ao meu irmão por ser meu exemplo e me mostrar os melhores caminhos.

A Universidade Federal de Juiz de Fora, corpo docente da faculdade de engenharia elétrica e governo brasileiro por me darem oportunidades ímpares.

Ao meu orientador Leonardo Willer de Oliveira por dar suporte, apesar de seu tempo escasso.

Aos amigos da *Purdue University*, principalmente o Dr. Shripad Revankar, e minha amiga Sravani, que tive a oportunidade de trabalhar no tema das células a combustível, e que me ajudaram a ter um conhecimento e motivação para fazer esta monografia.

Ao meu amigo José Alfredo por me dar a oportunidade de trabalhar em seu projeto, e à minha namorada Juliana Ferreira, por me motivar nas horas mais difíceis, o que foi fundamental nesta reta final de curso.

Às pessoas que direta ou indiretamente fizeram parte da minha formação, o meu muito obrigado.

“Noventa por cento do sucesso se baseia simplesmente em insistir.”

Woody Allen

RESUMO

Resumo da Monografia apresentada à UFJF como parte dos requisitos necessários para a obtenção do título de Engenheiro Eletricista.

Estudo e Simulação Computacional de Modelos de Célula Combustível para Geração de Energia em Instalações de Baixa Tensão

Felipe Lana Daher

Dezembro, 2016

Orientador: Leonardo Willer de Oliveira

Células a combustível consistem em fontes alternativas de energia que pode ser utilizadas em diversas áreas da engenharia e com potencial para aplicação em escala na sociedade contemporânea. Para tanto, avanços tecnológicos são necessários para os diversos tipos de células existentes. Neste cenário, a modelagem computacional é importante para estudos, análise e compreensão do funcionamento e dimensionamento dos componentes de uma célula combustível. Portanto, a presente monografia de final de curso propõe a análise de dois modelos dinâmicos de células. Para o primeiro, já existente na literatura, propõe-se seu desenvolvimento para posterior validação. O segundo, por sua vez, encontra-se disponível no software MATLAB/Simulink, e a proposta desta monografia é a sua simulação como fonte de geração distribuída para uma carga residencial. A validação do primeiro modelo é feita com base nos resultados de uma referência da literatura, e quanto ao segundo, faz-se uma análise crítica dos resultados obtidos, através de avaliação da relação entre suas variáveis de entrada e de saída.

ABSTRACT

Abstract of Thesis presented to UFJF as a partial fulfillment of the requirements for the title of Electrical Engineer.

Study and Computational Simulation of Fuel Cell Models for Power Generation in Low Voltage Facilities

Felipe Lana Daher

December, 2016

Supervisor: Leonardo Willer de Oliveira

Fuel cells consist of alternative sources of energy that can be used in a variety of engineering fields and with potential for scale application in contemporary society. For that, technological advances are necessary for the various types of cells that exist. In this scenario, computational modeling is important for studies, analysis and understanding of the functioning and dimensioning of components of a fuel cell. Therefore, the present term paper proposes the analysis of two dynamic models of fuel cells. For the first, already existing in the literature, it is proposed its development for later validation. The second, in turn, is available in MATLAB/Simulink software, and the proposal of this monograph is its simulation as a source of distributed generation for a residential load. The validation of the first model is based on the results of a literature reference, and for the second, a critical analysis of the results obtained is done by evaluating the relationship between its input and output variables.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1: Reações em uma célula a combustível.....	19
Figura 2: Desempenho ideal e real de uma célula a combustível (curva V-I).....	20
Figura 3: Modelo da célula a combustível PEMFC desenvolvido no MATLAB/Simulink. ...	23
Figura 4: Modelo de célula a combustível/carga incorporado ao MATLAB/Simulink.....	29
Figura 5: Configuração da célula a combustível do modelo MATLAB/Simulink.....	30
Figura 6: Configuração do regulador de fluxo de combustível do modelo MATLAB/Simulink.	31
Figura 7: Subsistema seletor de fluxo de combustível do modelo MATLAB/Simulink.	31
Figura 8: Configuração da carga no modelo MATLAB/Simulink.....	32
Figura 9: Subsistema do conversor <i>boost</i> do modelo MATLAB/Simulink.	32
Figura 10: Sinal de corrente de saída da célula gerado no <i>Signal Builder</i> , do Simulink.	34
Figura 11: Perfis de tensão e corrente (a) do modelo implementado; e (b) da referência base.	36
Figura 12: Temperaturas (i) obtidas a partir do modelo implementado (a); e (b) da referência base.	38
Figura 13: Comportamento da utilização de combustível pelo anodo.	39
Figura 14: Modelo de célula a combustível com inversor simulado no MATLAB/Simulink.	39
Figura 15: Inversor trifásico PWM por IGBTs do MATLAB/Simulink.....	40
Figura 16: Interface para os parâmetros do inversor PWM / IGBT do MATLAB/Simulink.	41
Figura 17: Bloco de carga resistiva trifásica em estrela do MATLAB/Simulink.	41
Figura 18: Interface para os parâmetros de carga do modelo MATLAB/Simulink.	42
Figura 19: Bloco do regulador de tensão do modelo MATLAB/Simulink.	42
Figura 20: Interface para os parâmetros do regulador de tensão do modelo MATLAB/Simulink.	43
Figura 21: Bloco do gerador de PWM do modelo MATLAB/Simulink.....	43
Figura 22: Interface para os parâmetros do gerador de PWM do modelo MATLAB/Simulink.	44
Figura 23: Resultados do modelo MATLAB/Simulink sem inversor e com carga monofásica, antes do <i>boost</i>	45
Figura 24: Resultados do modelo MATLAB/Simulink sem inversor e com carga monofásica, após o <i>boost</i>	46
Figura 25: Corrente na saída a célula, e utilização de hidrogênio.	46
Figura 26: Tensão contínua na saída do conversor <i>boost</i> para a simulação 2.	47
Figura 27: Resultado da Simulação 2 para a tensão do inversor.	48
Figura 28: Resultado da simulação 2 para a tensão de linha na carga.....	48
Figura 29: Constante modificada de 100 para 220, para elevar a tensão contínua de saída do <i>boost</i>	49
Figura 30: Tensão contínua na saída do conversor <i>boost</i> para a simulação 3.	50
Figura 31: Resultado da Simulação 3 para a tensão do inversor.	50
Figura 32: Resultado da simulação 3 para a tensão de linha na carga.....	51

LISTA DE TABELAS

Tabela 1: Classificação de células a combustível.....	18
Tabela 2: Parâmetros da célula a combustível.....	28

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	X
LISTA DE TABELAS	XI
CAPÍTULO 1	14
1. INTRODUÇÃO	14
1.1 Considerações Iniciais	14
1.2 Histórico	15
1.3 Motivação	15
1.4 Objetivos	16
1.5 Estrutura da Monografia	16
CAPÍTULO 2	17
2. A CÉLULA A COMBUSTÍVEL	17
2.1 Introdução	17
2.2 Tipos de Célula	17
2.3 Princípios de Funcionamento	18
2.4 Modelos de Células a Combustível	20
2.5 Conclusões Parciais	21
CAPÍTULO 3	22
3. MODELOS DE CÉLULA COMBUSTÍVEL	22
3.1 Introdução	22
3.2 Modelo Dinâmico de uma Célula a Combustível PEMFC	22
3.2.1 Equações gerais	23
3.2.2 Anodo e catodo	24
3.2.3 Corpo da célula	25
3.2.4 Modelagem eletroquímica	26
3.3 Modelo do MATLAB/Simulink	28

3.4	Conclusões Parciais	32
	CAPÍTULO 4	33
4.	SIMULAÇÕES	33
4.1	Introdução	33
4.2	Simulações com o Modelo Implementado (Xue, Tang, Smirnova, England, & Sammes, 2004)	33
4.3	Simulações com o Modelo do MATLAB/Simulink	39
4.3.1	Modelo completo	39
4.3.2	Dados do inversor	40
4.3.3	Dados da carga	41
4.3.4	Regulador de tensão	42
4.3.5	Gerador PWM	43
4.3.6	Resultados obtidos	44
4.4	Conclusões Parciais	51
	CAPÍTULO 5	52
5.	CONCLUSÕES	52
5.1	Considerações Finais	52
5.2	Sugestões Para Estudos Futuros	53
6.	REFERÊNCIAS	54
A.	ELEMENTOS DE SIMULAÇÃO	55
A.1	Modelo do Conversor Boost	55
A.2	Modelo do Filtro do Inversor	55
A.3	Modelo do Regulador do Filtro	55
	APÊNDICE B	56
	EQUAÇÕES	56
B.	B.1 EQUAÇÕES DINÂMICAS PARA OS TRÊS VOLUMES DE CONTROLE DO MODELO REPRODUZIDO DA PEMFC	56

Capítulo 1

INTRODUÇÃO

1.1 Considerações Iniciais

Um aumento considerável na demanda por energia devido ao crescimento populacional mundial, à redução dos recursos de combustíveis fósseis e à necessidade de preservação ambiental, tem levado à procura por alternativas tanto na geração de energia elétrica, quanto na sua utilização, como nos setores residencial, comercial, industrial, automobilístico, entre outros. A preocupação com emissões de gases de efeito estufa tem aumentado no sentido de incentivos a fontes de energia que emitam menores quantidades desses gases, ou que não os emitam.

Neste cenário, um sistema de geração a células a combustível pode ser apontado como alternativa, pois esta tecnologia normalmente gera somente água na sua exaustão, que pode ser reaproveitada para outros processos, ou mesmo para a própria geração. Sendo assim, a geração de energia através de células a combustível trata-se de uma forma de obtenção de energia isenta de emissões de gases nocivos à natureza, como o monóxido e o dióxido de carbono e óxidos de enxofre.

Para se ter ideia dos benefícios do uso de hidrogênio como combustível, podem-se citar duas características principais: sua entalpia de combustão elevada, além de o produto de sua combustão ser a água. Contudo, apesar destes benefícios, a consolidação do hidrogênio na matriz energética ainda requer amadurecimento, devido a desafios como, por exemplo, inexistência de hidrogênio livre na natureza, ou seja, em sua forma pura (H_2). A maneira mais comum de se obter hidrogênio é por meio de eletrólise da água, ou por gaseificação do gás natural, biomassa e carvão. A segunda opção contribui para o lançamento de gases de efeito estufa, porém em menor escala comparada à queima de combustíveis fósseis.

Outro fato que dificulta a utilização do hidrogênio é a sua dificuldade de armazenamento, sendo este feito por meio de compressores e tanques. Quando no estado gasoso, este combustível necessita de um sistema de armazenamento de grande volume e pressão, exigindo materiais mais resistentes. Na passagem para o estado líquido, necessita de sistemas criogênicos, ou seja, de baixíssimas temperaturas, por ter temperatura de ebulição de $-253^{\circ}C$. Por fim, a célula a combustível trabalha normalmente com hidrogênio e oxigênio. Na presença de oxigênio, o hidrogênio entra em combustão, tendo assim alto poder explosivo. (Porciúncula, 2013)

O uso de hidrogênio como combustível consiste em uma aplicação relativamente recente. Em 1970, surgiu um movimento que ficou conhecido como “economia do hidrogênio”. Este termo foi evidenciado pela *General Motors* nesta década, e a ideia conquistou a imprensa popular da época. O apelo pela introdução do hidrogênio na matriz energética ganhou forças devido à crise do petróleo, que se instalou no início dos anos 70. A grande alta no barril de petróleo aumentou a preocupação com a estabilidade de suas reservas e com a potencial falta de confiabilidade na energia, fazendo com que os principais centros econômicos no mundo, como na América do Norte e a Europa, buscassem alternativas para fontes energéticas, como a inserção do hidrogênio. No entanto, devido à necessidade de desenvolvimento tecnológico, e devido a atenuação nas tensões no Oriente Médio, o petróleo continuou a ser a fonte dos combustíveis mais comumente utilizados no setor de transportes mundial. (Januzzi & Chum, 2002)

No Brasil, quando se analisa os setores mais propícios para a implantação de células a combustível para geração de energia elétrica, tem-se na geração distribuída com produção de

5 a 200 kW. No CENPES (Centro de Pesquisa e Desenvolvimento da Petrobras), por exemplo, se encontra uma célula que utiliza a reforma do gás natural e possui potência elétrica de 200 kW, sendo utilizada para alimentar seu Centro de Processamentos de Dados (CPD). Este potencial é elevado para cargas que demandam altos níveis de confiabilidade, como hospitais, aeroportos, empresas de telecomunicações, bancos, centros de pesquisa, entre outros, ou ainda para o planejamento de sistemas de distribuição de energia elétrica.

Portanto, pode-se destacar outra característica positiva do uso de células a combustível, ou seja, sua aplicabilidade próxima a grandes centros de carga, como opção complementar à construção de linhas de transmissão, com estações inversoras e perdas ôhmicas. Pode-se também, aproveitar o resíduo térmico proveniente de uma usina constituída de células combustível em sistemas de cogeração, que propiciam aumento de eficiência global, além de funcionar como uma reserva de potência. Para estes fins, os tipos de célula mais apropriados são as células combustível de eletrólito polimérico e de ácido fosfórico.

1.2 Histórico

O surgimento da célula a combustível data do experimento de William Groove em 1839, que descobriu que a eletrólise da água em ácido sulfúrico diluído era reversível. Para tal experimento, utilizou dois eletrodos de platina parcialmente mergulhados numa solução aquosa ácida, separando estes eletrodos em dois reservatórios com hidrogênio e oxigênio (Caixeta, 2010).

Contudo, as tecnologias de materiais impossibilitaram o desenvolvimento e a comercialização durante mais de cem anos. Mudanças ocorreram nos últimos anos com a melhoria e a criação de novas tecnologias de células a combustível, separando-as em duas classes: células de baixa e de alta temperatura de operação. Até o fim do século XX, apenas células a combustível de ácido fosfórico eram comercialmente disponíveis para usinas de 200 kW_e. Células de membrana são melhores para aplicações automotivas, como por exemplo, no carro híbrido, enquanto as células alcalinas (AFC) são muito utilizadas em missões espaciais, por requererem hidrogênio e oxigênio ultra puros. (Wendt, Götz, & Linardi, 1999).

Eletrodos de difusão gasosa são condutores eletrônicos permeáveis aos gases reagentes e separados um do outro por um eletrólito (condutor iônico), de modo que os gases não se misturem. O eletrólito pode ser um líquido, um polímero condutor de cátions saturado com um líquido, ou um sólido (óxido de zircônio). Os potenciais elétricos de trabalho de célula para o sistema hidrogênio / oxigênio situam-se entre 0,5 e 0,7 V. Potenciais de circuito aberto situam-se entre 1,1 e 1,2 V. Devido à sua alta reatividade, o hidrogênio é, atualmente, a escolha mais apropriada para o combustível. Geralmente, as células combustíveis são classificadas por, além de sua temperatura de operação conforme anteriormente citado, tipo de eletrólito utilizado.

1.3 Motivação

A importância crescente das energias renováveis e à sua busca para diversos setores, como o setor de energia elétrica, serviu de motivação para a concepção da presente monografia, cujo objetivo é apresentar um estudo sobre uma das opções de energia renovável, o uso de células a combustível. A escolha por tal tecnologia deveu-se à primeiramente ao seu potencial para possíveis aplicações, inclusive na forma de geração descentralizada em sistemas de potência, como em redes de distribuição de energia elétrica. Ademais, a necessidade de estudos sobre esta alternativa específica, que possam contribuir para a capacitação e, portanto, para o desenvolvimento tecnológico nesta opção, também serviu de

motivação. Além disso, está em fase de montagem um laboratório de energias renováveis na Universidade Federal de Juiz de Fora (UFJF), que conta com um módulo de célula a combustível e um eletrolisador, e a tecnologia é contemplada em disciplina do curso de Engenharia Elétrica-Energia da UFJF. Haja vista este fato, a concepção de um estudo documentado sobre fundamentação teórica e princípios de funcionamento da célula pode contribuir para um melhor aproveitamento da referida disciplina e do laboratório em desenvolvimento.

Adicionalmente, o contato durante a participação no Programa Ciência Sem Fronteiras com o modelo de célula a combustível de (Xue, Tang, Smirnova, England, & Sammes, 2004), em uma aplicação integrada com outros sistemas, serviu de motivação. A partir deste contato, vislumbrou-se a possibilidade de estudo da tecnologia de forma dedicada, através da reprodução e adequação do referido modelo.

1.4 Objetivos

O objetivo da presente monografia de final de curso trabalho é realizar um estudo sobre modelos computacionais de células a combustível, bem como realizar simulação computacional destes dispositivos. O propósito é fornecer, através dos modelos e simulações propostas, subsídios para uma compreensão mais aprofundada sobre os princípios de funcionamento de células a combustível, além de demonstrar sua potencial aplicação no setor de energia elétrica, mais especificamente, na modalidade de geração descentralizada ou distribuída para atendimento a consumidores residenciais. Adicionalmente, a capacitação para o desenvolvimento e a validação de modelos computacionais que possam representar sistemas de geração e carga pode ser incluída entre os objetivos desta proposta.

1.5 Estrutura da Monografia

Esta monografia está dividida em quatro capítulos, além deste capítulo introdutório ao tema, em que são apresentados objetivos e um breve histórico da tecnologia de células a combustível.

No Capítulo 2, uma introdução mais detalhada sobre células a combustível é realizada, através de seus princípios de funcionamento, tipos e modelos.

O Capítulo 3 apresenta uma descrição do modelo de simulação desenvolvido neste trabalho para estudo, e do modelo disponível no software MATLAB/Simulink.

O Capítulo 4 apresenta as simulações realizadas tanto com o modelo desenvolvido, quanto com o modelo MATLAB/Simulink, juntamente com as respectivas análises e resultados.

Finalmente, o Capítulo 5 apresenta as principais conclusões e considerações finais, além de propostas de trabalhos futuros envolvendo o tema da monografia.

Capítulo 2

A CÉLULA A COMBUSTÍVEL

2.1 Introdução

As células a combustível são dispositivos eletroquímicos que utilizam reações para converter a energia química do combustível em energia elétrica, calor e água. Esta fonte difere-se da pilha por não conter todos os reagentes armazenados, mas combustível, como hidrogênio, injetado de forma contínua durante o processo de conversão em eletricidade. Portanto, em princípio, eletricidade é gerada indefinidamente enquanto houver combustível e oxidante injetados nos eletrodos (Revankar & Majumdar, 2014). Este capítulo apresenta alguns tipos de células combustível e suas principais características.

2.2 Tipos de Célula

As células a combustível são geralmente classificadas pelo tipo de eletrólito utilizado, visto que o eletrólito estabelece o princípio de operação e características da célula, pelo tipo de íon transferido e pelo intervalo de temperaturas de funcionamento da célula. Por exemplo, a célula a combustível alcalinas ou AFC utilizam uma solução alcalina (básica), como hidróxido de potássio (KOH), em água. Uma célula ácida, por sua vez, como a célula a combustível de ácido fosfórico, utiliza o referido ácido como eletrólito. A célula a combustível de membrana de troca de prótons (PEMFC) utiliza uma membrana sólida polimérica que permite a passagem dos prótons (H^+) do anodo para o catodo. Já a célula a combustível de carbonatos fundidos utiliza lítio fundido ou carbonato de potássio como eletrólito. A célula a combustível de óxido sólido (SOFC), por sua vez, tem uma membrana sólida de cerâmica (Revankar & Majumdar, 2014).

Outra classificação é quanto ao íon transferido por meio do eletrólito. As células a combustível podem ter transferência de ânions ou de cátions. As células PEMFC e PAFC, por exemplo, têm transferência dos cátions íons hidrogênio através do eletrólito. Já a célula AFC transfere ânions íons hidroxila (OH^-), a MCFC o íon carbonato (CO_3^{2-}) (ânion) e a SOFC o íon óxido (O^{2-}) (ânion) (Revankar & Majumdar, 2014).

Outro tipo de classificação das células a combustível é quanto à temperatura. Há células de baixa e alta temperatura, bem como células a temperatura intermediária. As de baixa temperatura operam entre $60^\circ C$ e $120^\circ C$, as intermediárias abaixo de $220^\circ C$, enquanto que as de alta temperatura entre $600^\circ C$ e $1000^\circ C$ (Revankar & Majumdar, 2014). É importante que o material do eletrólito não conduza elétrons, mas somente íons, assim como na pilha tradicional. Os elétrons devem passar pelo circuito externo a eles destinado. A Tabela 1 apresenta a classificação de células combustível conforme os aspectos anteriores.

Tabela 1: Classificação de células a combustível.

Tipo de Célula	Denominação em inglês	Íon	Tipo de Eletrólito	Temperatura de operação típica (°C)	Combustível e oxidante
AFC (Alcalina)	<i>Alkaline Fuel Cell</i>	OH ⁺	KOH ou solução de sódio	≈60-120	H ₂ , O ₂
PAFC (Ácido fosfórico)	<i>Phosphoric Acid Fuel Cell</i>	H ⁺	Ácido fosfórico	≈220	H ₂ puro
MCFC (carbonatos fundidos)	<i>Molten Carbonate Fuel Cell</i>	CO ₃ ²⁻	Lítio ou carbonato de potássio	≈600-700	H ₂ , CO, CH ₄ e outros hidrocarbonetos
PEMFC (Membrana de troca de prótons)	<i>Proton Exchange Membrane Fuel Cell</i>	H ⁺	Polímero sólido (Nafion®)	≈80	H ₂ puro
DMFC (Metanol direto)	<i>Direct Methanol Fuel Cell</i>	H ⁺	Polímero Sólido	≈80	Metanol

Fonte: (Revankar & Majumdar, 2014)

2.3 Princípios de Funcionamento

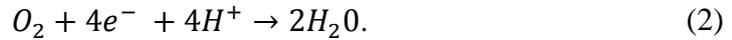
As células a combustível funcionam basicamente a partir de duas reações químicas parciais em dois eletrodos, separados por um eletrólito. Nestas células, ocorre oxidação do combustível no anodo e sua redução no catodo. Dado que o hidrogênio é o combustível mais comum, o processo de obtenção da corrente elétrica é explicado a seguir (Caixeta, 2010).

- Gás combustível rico em hidrogênio é fornecido no lado do anodo sob determinada pressão. O gás atravessa o eletrodo poroso que possui um catalisador, que acelera a semi-reação de formação de íons H⁺, conforme formulado a seguir:

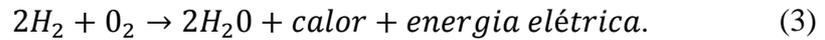


- Os elétrons da semi-reação (1) são transferidos para o lado do catodo através de um fio condutor. Já os íons H⁺ fluem para o catodo pelo eletrólito (membrana).
- No lado do catodo, um gás rico em oxigênio é injetado a determinada pressão, atingindo a camada catalítica do eletrodo e reagindo com os elétrons provenientes

do anodo e os íons H^+ , formando água e gerando calor de acordo com a semi-reação (2).



- Por fim, a reação total é dada por:



A Figura 1 ilustra as reações anteriormente descritas que ocorrem em uma célula a combustível, incluindo o transporte dos íons H^+ pela membrana.

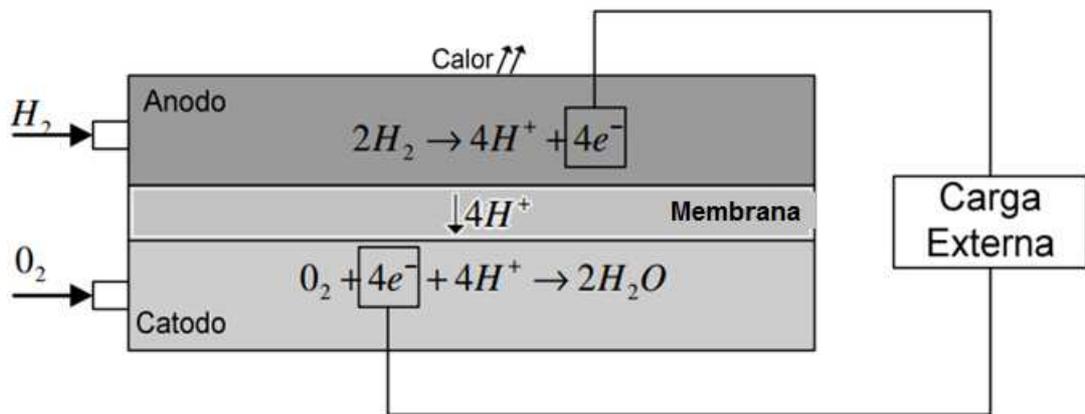


Figura 1: Reações em uma célula a combustível.
Fonte: (Caixeta, 2010)

Em geral, as células a combustível possuem perdas relacionadas à ativação da reação química (perda por ativação), à resistência elétrica de seus componentes (perda ôhmica), e ao transporte do gás (perdas por concentração). Na Figura 2: Desempenho ideal e real de uma célula a combustível (curva V-I), é mostrada a curva de desempenho de uma célula a combustível, onde é possível visualizar cada tipo de perda.

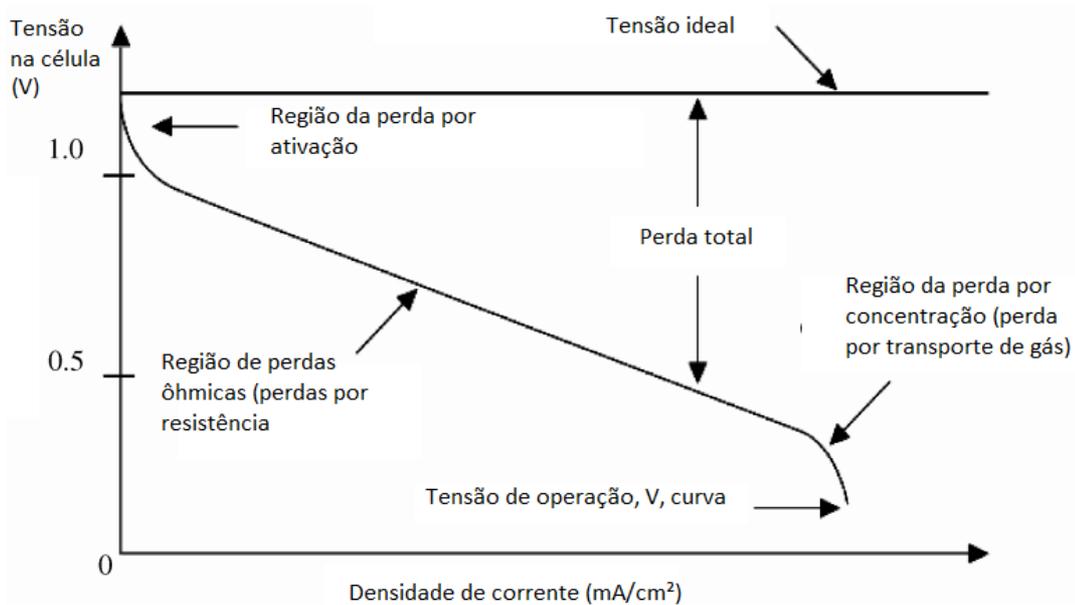


Figura 2: Desempenho ideal e real de uma célula a combustível (curva V-I).

Fonte: (Pilatoskt, Romero, Isaza, Gamboa, Sebastian, & Rivera, 2011)

A perda por ativação é criada por barreiras eletrônicas que devem ser superadas para haver o fluxo de corrente elétrica e fluxo de íons no eletrólito. Esta perda é diretamente proporcional ao aumento de corrente. As perdas ôhmicas são diretamente proporcionais à corrente elétrica, e ocorrem devido à resistência da célula, seja ela iônica (eletrólito), ou elétrica (eletrodos e circuito externo). Já as perdas por concentração ocorrem mais acentuadamente em densidades de corrente maiores, quando se torna mais difícil ao fluxo de gás atingir os locais de reação.

2.4 Modelos de Células a Combustível

O comportamento dinâmico de uma célula a combustível pode ser obtido de forma experimental ou por meio de modelagem computacional. Os modelos de células podem ser classificados em ordem zero, unidimensional, multidimensional e dinâmico, dependendo do número de variáveis de estado usadas para descrever seu comportamento. Estes modelos também podem ser classificados em isotermais e não isotermais, de acordo com a dependência ou não da temperatura, respectivamente (Revankar & Majumdar, 2014).

Através de um modelo dinâmico, o comportamento transiente da célula a combustível pode ser previsto sob condições de operação diversas, o que constitui aspecto importante em testes de controle na fase de desenvolvimento da célula (Revankar & Majumdar, 2014).

Enquanto o modelo de ordem zero é o mais simples, em que não se leva em conta nenhuma variação dos gases e na concentração de cargas através dos canais e da célula, o modelo tridimensional é o mais completo. Este modelo considera a concentração dos gases, variações de temperatura entre os canais dos gases (canais do anodo e do catodo) e o corpo da célula, e variação de tensão elétrica e densidade de corrente nas camadas eletrodo/eletrólito (Revankar & Majumdar, 2014).

Nesta monografia, será apresentado um modelo dinâmico de célula a combustível. Este modelo é adequado para representar com fidelidade o funcionamento transiente da célula e apresenta nível de detalhamento suficiente para introduzir os fenômenos necessários à sua compreensão.

2.5 Conclusões Parciais

Neste capítulo, foram fornecidas informações gerais sobre os tipos de células a combustível, além do princípio de obtenção de energia elétrica de forma contínua a partir de hidrogênio. Existem células que utilizam outros tipos de combustível, como, por exemplo, a MCFC (Célula a Combustível de Carbonatos Fundidos) ou a DMFC (Célula a Combustível de Metanol Direto), as quais também podem utilizar monóxido de carbono (CO), metano (CH₄), outros hidrocarbonetos e metanol (CH₃OH). Para outros combustíveis, há variações nas semi-reações em relação às apresentadas neste capítulo para H₂. Adicionalmente, foram apresentados alguns detalhes sobre os modelos de célula combustível e sua classificação, que, em sua maior parte, é dependente da complexidade do modelo. O próximo capítulo apresenta o detalhamento de um modelo dinâmico de célula combustível de membrana de troca de prótons.

Capítulo 3

MODELOS DE CÉLULA COMBUSTÍVEL

3.1 Introdução

Este capítulo apresenta o modelo de célula combustível da literatura desenvolvido na presente monografia para estudos de funcionamento e simulação desta fonte de energia alternativa, além de um modelo do software MATLAB/Simulink, avaliado em uma aplicação como fonte de geração distribuída para atender a uma carga residencial em tensão alternada. Ambos os modelos são de membrana de troca de prótons, PEMFC, e foram escolhidos por apresentar um comportamento semelhante para fins de comparação. Destaca-se que o propósito deste capítulo não é descrever toda a fundamentação para o funcionamento da célula, justificando o equacionamento apresentado, por se tratar de um sistema complexo e fugir ao escopo do trabalho, que é avaliar a aplicação de um modelo já existente. Em outras palavras, o capítulo se propõe a introduzir um modelo através da descrição de suas variáveis e informações mais gerais sobre cada equação utilizada.

3.2 Modelo Dinâmico de uma Célula a Combustível PEMFC

O modelo matemático dinâmico de célula a combustível reproduzido na presente monografia foi obtido do artigo publicado no *Journal of Power Sources*, de título "*System level lumped-parameter dynamic modeling of PEM fuel cell*" (Xue, Tang, Smirnova, England, & Sammes, 2004). Este modelo foi desenvolvido em MATLAB/Simulink, a fim de investigar o comportamento de massa, energia e reações eletroquímicas de uma PEMFC. A Figura 3: Modelo da célula a combustível PEMFC desenvolvido no MATLAB/Simulink. apresenta o modelo matemático desenvolvido na forma de diagrama de blocos do Simulink. O principal objetivo do modelo é permitir avaliar o comportamento de combustível, tensão e temperatura de uma célula PEM, a partir de um dado nível de corrente de carga. Para este desenvolvimento, diversos recursos do MATLAB/Simulink foram utilizados, como funções para representar equações, gerador de sinais para representar a corrente de carga, além de multiplexadores e visualizadores de sinais.

Sabe-se que o ar atmosférico é constituído, em sua maioria - 79%, pelo gás nitrogênio. No modelo desenvolvido, os efeitos deste gás no catodo foram ignorados, considerando-se o gás que adentra este canal sendo constituído puramente por oxigênio, o que se trata, portanto, de uma aproximação. No entanto, tal consideração não prejudica as análises pretendidas nesta monografia por não gerar efeitos muito relevantes para o comportamento da célula que se pretende observar. A seção 3.2.1 explicita as equações do modelo, que são baseadas em três volumes de controle: (i) canal do anodo; (ii) canal do catodo; e (iii) corpo da célula a combustível.

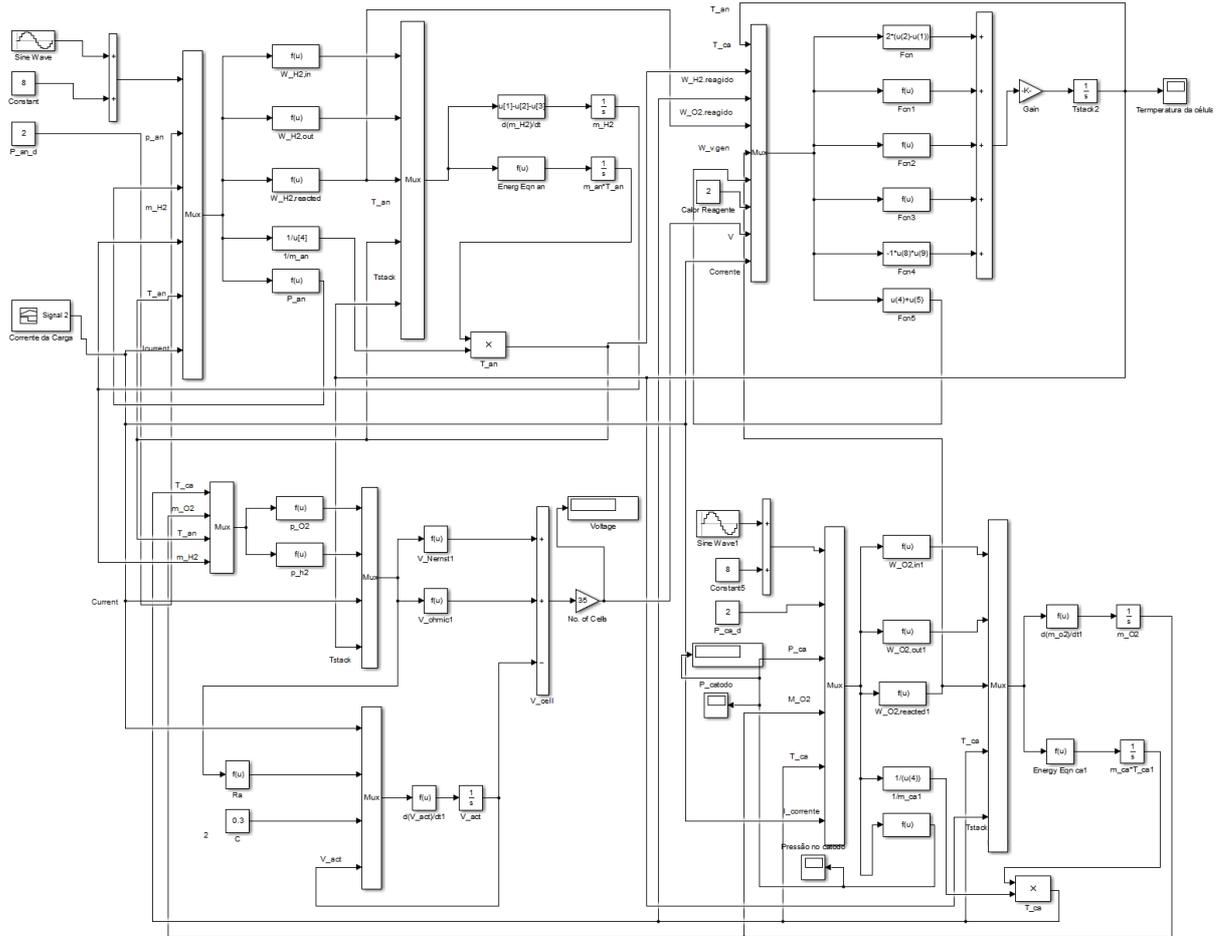


Figura 3: Modelo da célula a combustível PEMFC desenvolvido no MATLAB/Simulink.

3.2.1 Equações gerais

Para desenvolver o modelo dinâmico da célula a combustível de membrana de troca de prótons, é necessário investigar a interação entre massa e energia, bem como as reações eletroquímicas que ocorrem dentro da célula. Além da consideração do gás constituído puramente por oxigênio, conforme descrito anteriormente, outras aproximações são realizadas:

- desconsidera-se os efeitos da energia cinética e potencial;
- gases assumidos como ideais; e
- desconsideração da formação de vapor de água.

A equação da continuidade (ou *continuity equation*, da mecânica dos fluidos) e da energia são dadas em suas formas integrais pelas equações (4) e (5), respectivamente.

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_{V.c.} \rho \, dV + \iint_{S.c.} \rho(\vec{V} \cdot \vec{n}) \, dA = 0; \quad (4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_{V.c.} \rho u_t \, dV + \iint_{S.c.} \rho h(\vec{V} \cdot \vec{n}) \, dA = \frac{dQ}{dt} + \frac{dW}{dt}. \quad (5)$$

Em que (Xue, Tang, Smirnova, England, & Sammes, 2004):

- ρ - densidade do material no volume de controle;
- V - velocidade do vetor fluxo de fluido;
- \vec{n} - vetor unitário normal à superfície de controle;
- u_t - energia interna específica;
- h - entalpia;
- Q - calor adicionado ao volume de controle; e
- W - trabalho desenvolvido no volume de controle.

Os três volumes de controle anteriormente citados são considerados para facilitar a modelagem da célula. Mais especificamente, os volumes do anodo e do catodo englobam o comportamento destes elementos desde sua entrada até sua saída, e o corpo da célula engloba a membrana e outras estruturas de metais. Com isso, as equações deduzidas nas próximas seções são desenvolvidas a partir de (4) e (5).

3.2.2 Anodo e catodo

Considerando o volume de controle compreendendo anodo e catodo, a primeira parcela da equação (4) representa a taxa de mudança de massa dos gases. A segunda parcela representa a taxa de fluxo de massa através da superfície de controle. Esta parcela pode ser dividida em três: (i) subparcela do gás que adentra pelo canal de entrada; (ii) subparcela do gás que flui pelo canal de saída; e (iii) subparcela de difusão de gás através da superfície de difusão do catodo/anodo (Xue, Tang, Smirnova, England, & Sammes, 2004). Esta divisão em subparcelas é formulada em (6).

$$\oint_{S.C.} \rho(\vec{V} \cdot \vec{n}) dA = \iint_{\text{entrada}} \rho(\vec{V} \cdot \vec{n}) dA + \iint_{\text{saída}} \rho(\vec{V} \cdot \vec{n}) dA + \iint_{\text{eletrodo}} \rho(\vec{V} \cdot \vec{n}) dA. \quad (6)$$

Para simplificar, a equação de fluxo de massa através da superfície de controle de entrada/saída é dada pela taxa de fluxo em um bico injetor tradicional, conforme equação (7).

$$\iint \rho(\vec{V} \cdot \vec{n}) dA = k(\Delta p). \quad (7)$$

Em que:

- k - coeficiente da taxa de fluxo de massa; e
- Δp - diferença de pressão.

Considerando agora o eletrodo, terceira parcela da equação (6), o hidrogênio sofre difusão através do anodo poroso, exatamente no catalisador do anodo, onde a semi-reação de oxidação dada pela equação (1) ocorre, formando um próton e um elétron. O oxigênio, por sua vez, sofre difusão através do catodo poroso, em seu catalisador, onde a semi-reação de redução (2) acontece e a diferença de potencial é gerada, produzindo um fluxo de corrente do anodo para o catodo, além de calor e água neste elemento. A taxa de utilização do gás é relacionada à corrente de acordo com a equação (8).

$$\iint_{\text{eletrodo}} \rho(\vec{V} \cdot \vec{n}) dA = N \frac{i}{zF} M \quad (8)$$

Em que:

N - número de células;

i - corrente elétrica;

F - constante de Faraday;

z - número de elétrons em deslocamento (2 para o hidrogênio e 4 para o oxigênio); e

M - massa molar do gás.

A primeira parcela à direita do sinal de igualdade da equação de energia, dQ/dt na equação (5), representa a taxa de calor recebido pelo volume de controle, geralmente considerado apenas por convecção em PEMFCs, sendo a radiação desprezada. Esta taxa pode ser modelada pela equação (9).

$$\frac{dQ}{dt} = h_{\text{conv}} A_{\text{conv}} \Delta T \quad (9)$$

Em que:

h_{conv} - coeficiente de transferência de calor;

A_{conv} - área de convecção; e

ΔT - diferença entre a temperatura da célula e a temperatura dos canais/ambiente.

A taxa de trabalho, dW/dt , segunda parcela à direita da equação de energia (5), é desconsiderada para o volume de controle, pelo fato dos atritos na entrada, na saída e na interface do eletrodo serem desconsiderados.

3.2.3 Corpo da célula

Para o corpo da célula, a água é formada a partir da reação de redução no catodo e pode ser obtida conforme equação (10).

$$\iint_{\text{eletrodo,an}} \rho_{\text{H}_2}(\vec{V} \cdot \vec{n}) dA + \iint_{\text{eletrodo,ca}} \rho_{\text{O}_2}(\vec{V} \cdot \vec{n}) dA = m_{\text{H}_2\text{O}} \quad (10)$$

Em que:

$m_{\text{H}_2\text{O}}$ - massa de água formada.

A primeira parcela do primeiro termo da equação de energia, equação (5), consiste na taxa de acumulação de energia interna ao corpo da célula. A segunda parcela representa a transferência de calor devido ao transporte de massa, que inclui a difusão de gases através dos eletrodos e a água produzida pelas reações. No segundo termo, a taxa de geração de calor pode ser dividida como mostrado na equação (11).

$$\frac{dQ}{dt} = Q_{\text{conv,an}} + Q_{\text{conv,ca}} + Q_{\text{conv,amb}} + \Delta H_{R,T} \iint_{\text{eletrodo}} \rho_{H_2} \rho (\vec{V} \cdot \vec{n}) dA . \quad (11)$$

Em que:

$Q_{\text{conv,an}}$ - calor por convecção entre o corpo da célula e o anodo;

$Q_{\text{conv,ca}}$ - calor por convecção entre o corpo da célula e o catodo;

$Q_{\text{conv,amb}}$ - calor por convecção entre o corpo da célula e o ambiente;

$\Delta H_{R,T}$ - poder calorífico inferior do combustível.

Para o corpo da célula, o valor do trabalho realizado por unidade de tempo, ou seja, a potência elétrica convertida da reação de redução é dada pela equação (12).

$$\frac{dW}{dt} = -NV_{\text{célula}}i \quad (12)$$

Em que:

$V_{\text{célula}}$ - tensão de cada célula a combustível.

3.2.4 Modelagem eletroquímica

Para obter a tensão de cada célula a combustível, é necessário computar a tensão termodinâmica, ou tensão de circuito aberto, dada pela equação de Nernst para temperaturas menores que 100°C (13), e as perdas por ativação e ôhmicas, formuladas nas equações (14) e (15), respectivamente (Amphlett, Mann, Peppley, & Rodrigues, 1996).

$$E_{\text{Nernst}} = 1,229 - (8,5 \times 10^{-4})(T_{\text{corpo}} - 298,15) + (4,308 \times 10^{-5})T_{\text{corpo}}[\ln(P_{H_2}) + 0.5 \ln(P_{O_2})]; \quad (13)$$

$$\eta_{\text{ativ}} = \xi_1 + \xi_2 T_{\text{corpo}} + \xi_3 T_{\text{corpo}} \ln(i) + \xi_4 T_{\text{corpo}} \ln(c_{O_2}); \quad (14)$$

$$\eta_{\text{ohm}} = iR^{\text{interna}}. \quad (15)$$

Em que:

E_{Nernst} - tensão termodinâmica;

T_{corpo} - temperatura no corpo da célula;

P_{H_2} - pressão parcial de hidrogênio;

P_{O_2} - pressão parcial de oxigênio;

P_{O_2} - pressão parcial de oxigênio;

η_{ativ} - perda por ativação dada em volts; e

η_{ohm} - perdas ôhmicas dadas em volts.

Em (14), as constantes ξ_i podem ser obtidas empiricamente utilizando-se regressão linear. Em (15), R^{interna} é dada por (16).

$$R^{\text{interna}} = \xi_5 + \xi_6 T_{\text{corpo}} + \xi_7 i. \quad (16)$$

Para um sistema dinâmico, o efeito da camada de carga dupla consiste em um fenômeno nos eletrodos que ocorre quando dois materiais estão em contato. Então, há um acúmulo de carga na superfície, ou transferência de carga de um para o outro (Larminie & Dicks, 2003). Este efeito pode ser modelado pela resistência de ativação, dada pela equação (17).

$$R_a = -\frac{\eta_{ativ}}{i}. \quad (17)$$

Portanto, o potencial de ativação é dado por:

$$\frac{dv_{ativ}}{dt} = \frac{i}{C} - \frac{v_{ativ}}{R_a C}. \quad (18)$$

Finalmente, a tensão de cada célula é calculada como a soma da tensão termodinâmica com os potenciais de perdas, em (19).

$$V_{celula} = E_{Nernst} + v_{ativ} + \eta_{Ohm}. \quad (19)$$

A Tabela 2: Parâmetros da célula a combustível fornece os valores para as constantes das equações (4) a (19).

Tabela 2: Parâmetros da célula a combustível.

Parâmetro	Valor
$k_{up,an}$ [kg/(s atm)]	$3,6 \times 10^{-6}$
$k_{down,an}$ [kg/(s atm)]	$2,2 \times 10^{-4}$
$p_{s,an}$ [atm]	2,4
p_{atm} [atm]	1
$T_{an,in}$ [K]	296,5
$T_{an,out}$ [K]	296,5
$c_{v,H2}$ [J/(kg K)]	10.124,71
$c_{p,H2}$ [J/(kg K)]	14.209
M_{H2} [kg/mol]	2,016
$k_{up,ca}$ [kg/(s atm)]	$3,6 \times 10^{-4}$
$k_{down,ca}$ [kg/(s atm)]	$2,2 \times 10^{-3}$
$p_{s,ca}$ [atm]	2,4
N	35
$T_{ca,in}$ [K]	296,5
$T_{ca,out}$ [K]	296,5
$c_{v,O2}$ [J/(kg K)]	662,2
$c_{p,O2}$ [J/(kg K)]	922
M_{O2} [kg/mol]	32
$k_{conv,amb}$ [W/K]	17
$k_{conv,an}$ [W/K]	2
$k_{conv,ca}$ [W/K]	10
$m_{corpo} c_{p,body}$ [J/K]	35000
F [A s/mol]	$9,648456 \times 10^4$
$\Delta H_{R,T}$ [J]	$1,196 \times 10^8$
Vol_{an} [m ³]	0,005
Vol_{ca} [m ³]	0,001
ξ_1	-0,9514
ξ_2	0,00312
ξ_3	-0,000187
ξ_4	$7,4 \times 10^{-5}$
ξ_5	0,01605
ξ_6	$-3,5 \times 10^{-5}$
ξ_7	8×10^{-5}
C [F]	2
T_{amb} [K]	296,5

Fonte: (Xue, Tang, Smirnova, England, & Sammes, 2004).

3.3 Modelo do MATLAB/Simulink

O modelo de célula a combustível do software MATLAB/Simulink está disponível a partir da versão 2015. Para se ter acesso a tal modelo, é necessário digitar “*power_fuel_cell*” na janela de comando do MATLAB. A Figura 4 apresenta a interface deste modelo para o usuário.

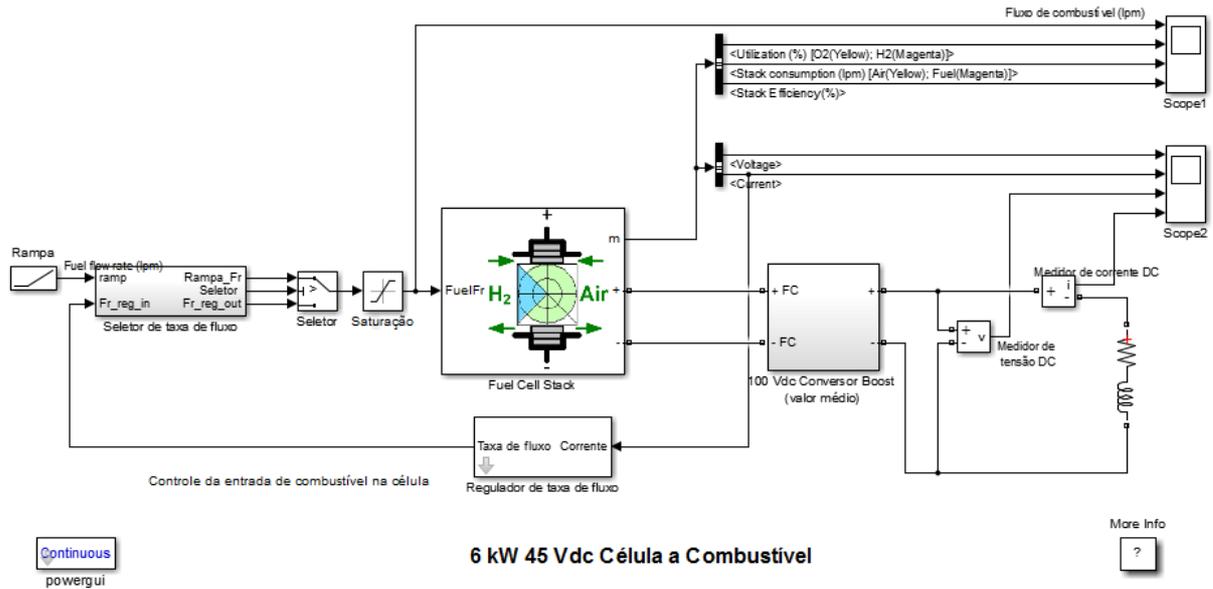


Figura 4: Modelo de célula a combustível/carga incorporado ao MATLAB/Simulink.

O modelo célula/carga da Figura 4 permite a especificação dos parâmetros da célula a combustível e inclui um conversor de corrente contínua do tipo *boost*, medidores, carga resistor/indutor (RL) e equações de controle de combustível de entrada da célula. Este modelo, diferentemente do apresentado na seção 3.2, possui formas de ligação elétrica (*links*), onde é possível modelar um sistema elétrico, assim como em outros *softwares*, como o Pspice®, por exemplo.

A célula a combustível é previamente configurada através da interface com o usuário mostrada na Figura 5: Configuração da célula a combustível. Neste caso de estudo, o modelo está configurado como célula a combustível de membrana de troca de prótons, de 6 kW e 45 V_{cc}, composto de 65 células, com eficiência nominal de 55%, além de outros dados que podem ser visualizados na Figura 5: Configuração da célula a combustível.

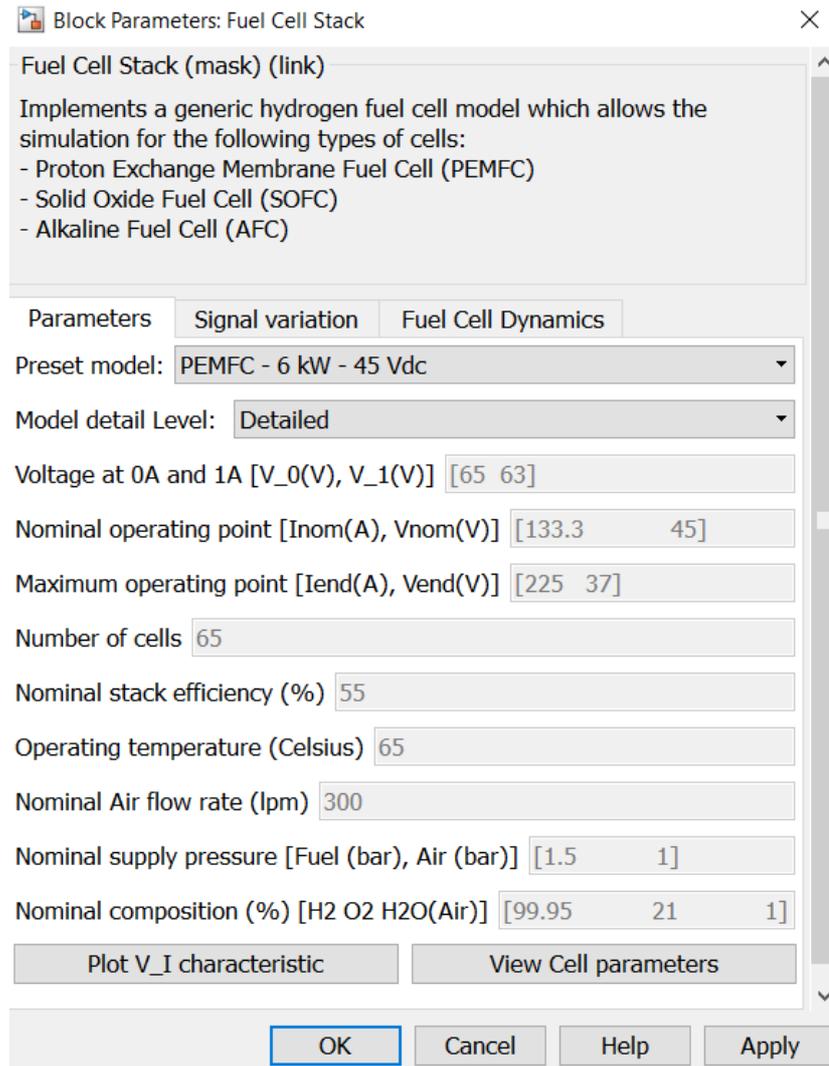


Figura 5: Configuração da célula a combustível do modelo MATLAB/Simulink.

O conversor *boost* da Figura 4: Modelo de célula a combustível/carga incorporado ao MATLAB/Simulink tem por finalidade elevar a tensão contínua de 45 V_{cc} gerada pela célula ao valor de 100 V_{cc}, para ser aplicada à carga RL. O modelo de regulador de fluxo de combustível funciona de tal forma que, a partir de um valor de corrente de carga, determina o volume de combustível necessário. Este cálculo é efetuado de acordo com a equação (20) (Khan, Nawaz, Muhammad, & Khadim, 2003).

$$U_{f_{H_2}} = \frac{60000 \cdot R \cdot T \cdot N_i}{z \cdot F \cdot P_{comb} \cdot V_{imp(comb)} \cdot x\%} \quad (20)$$

Em que:

- R - constante de Avogrado;
- T - temperatura;
- P_{comb} - pressão de suprimento de combustível;
- V_{ipm(comb)} - fluxo de combustível;
- x% - porcentagem de hidrogênio no combustível.

A Figura 6 apresenta a interface do modelo MATLAB/Simulink para especificação dos parâmetros do regulador de fluxo de combustível.

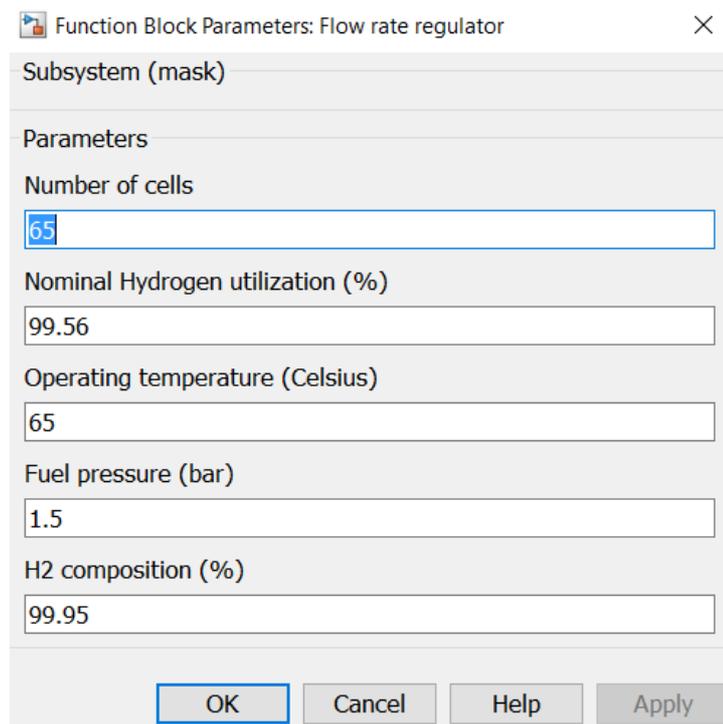


Figura 6: Configuração do regulador de fluxo de combustível do modelo MATLAB/Simulink.

Há também o seletor de fluxo de combustível, cuja função é alternar a alimentação entre o regulador de fluxo e um sinal de rampa, que promove o aumento do fluxo até um valor limite de 85 litros por minuto, provocando variação na corrente. Para fins ilustrativos, a Figura 7: Subsistema seletor de fluxo de combustível apresenta o diagrama de blocos do subsistema do Simulink correspondente ao seletor de fluxo.

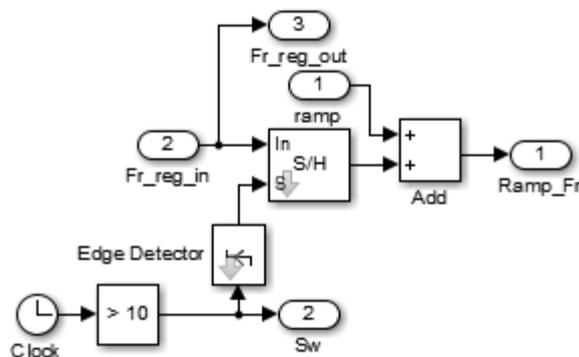


Figura 7: Subsistema seletor de fluxo de combustível do modelo MATLAB/Simulink.

A carga, por sua vez, é simplesmente um circuito RL série operando em corrente contínua. Seus parâmetros podem ser configurados através da interface com o usuário mostrada na Figura 8: Configuração da carga.

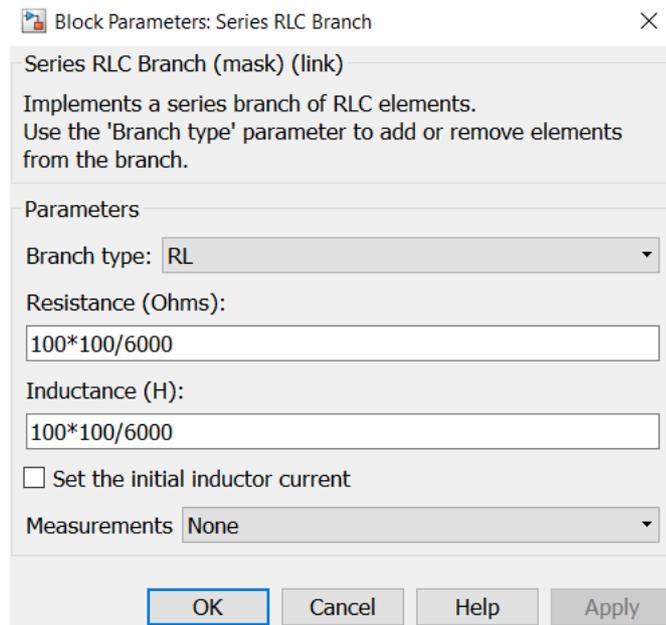


Figura 8: Configuração da carga no modelo MATLAB/Simulink.

Por fim, o diagrama de blocos do conversor *boost* é mostrado na Figura 9: Subsistema do conversor *boost*. Este conversor consiste em um dispositivo de eletrônica de potência utilizado para elevar a tensão de entrada em uma proporção especificada em sua configuração, neste caso, de $45 V_{cc}$ para $100 V_{cc}$, conforme mencionado anteriormente, com uma constante de tempo de 1,0 segundo.

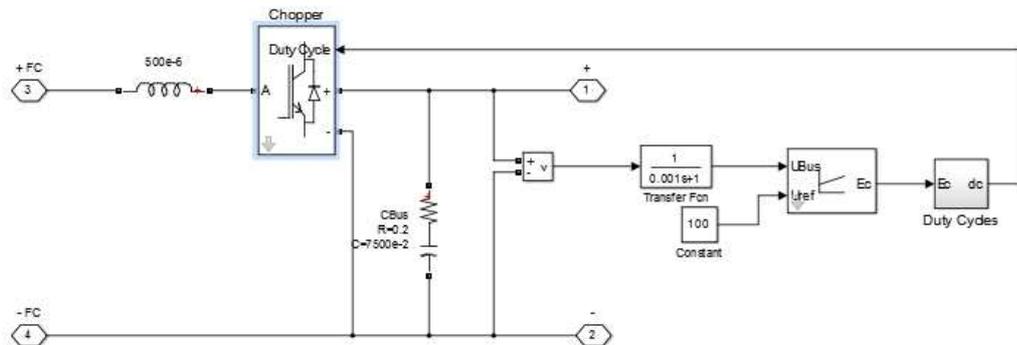


Figura 9: Subsistema do conversor *boost* do modelo MATLAB/Simulink.

3.4 Conclusões Parciais

Neste capítulo, foram apresentados detalhes dos dois modelos de célula a combustível avaliados nesta monografia. O primeiro foi desenvolvido neste trabalho com base em uma referência da literatura, a partir de equações físicas que modelam células PEMFC. O segundo, por sua vez, corresponde ao existente no software MATLAB/Simulink, versão 2015 ou superior. Este modelo permite simular o funcionamento da célula e obter seu comportamento em termos de corrente e tensão contínua em uma carga modelada como circuito RL série. Destaca-se que o modelo do MATLAB/Simulink é mais abrangente e dispõe de sistemas auxiliares para tratamento da tensão de saída, como conversores. O primeiro modelo é focado apenas no comportamento da célula, porém permite explicitar suas variáveis e princípio de funcionamento, por ter sido desenvolvido a partir das equações de uma célula PEMFC.

Capítulo 4

SIMULAÇÕES

4.1 Introdução

Este capítulo apresenta uma análise das simulações realizadas com o modelo de célula combustível da literatura, reproduzido computacionalmente no âmbito desta monografia, bem como com o modelo do software MATLAB/Simulink disponível na versão 2015 ou superior. As análises têm por finalidade estabelecer o comportamento das variáveis de saída em função das de entrada, a fim de fornecer subsídios para a compreensão dos princípios e comportamento de uma célula combustível do tipo membrana de troca de prótons ou PEMFC.

4.2 Simulações com o Modelo Implementado (Xue, Tang, Smirnova, England, & Sammes, 2004)

Esta seção apresenta as simulações dos efeitos transientes do modelo de célula a combustível implementado. Os parâmetros e constantes da célula, apresentados no capítulo anterior, foram inseridos no diagrama de blocos do Simulink, juntamente com as equações e medidores. O tempo total de simulação foi configurado em 36.000 segundos, o que equivale a 10 horas de operação. Este tempo é o mesmo simulado em (Xue, Tang, Smirnova, England, & Sammes, 2004) e permite avaliar a operação contínua da célula durante períodos maiores em aplicações como, por exemplo, para veículos elétricos. Em tais aplicações, estudos de confiabilidade do sistema de geração são necessários através de simulação de longa duração de seu comportamento.

No modelo reproduzido, o sinal de corrente da célula é pré-estabelecido, ou seja, a corrente de carga é previamente definida, e as variáveis de entrada do sistema são avaliadas em função desta corrente. A Figura 10 apresenta o sinal de corrente de saída gerado por um elemento do modelo denominado *Signal Builder*, do Simulink. Este sinal de corrente foi feito desta forma para que se possa observar o comportamento dinâmico da célula e também seu comportamento diante de três níveis de corrente.

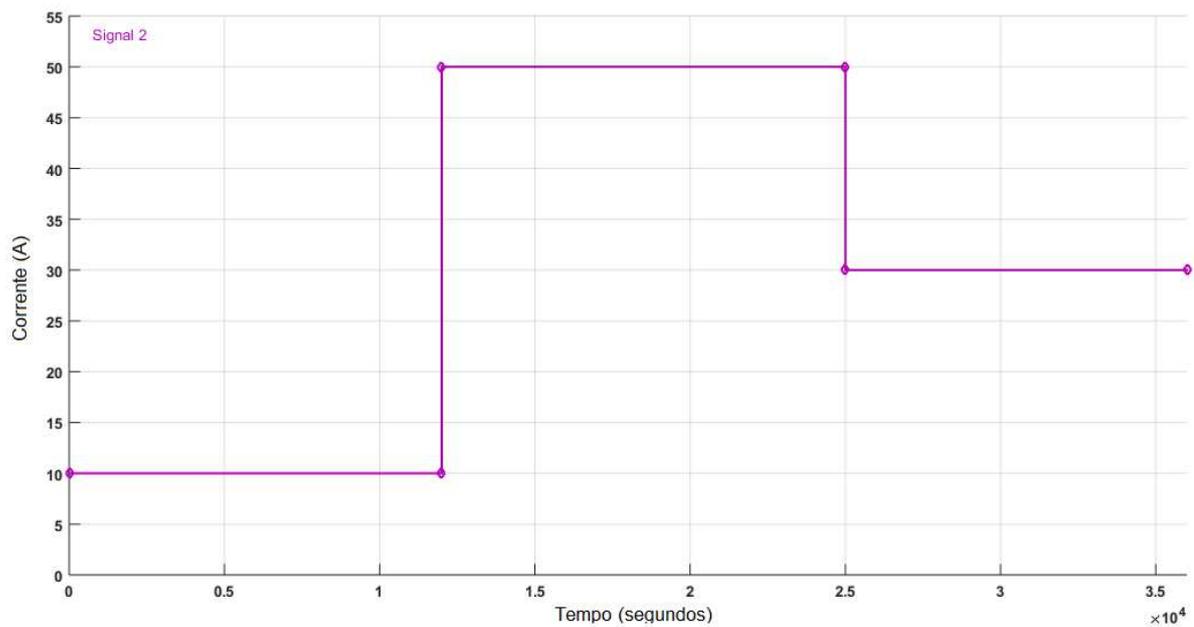
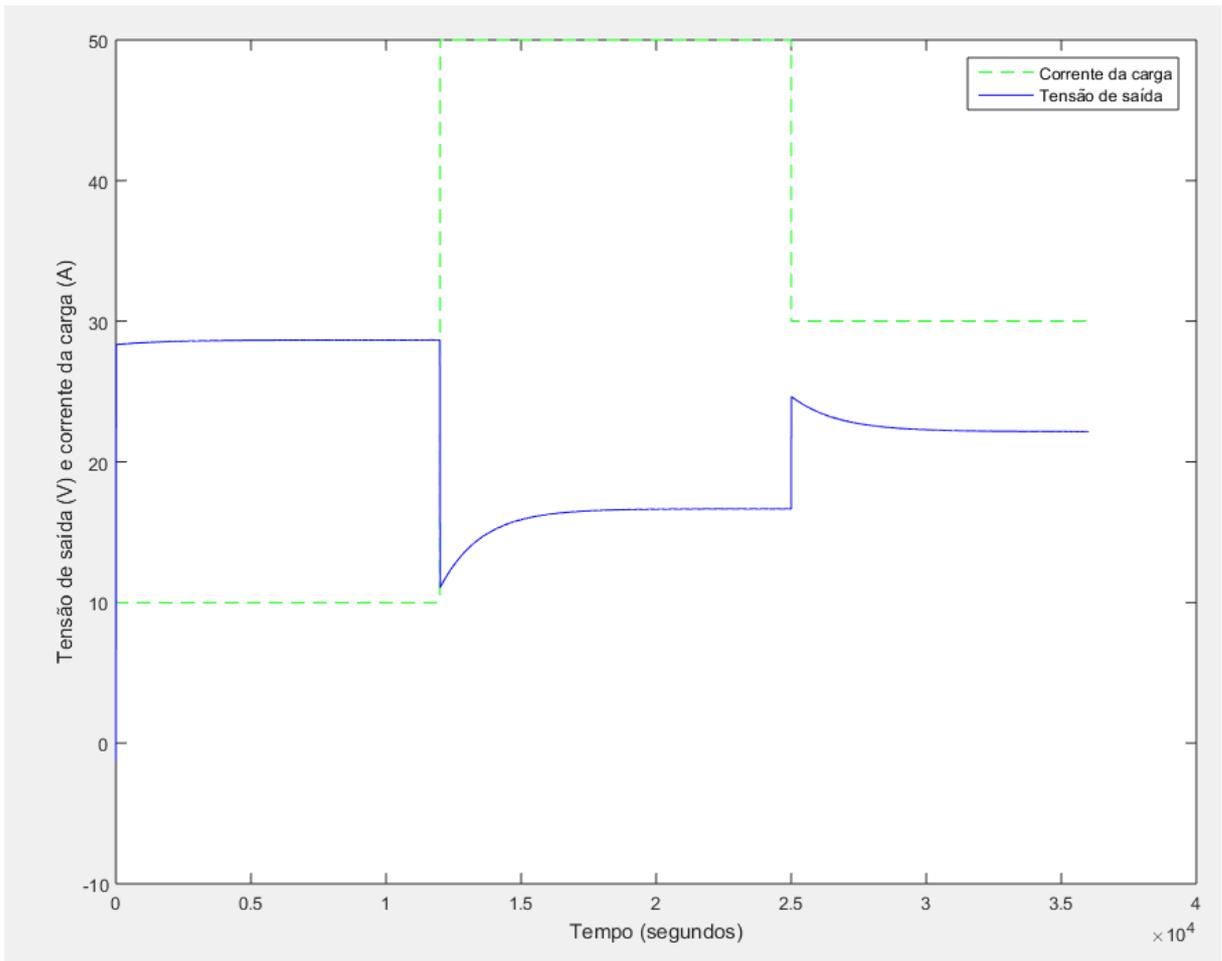
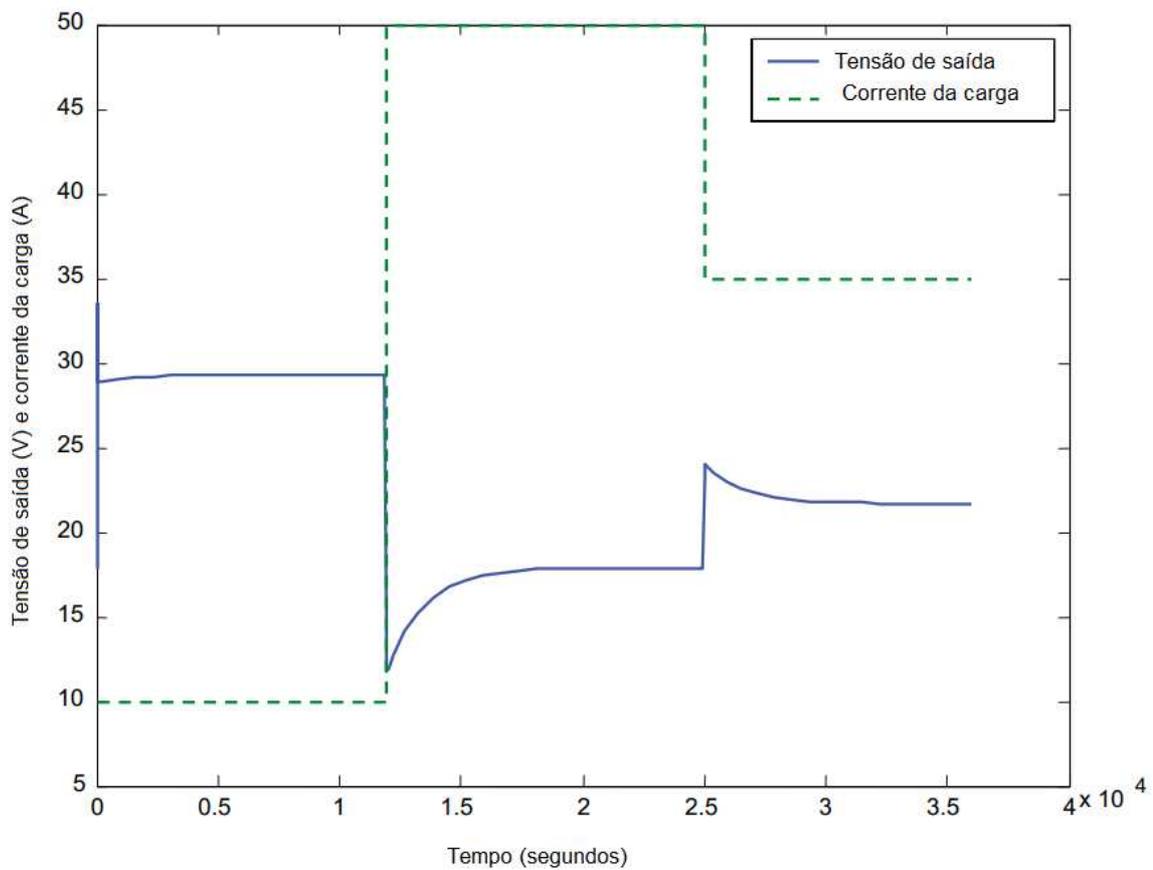


Figura 10: Sinal de corrente de saída da célula gerado no *Signal Builder*, do Simulink.

As Figuras 11 e 12 apresentam os gráficos obtidos a partir da simulação do modelo reproduzido e os respectivos gráficos encontrados na referência utilizada como base para este modelo (Xue, Tang, Smirnova, England, & Sammes, 2004). Estes gráficos incluem os perfis de tensão e de corrente da célula a combustível.



(a)



(b)

Figura 11: Perfis de tensão e corrente (a) do modelo implementado; e (b) da referência base.

Na Figura 11.(a), é possível observar o comportamento de tensão e corrente de saída da célula a combustível, plotada utilizando-se o elemento do Simulink denominado *Signal Builder*. No tempo 12.000 segundos, a corrente de carga é elevada de 10 A para 50 A. Com isto, a tensão cai de aproximadamente 29 V para 12 V no período transitório, alcançado o valor de 17 V no novo regime permanente após a perturbação. Posteriormente, em 25.000 segundos, a corrente é reduzida de 50 A para 35 A, provocando aumento na tensão para 22 V após a acomodação. Verifica-se, portanto, o comportamento de variação inverso entre tensão e corrente na célula a combustível, típico da maioria dos geradores elétricos em suas regiões operativas.

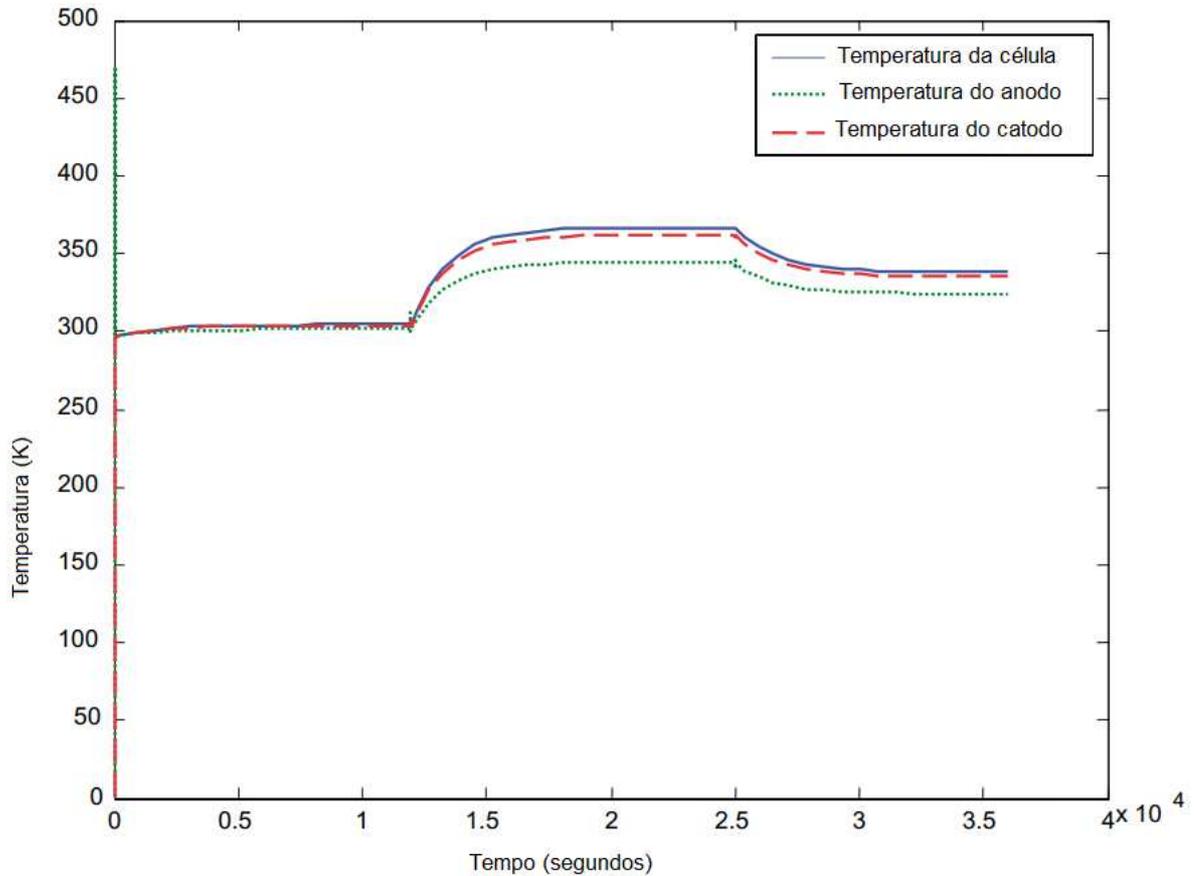
Observa-se que a potência da célula varia de 290 W para 850 W com a primeira variação de corrente, e de 850 W para 770 W com a segunda alteração. Este comportamento demonstra a variação elevada de potência em função de tensão e corrente, mostrando que a operação da célula em termos de rendimento é extremamente sensível a condições como consumo de combustível e temperatura, que impactam na tensão e na corrente. Neste sentido, o modelo utilizado deve ser aprimorado para a inclusão de outros fatores, como a presença de nitrogênio, a fim de se reproduzir esta variação da forma mais fiel possível.

Na curva de tensão, é possível perceber uma variação não linear, principalmente na alteração da corrente de carga. Este comportamento deve-se a efeitos capacitivos, que ocorrem na célula, bem como a mudanças de temperatura e pressões parciais do hidrogênio e oxigênio (Xue, Tang, Smirnova, England, & Sammes, 2004).

O comportamento de temperatura pode ser visualizado na Figura 12:.. Até o acréscimo de corrente de carga em 12.000 segundos, a temperatura aumenta lentamente, pois o calor gerado pela reação é inferior ao calor trocado com a vizinhança. Quando a corrente aumenta

de 10 A para 50 A, o calor gerado pela reação aumenta e a temperatura se eleva no interior do corpo da célula, no catodo e no anodo, até o tempo de 25.000 segundos. Por fim, quando a corrente é reduzida de 50 A para 30 A, em 25.000 segundos, a quantidade de calor gerado pela reação é reduzida, bem como a temperatura do conjunto.

No modelo reproduzido, as temperaturas do anodo e do catodo variaram praticamente da mesma forma entre si, de acordo com a Figura 12: Temperatura. Isto se deve, provavelmente, ao fato de que o gás nitrogênio no catodo é ignorado no modelo implementado, enquanto que no modelo original, os efeitos deste gás são considerados.



(a)

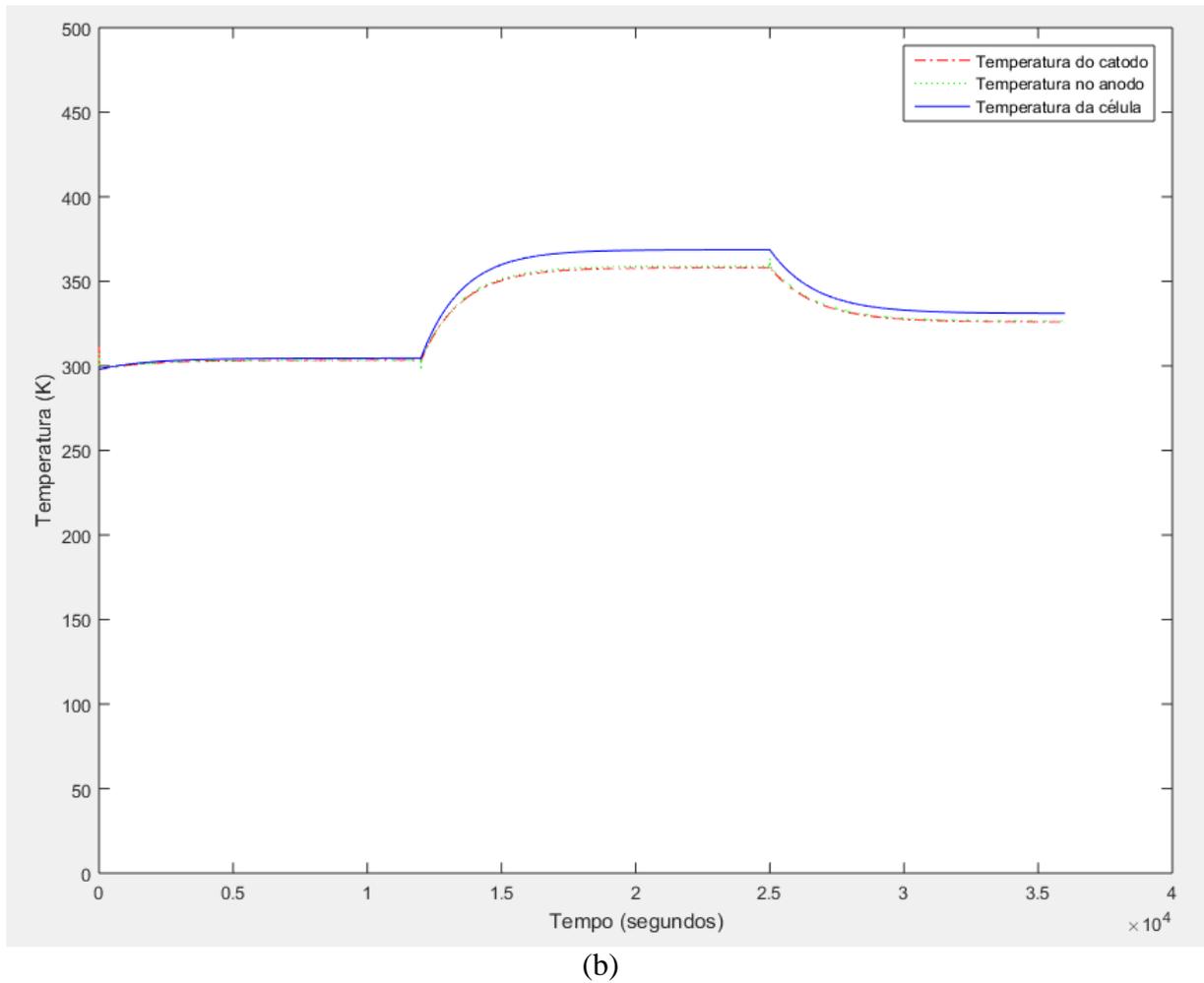


Figura 12: Temperaturas (i) obtidas a partir do modelo implementado (a); e (b) da referência base.

O comportamento do consumo de combustível (H_2) em função da corrente de carga é mostrado na Figura 13: Comportamento da utilização de combustível pelo ânodo.. Este consumo, cujo comportamento é representado o terceiro termo da equação (8), estabelece o aumento da utilização do combustível à medida que aumenta a corrente de carga, conforme esperado. Esta utilização se dá por meio da difusão, do hidrogênio no ânodo, devido ao aumento da corrente.

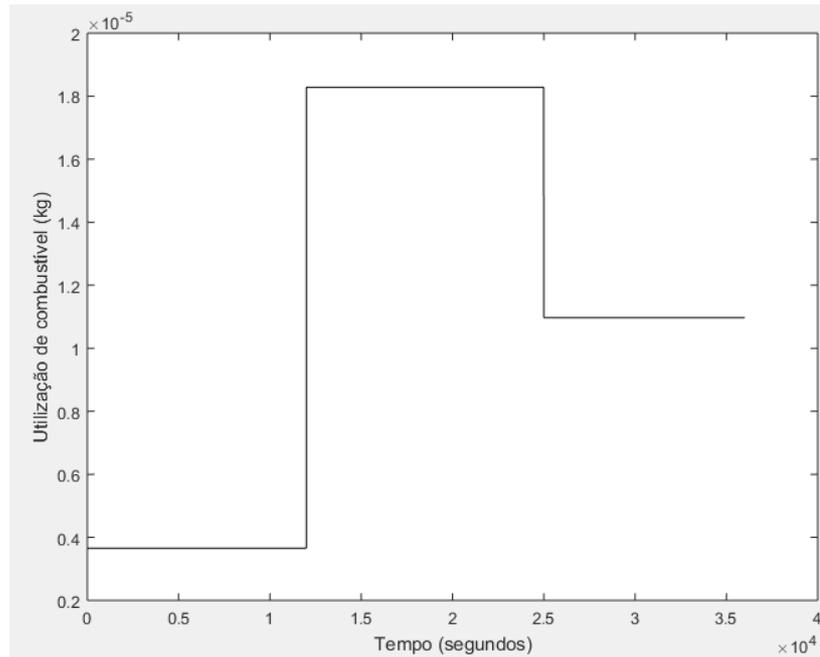


Figura 13: Comportamento da utilização de combustível pelo anodo.

4.3 Simulações com o Modelo do MATLAB/Simulink

O modelo de célula a combustível do MATLAB/Simulink foi associado a um modelo de inversor com filtro e regulação de tensão, para simular a alimentação de uma carga residencial trifásica em corrente alternada (CA) conectada em estrela. A simulação propõe-se, portanto, à avaliação da operação da célula a combustível como fonte de geração distribuída.

4.3.1 Modelo completo

O modelo completo do sistema incluindo a célula a combustível, inversor, filtro, regulador de tensão e carga, é ilustrado na Figura 14. Conforme descrito no Capítulo 3, a célula a combustível é de 6 kW e 45 Vdc. O modelo detalhado do inversor com filtro pode ser acessado pelo usuário através do código “*power_bridges*”.

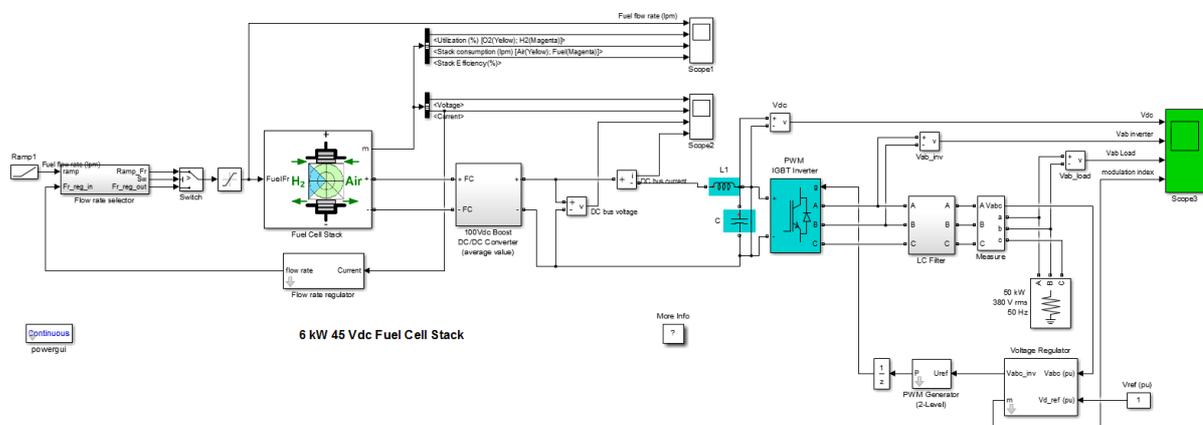


Figura 14: Modelo de célula a combustível com inversor simulado no MATLAB/Simulink.

No Capítulo 3, aspectos do modelo da célula a combustível, de seus sistemas periféricos, bem como de seu funcionamento, são descritos. Nas próximas seções, alguns aspectos do inversor, carga, regulador de tensão e sistema de modulação para controle da tensão de saída são abordados.

4.3.2 Dados do inversor

O inversores são circuitos estáticos que têm a função de converter uma potência contínua em alternada. A tensão de saída apresenta uma forma de onda periódica que, embora não senoidal, pode ser filtrada para se aproximar de uma senoide (Ahmed, 2000). Como a célula produz corrente contínua, este tipo de conversor é necessário para a interligação com a rede de distribuição como fonte de geração distribuída, ou mesmo com dispositivos que fazem uso da energia elétrica da rede. Um inversor PWM (*Pulse Width Modulation*) com IGBTs (*Insulated Gate Bridges Transistor*) foi utilizado. Esta configuração, ilustrada na Figura 15, encontra-se disponível no Simulink.

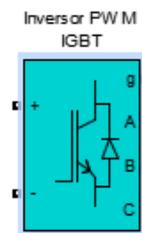


Figura 15: Inversor trifásico PWM por IGBTs do MATLAB/Simulink.

O inversor da Figura 14 possui três entradas, uma positiva e uma negativa para a corrente contínua, além do gatilho, do inglês *gate*, e três saídas, correspondentes às fases A, B e C do sistema trifásico de tensões alternadas. A Figura 16: Interface para os parâmetros do inversor PWM / IGBT do MATLAB/Simulink. mostra a interface com o usuário para a especificação de parâmetros do inversor PWM / IGBT.

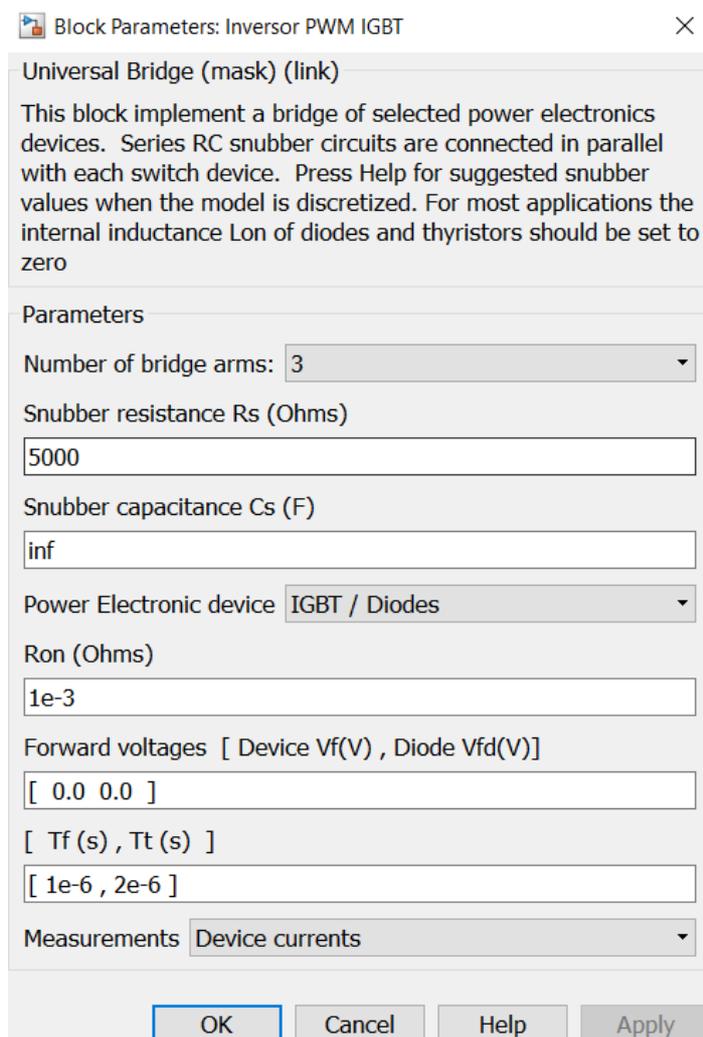


Figura 16: Interface para os parâmetros do inversor PWM / IGBT do MATLAB/Simulink.

4.3.3 Dados da carga

A carga RL série associada ao modelo MATLAB/Simulink descrita no Capítulo 3 foi substituída por uma carga trifásica resistiva conectada em estrela, a ser alimentada com tensão alternada. Os níveis de potência e tensão configuram uma carga residencial de baixa tensão, a fim de demonstrar a operação da célula a combustível como fonte de geração distribuída na rede de distribuição. A Figura 17 ilustra o modelo de carga utilizado. A Figura 18, por sua vez, apresenta a interface para a especificação dos parâmetros de carga, incluindo tensão eficaz entre fases, frequência nominal, e potências ativa e reativa. As simulações são efetuadas para a tensão de linha de 220 V, típica em instalações residenciais de baixa tensão, frequência de 60 Hz e potência de 5 kW. Destaca-se que a célula a combustível tem capacidade de 6 kW e, portanto consegue atender à demanda de carga de 5 kW.

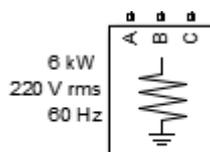


Figura 17: Bloco de carga resistiva trifásica em estrela do MATLAB/Simulink.

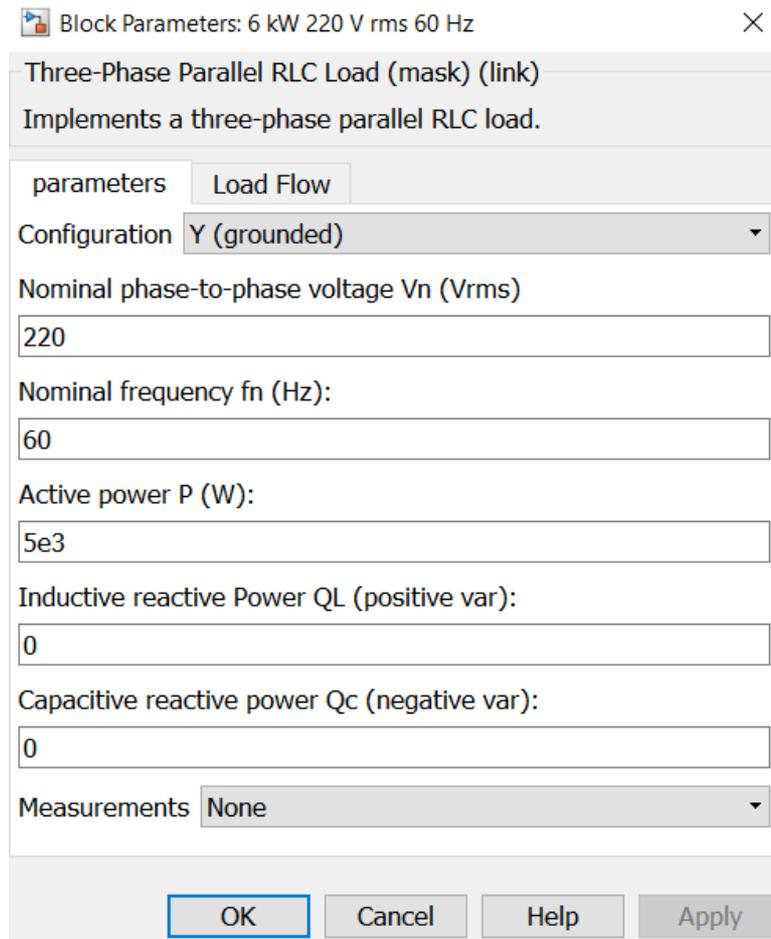


Figura 18: Interface para os parâmetros de carga do modelo MATLAB/Simulink.

4.3.4 Regulador de tensão

O regulador de tensão tem a função de manter a tensão de saída o mais próxima possível de um valor de referência, considerado como 1,0 pu na simulação realizada nesta monografia. A Figura 18 apresenta o bloco do modelo MATLAB/Simulink para a função de regulação de tensão e a Figura 19 mostra a interface para os parâmetros do regulador, como os ganhos proporcional e integral, K_p e K_i , respectivamente.

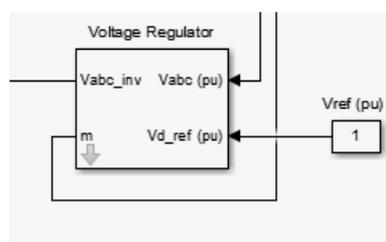


Figura 19: Bloco do regulador de tensão do modelo MATLAB/Simulink.

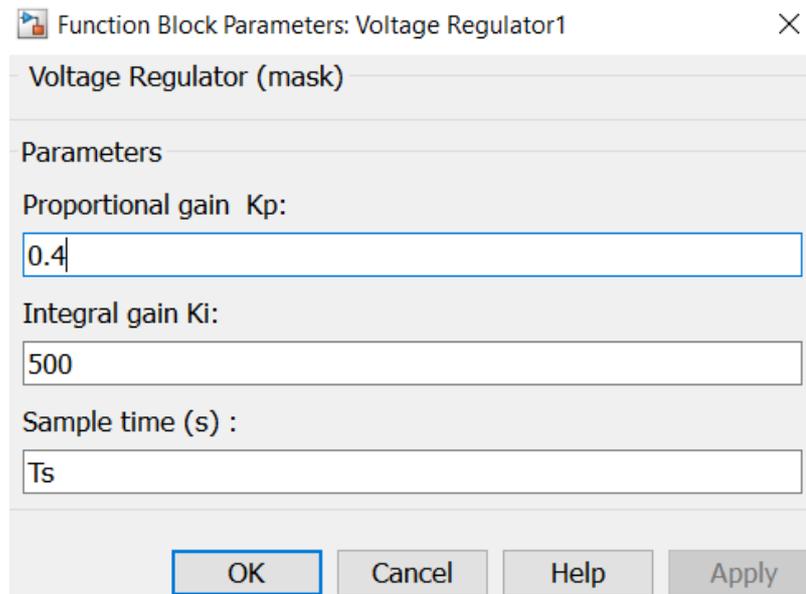


Figura 20: Interface para os parâmetros do regulador de tensão do modelo MATLAB/Simulink.

4.3.5 Gerador PWM

O gerador PWM tem como função controlar a forma de onda da tensão de saída, através de modulação de largura de pulso de uma onda quadrada. Esta função reduz a necessidade de filtros. Para tanto, este gerador é conectado ao *gate* do inversor de IGBTs previamente descrito. A Figura 21 ilustra o bloco do gerador PWM do modelo MATLAB/Simulink e a Figura 22 a interface para a especificação dos dados deste gerador.

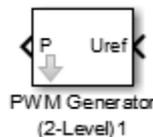


Figura 21: Bloco do gerador de PWM do modelo MATLAB/Simulink.

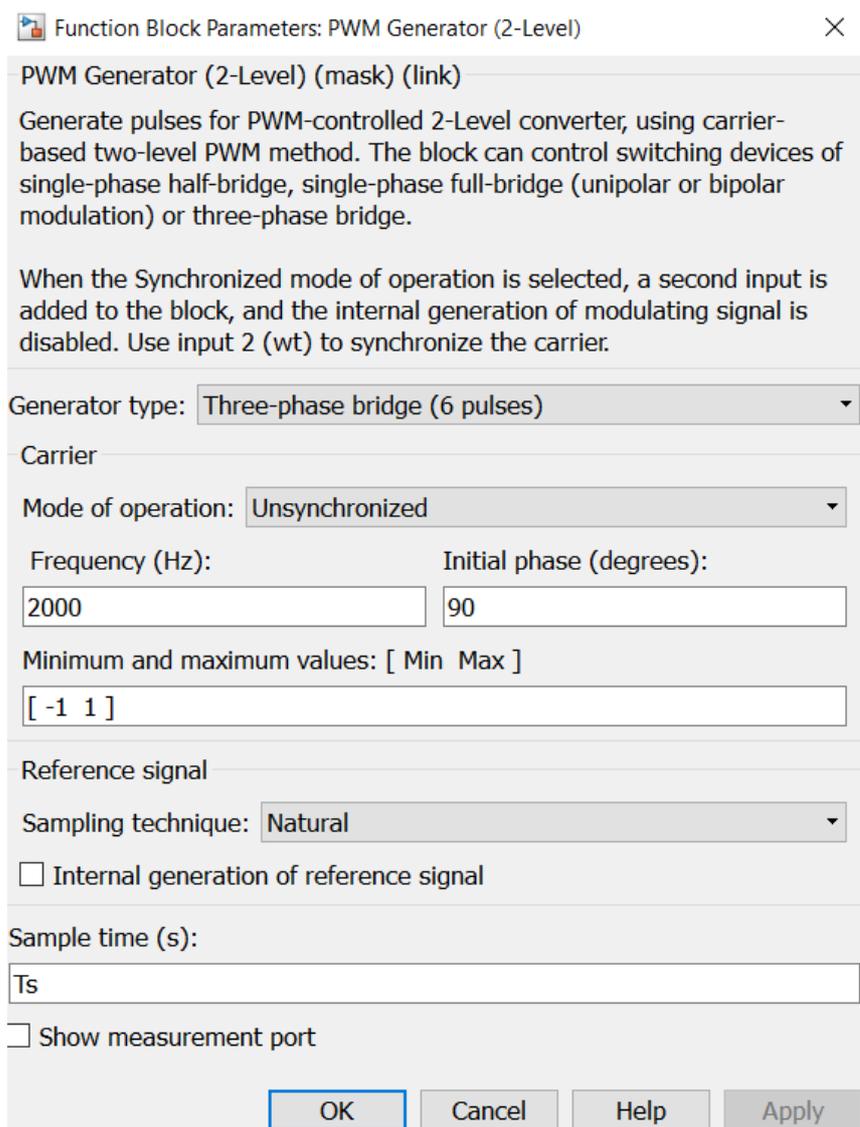


Figura 22: Interface para os parâmetros do gerador de PWM do modelo MATLAB/Simulink.

4.3.6 Resultados obtidos

Para avaliar de forma abrangente o modelo de célula combustível do MATLAB/Simulink, a fim de permitir a análise do efeito dos componentes periféricos utilizados, como o inversor, duas simulações são realizadas conforme descrito a seguir.

- Simulação 1: célula alimentando uma carga monofásica RL com tensão contínua, cujo modelo é descrito no Capítulo 3;
- Simulação 2: célula alimentando uma carga trifásica com tensão alternada, cujo modelo é descrito nas seções anteriores; e
- Simulação 3: célula alimentando uma carga trifásica com tensão alternada em 200V, cujo modelo é descrito nas seções anteriores.

O tempo de simulação em todas as condições anteriores é de 20 segundos, pois a proposta de utilização deste modelo é somente avaliar a aplicabilidade de uma célula a

combustível para suprimento de cargas residenciais utilizando-se uma toolbox existente, através da reprodução das formas de onda de alimentação da carga. Ou seja, esta aplicação não tem o propósito de avaliar a operação contínua ou a confiabilidade do sistema de geração através de uma simulação de longa duração, pois o objeto principal de avaliação consiste no potencial de aplicação da célula, e não no modelo MATLAB/Simulink já existente. Neste modelo, é possível alterar a alimentação de combustível da célula a fim de avaliar o impacto em sua tensão e corrente de saída. Destaca-se que esta avaliação é contrária à permitida no modelo anterior, desenvolvido com base em (Xue, Tang, Smirnova, England, & Sammes, 2004), em que se altera a corrente para avaliar o impacto no combustível consumido. As simulações e análises destes dois modelos são, portanto, complementares.

Simulação 1

Efetuada-se a simulação do sistema sem o inversor, e com uma carga monofásica RL cujos valores de resistência e de indutância são de $1,67 \Omega$ e $1,67 \text{ H}$, respectivamente, obtém-se as formas de onda de tensão e de corrente tanto na entrada quanto na saída do conversor *boost*, nas Figuras 23 e 24, em função do tempo de simulação. A Figura 23 consiste em tensão e corrente antes do conversor, enquanto a Figura 24 refere-se à tensão e corrente após o conversor. Nos primeiros 10 segundos, a alimentação de combustível é constante e calculada pela equação (20) do Capítulo 3. Após este intervalo, o regulador de fluxo é retirado de funcionamento e a injeção de combustível aumenta até um valor máximo de 85 litros por minuto.

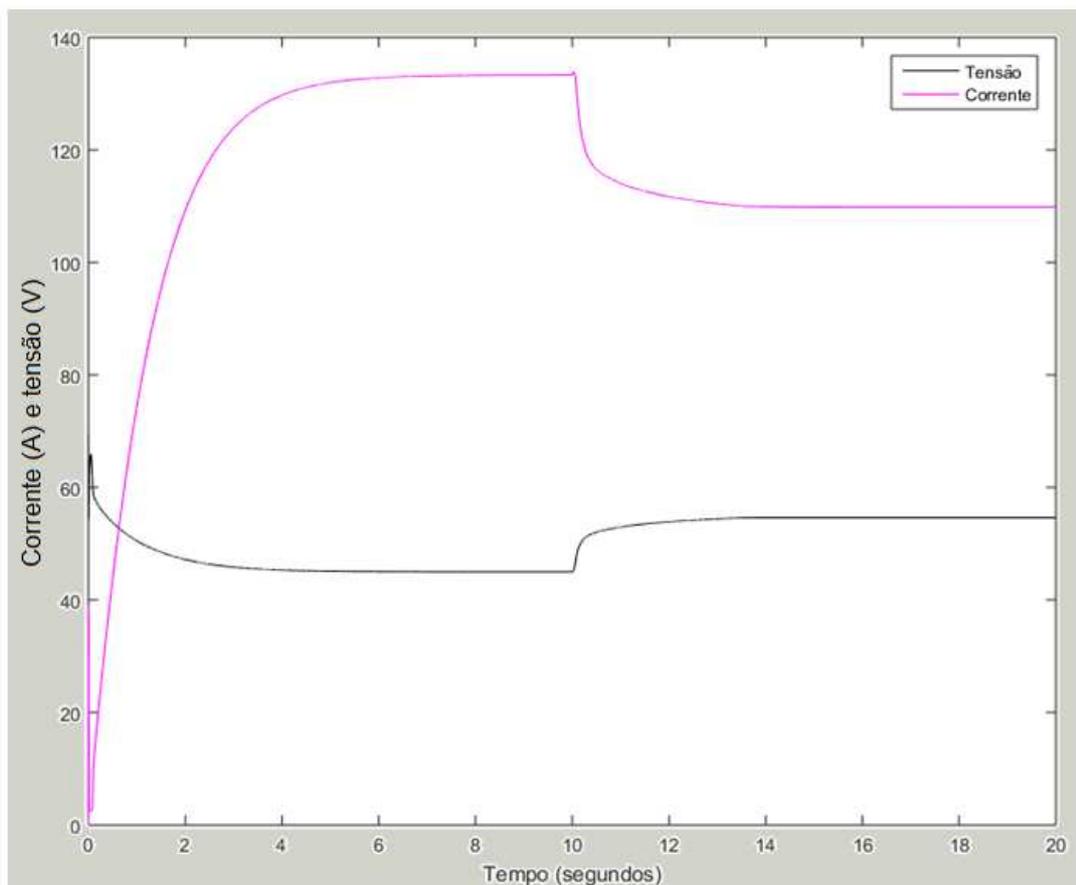


Figura 23: Resultados do modelo MATLAB/Simulink sem inversor e com carga monofásica, antes do *boost*.

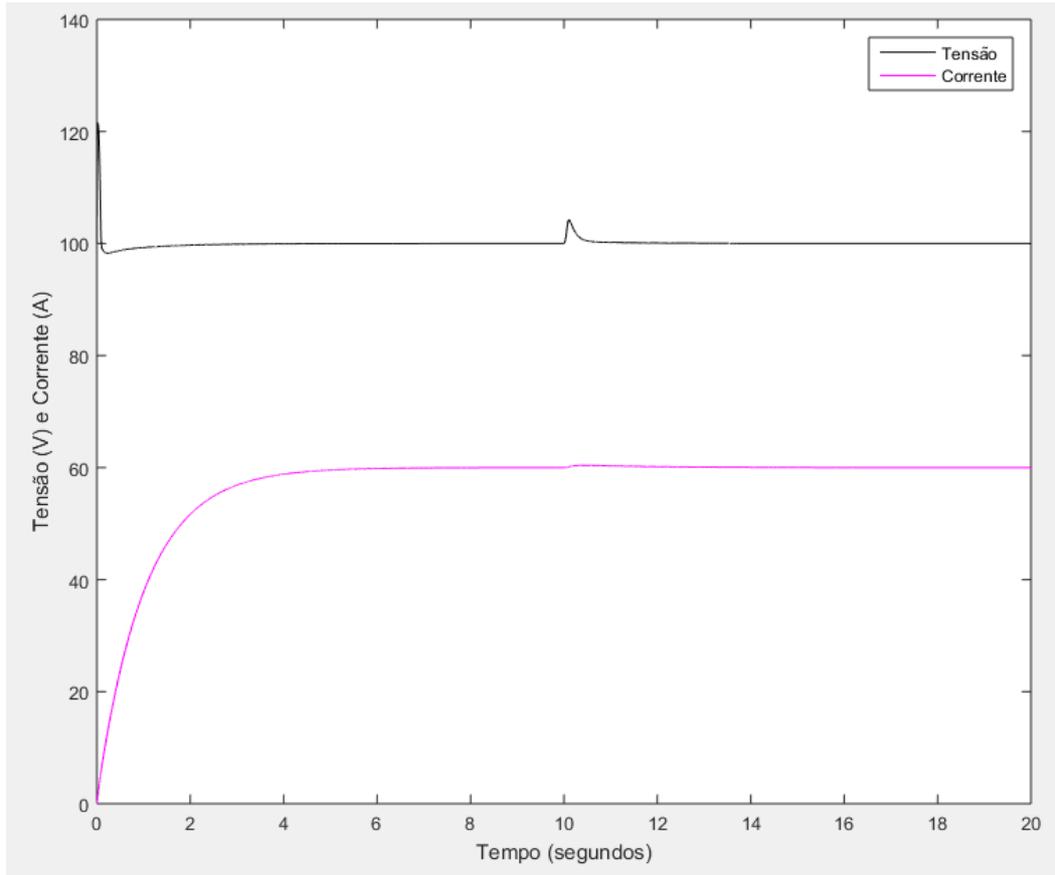


Figura 24: Resultados do modelo MATLAB/Simulink sem inversor e com carga monofásica, após o *boost*.

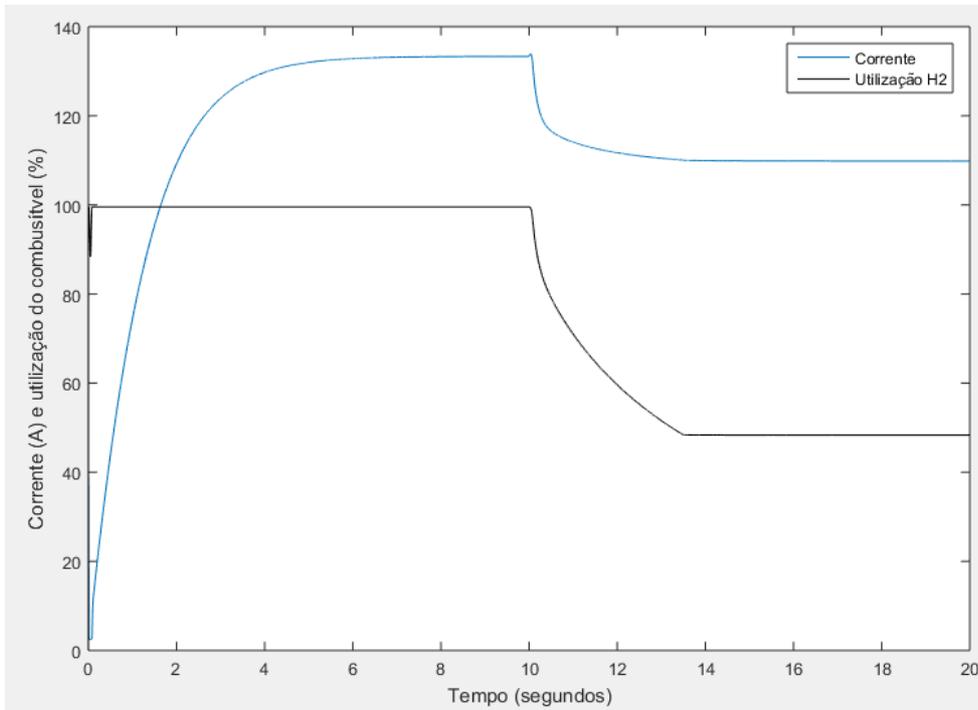


Figura 25: Corrente na saída da célula e utilização de hidrogênio.

O motivo pelo qual as formas de onda antes e após o conversor *boost* diferem entre si está na regulação que este conversor realiza. Observa-se que os sinais de saída do conversor são praticamente constantes em regime permanente, independente da mudança no suprimento de combustível conforme a Figura 24. Antes do conversor, o aumento no suprimento de combustível resulta na elevação da tensão de saída da célula por conta do aumento da tensão de Nernst (termodinâmica) dada pela equação (13) e em redução de sua corrente. Comportamento análogo foi verificado no modelo de (Xue, Tang, Smirnova, England, & Sammes, 2004) desenvolvido nesta monografia, em que a elevação da corrente da célula implica em redução da tensão de saída e um aumento do consumo de combustível.

Simulação 2

Após inserir o inversor e seus sistemas auxiliares, filtro, regulador de tensão e gerador PWM, e com a carga trifásica descrita anteriormente, a Simulação 2 permitiu obter a tensão contínua após o conversor *boost*, a tensão alternada após o inversor, a tensão alternada na carga após a filtragem do gerador PMW. Estes sinais são apresentados nas Figura 26, 27 e 28, na mesma ordem conforme citados.

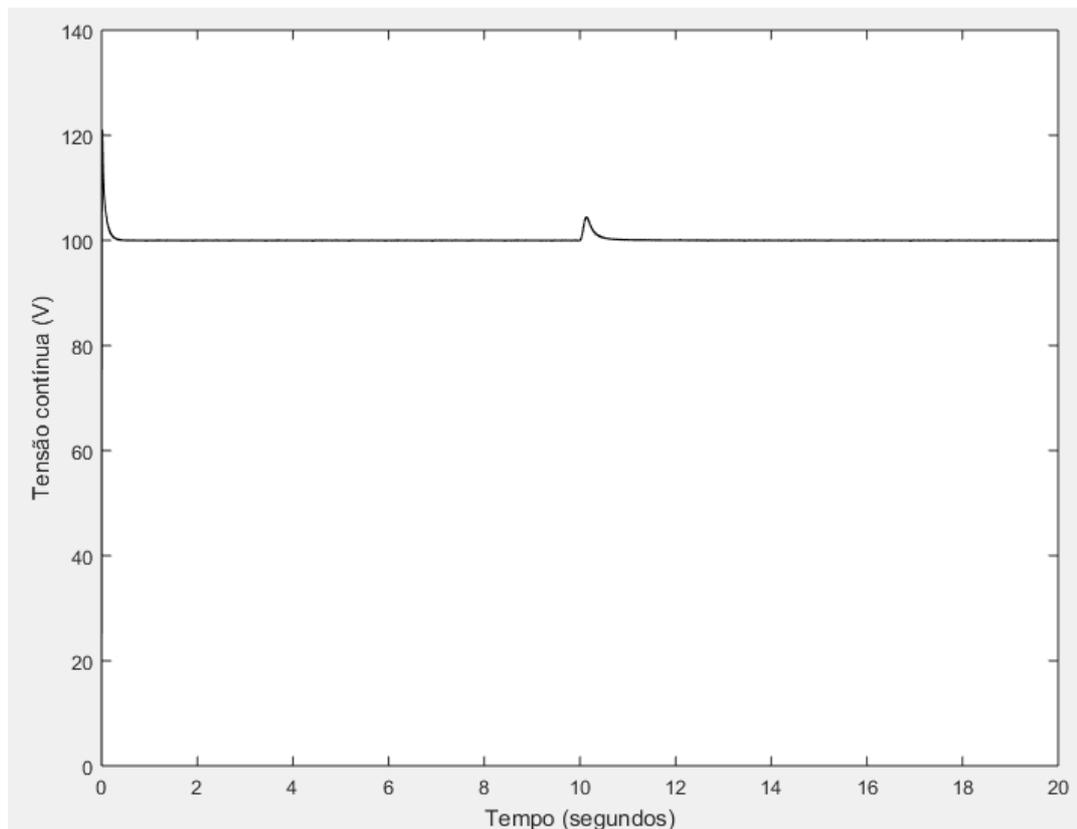


Figura 26: Tensão contínua na saída do conversor *boost* para a simulação 2.

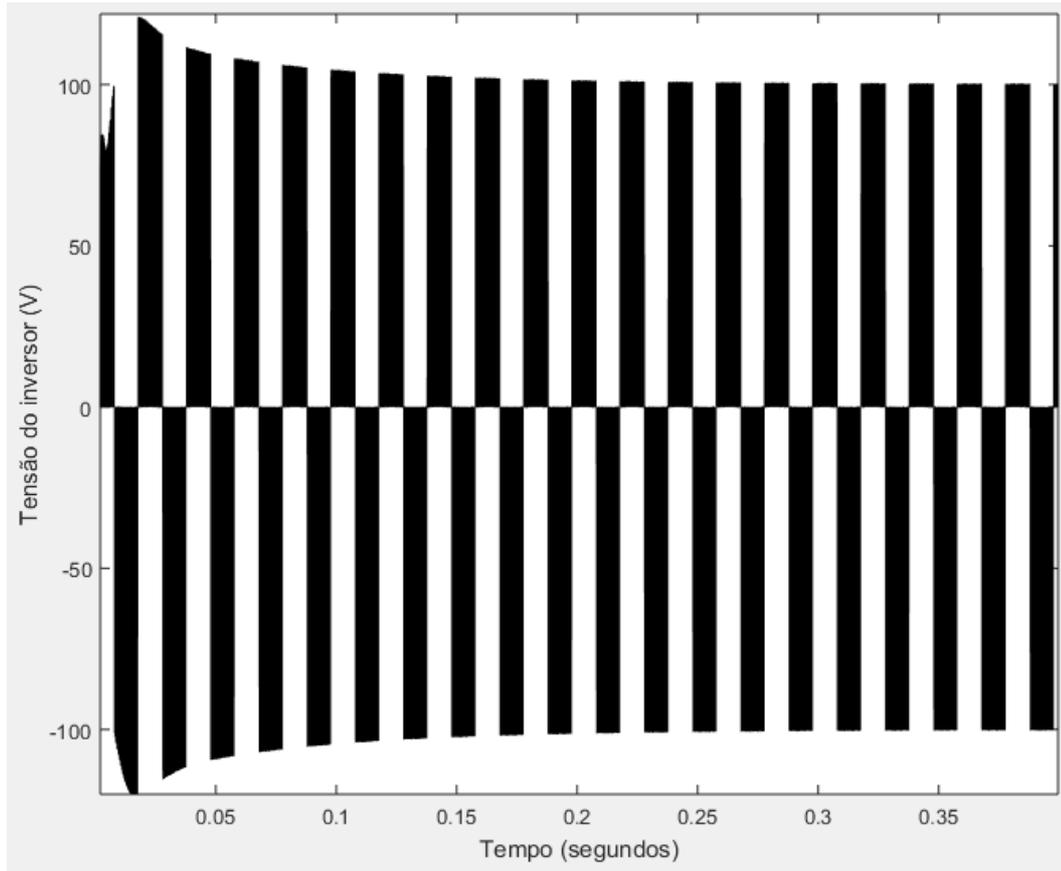


Figura 27: Resultado da Simulação 2 para a tensão do inversor.

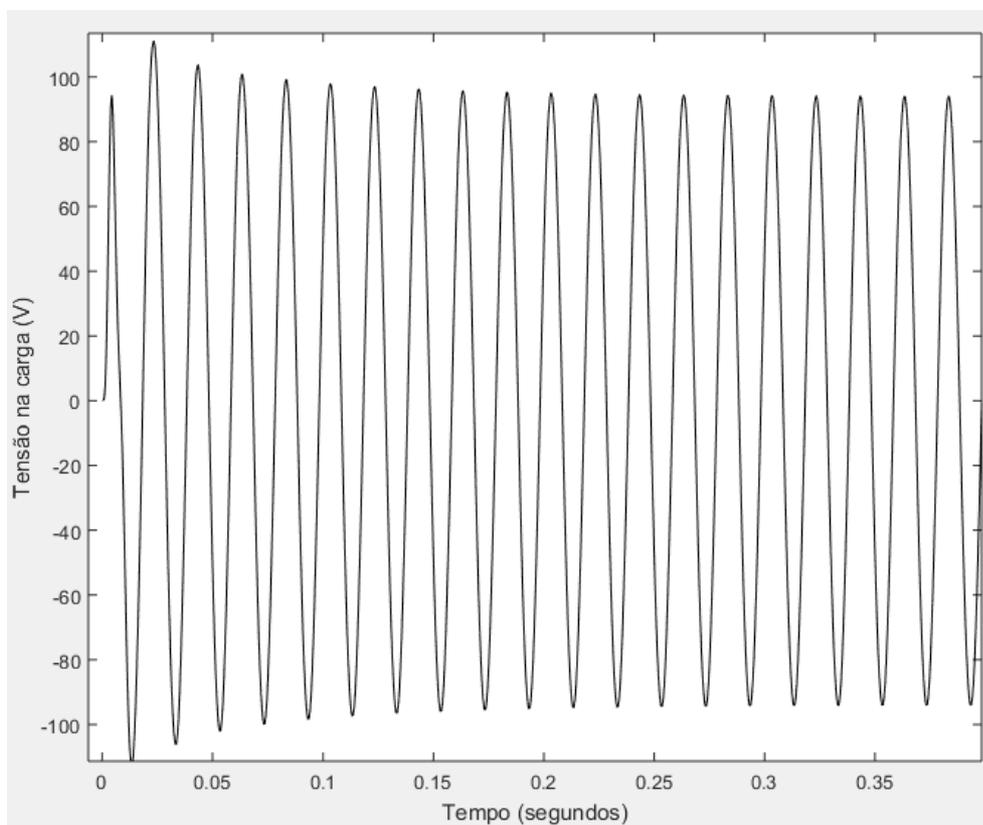


Figura 28: Resultado da simulação 2 para a tensão de linha na carga.

Observa-se que o valor de corrente contínua após o conversor *boost* é de $100 V_{cc}$, ou seja, este conversor executou sua função de elevação da tensão do nível de $45 V_{cc}$, na saída da célula a combustível, ao nível de $100 V_{cc}$, em regime permanente, conforme especificado. Observando-se a tensão alternada de saída do inversor, pode-se concluir que este sinal apresenta componentes harmônicas múltiplas da fundamental, pois não retrata exatamente uma senoide. Daí, passando pelo filtro, este sinal se aproxima da forma senoidal desejada. Esta tensão, aplicada à carga trifásica, em regime permanente, é de aproximadamente 90 V, valor de pico, ou 63,64 V, valor eficaz.

Simulação 3

Ajustando-se o valor da constante do conversor *boost*, destacada no circuito da Figura 29, de 100 para 220, é possível obter uma tensão na saída do conversor maior do que $100 V_{cc}$, como mostrado na Figura 28.

As Figuras 30, 31 e 32 mostram o comportamento da tensão contínua na saída do conversor *boost*, da tensão do inversor, e da tensão entre fases da carga. A obtenção do melhor comportamento de tensão entre fases para este modelo foi de 200 V de pico, ou 141 V eficaz. Esta simulação demonstra a aplicabilidade para alimentação de cargas residenciais de baixa tensão – 127 V / 220 V conforme valores nominais da Companhia Energética de Minas Gerais (CEMIG).

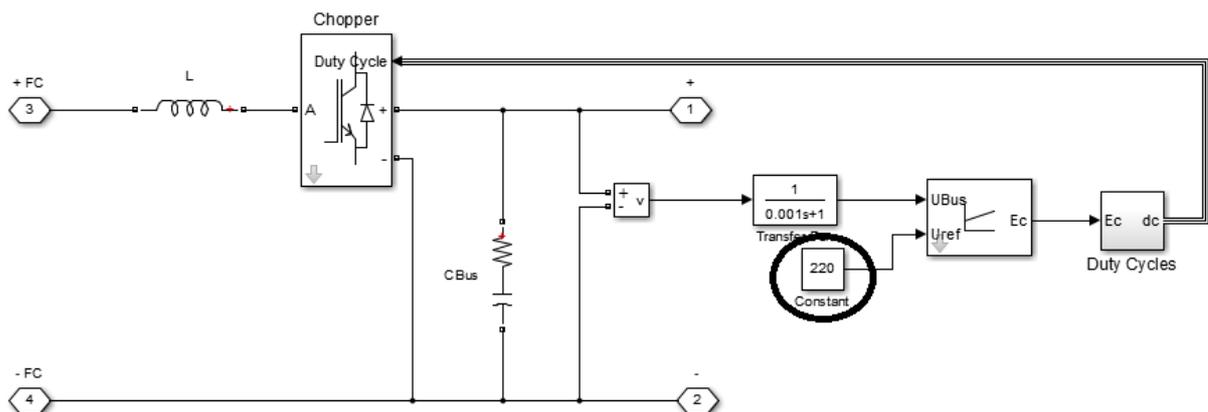


Figura 29: Constante modificada de 100 para 220, para elevar a tensão contínua de saída do *boost*.

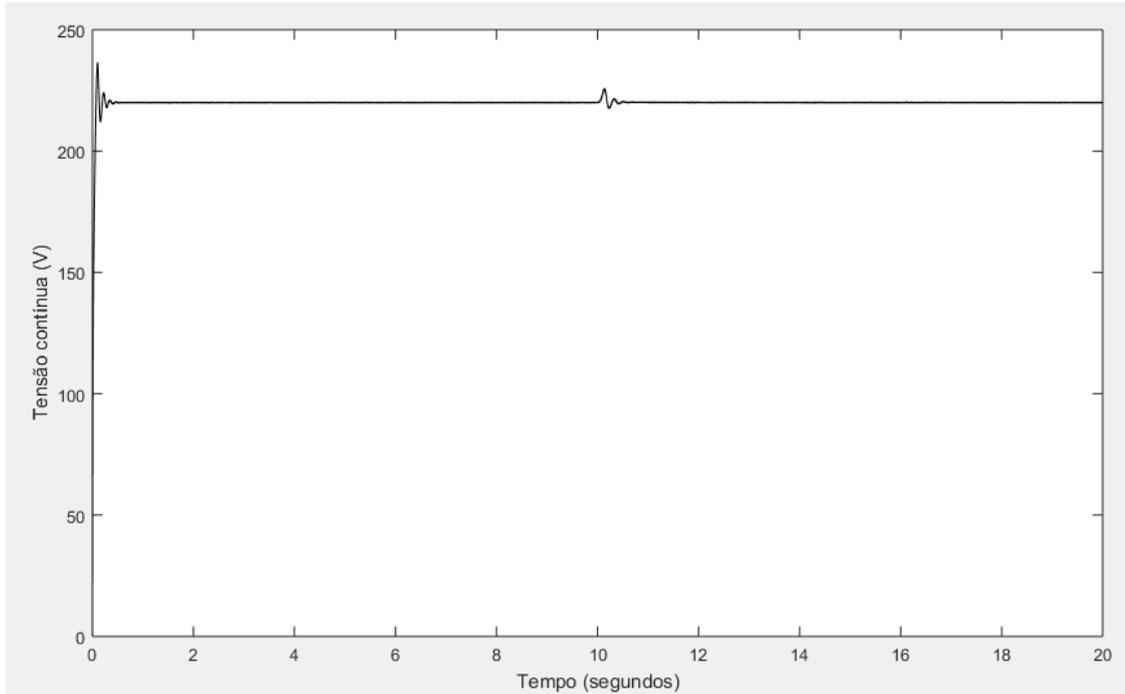


Figura 30: Tensão contínua na saída do conversor *boost* para a simulação 3.

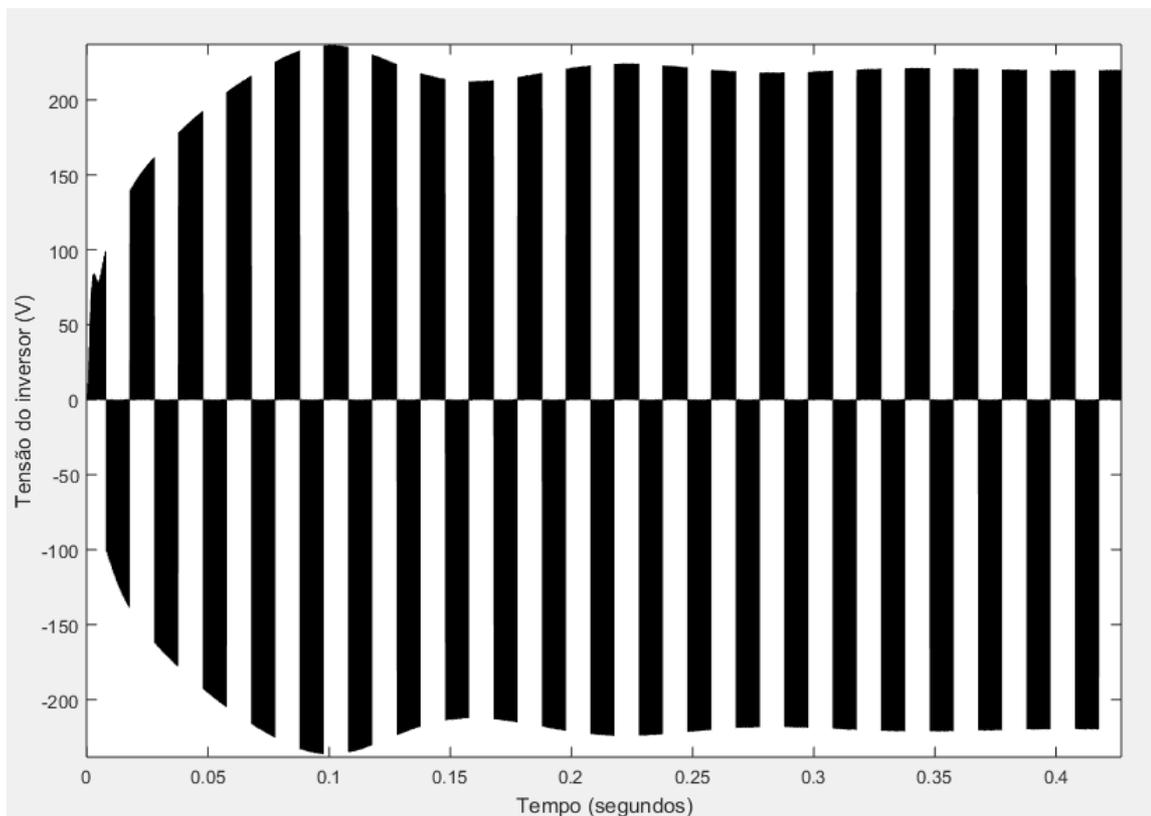


Figura 31: Resultado da Simulação 3 para a tensão do inversor.

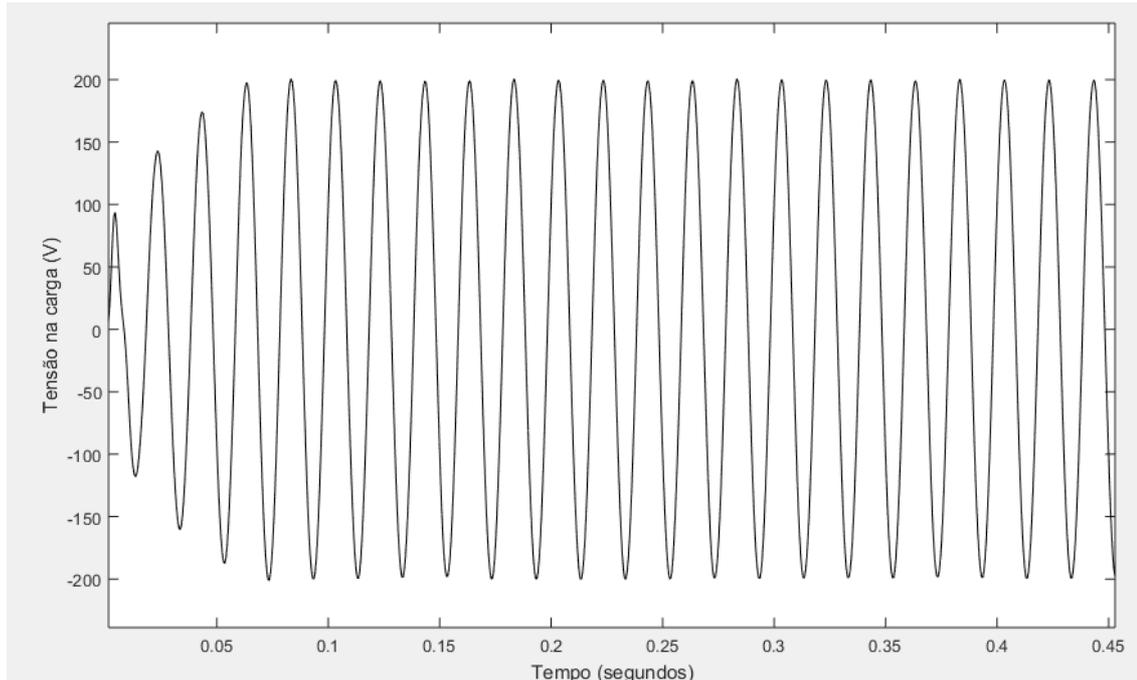


Figura 32: Resultado da simulação 3 para a tensão de linha na carga.

4.4 Conclusões Parciais

Este capítulo detalhou alguns aspectos das condições de simulação adotadas na presente monografia para avaliar o comportamento de células combustível diante de alterações de corrente carga ou de combustível fornecido. Os resultados das simulações também são apresentados. Nas simulações realizadas com o modelo da literatura reproduzido no âmbito da monografia, verificou-se que a implementação desenvolvida permitiu obter curvas muito próximas das apresentadas na literatura, mesmo com a desconsideração dos efeitos do gás nitrogênio no catodo da célula. As simulações com o modelo existente no software MATLAB/Simulink, por sua vez, permitiram obter os sinais de tensão em diversos estágios do processo, desde a conversão efetuada na célula a combustível até o uso final em uma carga trifásica em baixa tensão residencial.

Comportamento semelhante pôde ser atestado em ambos os modelos, tanto da variação da tensão em relação à corrente (comportamento inverso), quanto à variação da corrente e do combustível.

O modelo do MATLAB/Simulink permitiu observar comportamento análogo, como de variação inversa da tensão com a corrente de saída da célula. Elementos periféricos, como inversor, filtro, regulador de tensão e modulação por largura de pulso, todos do MATLAB/Simulink, permitiram uma análise abrangente e mais realista da célula integrada a dispositivos que viabilizam sua aplicação como fonte de energia na forma de geração distribuída.

Capítulo 5

CONCLUSÕES

5.1 Considerações Finais

Esta monografia de conclusão de curso propôs-se a um estudo sobre o princípio de funcionamento e o comportamento de células a combustível, com suporte de simulação computacional. Esta tecnologia de geração tem características de energia renovável, dependendo do tipo de combustível, que pode ser o gás hidrogênio obtido a partir de gaseificação de biomassa, por exemplo. No entanto, avanços tecnológicos são necessários para a sua aplicação como fonte de geração distribuída em sistemas de distribuição de energia elétrica, o que pode viabilizar o fornecimento deste insumo para instalações residenciais de baixa tensão. Além desta aplicação estacionária, a célula a combustível também é promissora para sistemas embarcados. Neste cenário, o suporte de simulação através de modelos computacionais fieis ao comportamento das células reais é fundamental.

Atualmente, as células a combustível têm sido empregadas predominantemente em carros híbridos e missões espaciais, além de outras aplicações, como a geração de energia limpa em geradores de emergência. O tipo de célula proposto para estudo nesta monografia foi a célula de membrana de troca de prótons, conhecida como PEMFC, por meio de dois modelos utilizando o MATLAB/Simulink como ferramenta. O primeiro foi extraído da literatura, desenvolvido e reproduzido neste trabalho, a partir de contato preliminar com o mesmo durante estudos anteriores envolvendo outros sistemas acoplados, enquanto que o segundo está incorporado ao software MATLAB/Simulink versão 2015 ou superior.

A partir das simulações, pôde-se concluir sobre o comportamento da célula, como a resposta da corrente de carga frente a variações do fornecimento de combustível, e vice-versa. As curvas da referência da literatura puderam ser reproduzidas, mesmo com simplificações adotadas nesta monografia. O modelo do MATLAB/Simulink permitiu observar comportamento análogo, como de variação inversa da tensão com a corrente de saída da célula. Elementos periféricos, como inversor, filtro, regulador de tensão e modulação por largura de pulso, todos do MATLAB/Simulink, permitiram uma análise abrangente e mais realista da célula integrada a dispositivos que viabilizam sua aplicação como fonte de energia na forma de geração distribuída.

Para o modelo MATLAB/Simulink sem inversor, os sinais de saída do conversor *boost* são praticamente constantes em regime permanente, independentemente da mudança no suprimento de combustível. Este aspecto é importante, pois, na prática, o conversor deve ser capaz de regular a tensão fornecida a cargas residenciais na ocorrência de flutuações de suprimento, evitando grandes flutuações que podem danificar equipamentos ou impossibilitar seu funcionamento. Esta característica aponta a célula combustível como promissora para a modalidade de geração distribuída em redes de distribuição de energia elétrica.

É importante notar a semelhança das formas de onda de tensão e corrente antes do conversor *boost* do modelo do MATLAB/Simulink sem inversor, e do modelo reproduzido da literatura, nos momentos em que a taxa de alimentação de combustível ou a corrente se modificam. A tensão reduz-se com o aumento da corrente, e vice-versa. Verificou-se também comportamento semelhante à de uma função logarítmica na mudança brusca de corrente ou combustível, devido à combinação de uma espécie de efeito capacitivo da célula, variação de sua temperatura com o tempo e pressões parciais do hidrogênio e do oxigênio.

Portanto, esta monografia tem como principal contribuição a reprodução de um modelo de célula a combustível, que pode ser utilizado futuramente para o desenvolvimento de algum protótipo, e a confirmação dos fundamentos teóricos sobre o funcionamento desta promissora alternativa energética.

5.2 Sugestões Para Estudos Futuros

Para futuros trabalhos, são propostas:

- Modelagem e simulação de outros tipos de célula a combustível;
- Simulação do modelo de célula a combustível da literatura (Xue, Tang, Smirnova, England, & Sammes, 2004) com inversor e carga em tensão alternada; e
- Simulação de células com maiores capacidades, por exemplo, 50 kW, a fim de se avaliar o fornecimento de energia a toda uma instalação residencial de baixa tensão, com o propósito de continuidade da análise de viabilidade técnica para aplicação em sistemas modernos de distribuição de energia elétrica.

REFERÊNCIAS

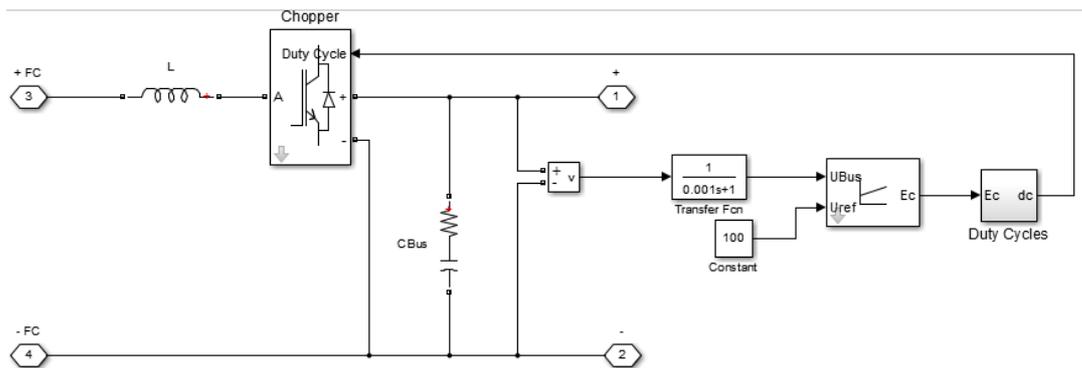
- Ahmed, A. (2000). *Eletrônica de Potência*. São Paulo: Pearson.
- Amphlett, J., Mann, R., Peppley, B., & Rodrigues, A. (1996). A model predicting transient responses of proton exchange membrane fuel cells. *Journal of Power Sources* , 183-188.
- Caixeta, L. d. (2010). *Instrumentação e Controle de um Sistema de Célula a Combustível de Membrana Polimérica*. Rio de Janeiro.
- Januzzi, G., & Chum, H. (2002). *Programa Brasileiro de células a combustível*. Brasília: CGEE.
- Khan, F., Nawaz, A., Muhammad, M., & Khadim, M. (2003). Review and Analysis of MATLAB® Simulink Model of PEM Fuel Cell Stack. *International Journal of Engineering & Computer Science* , Vol:13 No:3.
- Lamas, J. A. *Estudo sobre Célula Combustível e Avaliação Experimental Utilizando Kits Didáticos de Energia Renovável*.
- Larminie, J., & Dicks, A. (2003). *Fuel Cell Systems Explained*. West Sussex: Willey.
- MathWorks. (2015). Electric Drives toolbox . *Fuel Cell Stack: User Guide* .
- Pilatowskt, I., Romero, R., Isaza, C., Gamboa, S., Sebastian, P., & Rivera, W. (2011). *Cogeneration Fuel Cell-Sorption Air Conditioning Systems*. Springer-Verlag London.
- Porciúncula, C. B. (2013). *PORCIÚNCULA, Cleiton Bittencourt da. Simulação e operação de célula de combustível com geração in situ de hidrogênio através da corrosão alcalina do alumínio. 2013. 202 f. Tese (Doutorado em engenharia química). Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Rio Grande do Sul: Universidade Federal do Rio Grande do Sul.*
- Revankar, S., & Majumdar, P. (2014). *Fuel Cells - Principles, Design, and Analysis*. Boca Raton: CRC Press.
- Wendt, H., Götz, M., & Linardi, M. (1999). *Tecnologia de Células a Combustível*. Scielo , 9.
- White, F. (1991). *Viscous Fluid Flow*. Second Edition: McGraw-Hill.
- Xue, X., Tang, J., Smirnova, A., England, R., & Sammes, N. (4 de Julho de 2004). System level lumped-parameter dynamic modeling of PEM fuel cell. *Journal of Power Sources* , 188-204.

Apêndice A

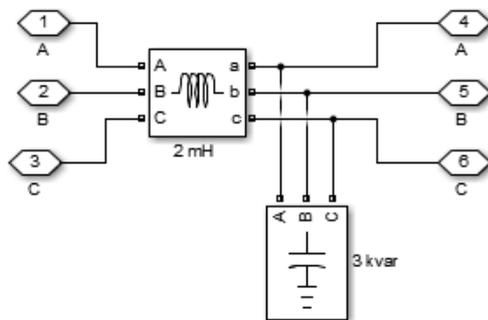
ELEMENTOS DE SIMULAÇÃO

Este apêndice apresenta algumas figuras de elementos periféricos não foram mostrados no texto principal, para consulta.

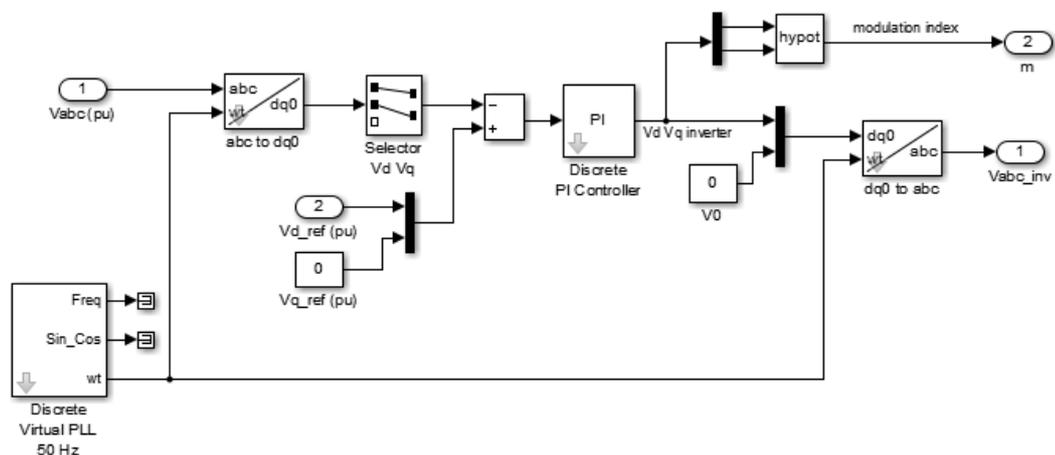
A.1 Modelo do Conversor Boost



A.2 Modelo do Filtro do Inversor



A.3 Modelo do Regulador do Filtro



Apêndice B

EQUAÇÕES

Este apêndice apresenta algumas equações do modelo reproduzido encontrado em no artigo de (Xue, Tang, Smirnova, England, & Sammes, 2004).

B.1 Equações dinâmicas para os três volumes de controle do modelo reproduzido da PEMFC

As equações para os três volumes de controle são deduzidas a partir de equações conhecidas. Para o canal do anodo, a vazão mássica é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_{C.V} \rho_{H_2} dV = \frac{dm_{H_2}}{dt} \quad (21)$$

A taxa de transporte de hidrogênio através do canal do anodo é dado pela equação (22).

$$-\iint_{S.C.} \rho_{H_2} (\vec{V} \cdot \vec{n}) dA = k_{up,an}(p_{s,an} - p_{an}) - k_{down,an}(p_{an} - p_{atm}) - N \frac{i}{2F} M_{H_2} \quad (22)$$

Em que:

- $k_{up,an}$ - coeficiente de fluxo de massa de entrada;
- $k_{down,an}$ - coeficiente de fluxo de massa de saída;
- $p_{s,an}$ - pressão de entrada do anodo;
- p_{an} - pressão dentro do volume de controle do anodo; e
- p_{atm} - pressão ambiente.

A taxa de variação da energia interna do hidrogênio dentro do volume de controle do anodo é dada pela equação (23)

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_{V.C.} \rho_{H_2} u_t dV = \frac{d(M_{H_2} c_v, H_2 T_{an})}{dt} \quad (23)$$

Em que:

- C_{v,H_2} - calor específico do hidrogênio a volume constante; e
- T_{an} - temperatura do hidrogênio no volume de controle do anodo.

O calor transferido para o volume de controle do anodo por meio da transferência de hidrogênio (entrada, saída e difusão pelo eletrodo) é dado pela equação (24).

$$-\oint_{S.C.} \rho_{H_2} h_{H_2} (\vec{V} \cdot \vec{n}) dA = k_{up,an} (p_{s,an} - p_{an}) c_{p,H_2} (T_{an,in} - T_0) - k_{down,an} (p_{an} - p_{atm}) c_{p,H_2} (T_{an} - T_0) - N \frac{i}{2F} M_{H_2} c_{p,H_2} (T_{an} - T_0) \quad (24)$$

Em que:

$T_{an,in}$ - temperatura do hidrogênio de entrada; e

T_0 - temperatura de referência.

A transferência de calor por convecção do corpo da célula para o canal do catodo é dada pela equação (25).

$$\frac{dQ}{dt} = k_{conv,an} (T_{corpo} - T_{an}) \quad (25)$$

Em que:

$k_{conv,an}$ - coeficiente de convecção;

$A_{conv,an}$ - área de contato para a convecção.

Para o volume de controle do catodo, é possível deduzir equações semelhantes, que são dadas por (26), (27) e (28).

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_{C.V} \rho_{O_2} dV = \frac{dm_{O_2}}{dt} \quad (26)$$

$$-\oint_{S.C.} \rho_{O_2} u_t dV = k_{up,ca} (p_{s,ca} - p_{ca}) - k_{down,ca} (p_{ca} - p_{atm}) - N \frac{i}{4F} M_{O_2} \quad (27)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_{V.C.} \rho_{O_2} u_t dV = \frac{d(m_{O_2} c_{v,O_2} T_{ca})}{dt} \quad (28)$$

$$\begin{aligned} \oint_{C.S.} \rho_{O_2} h_{O_2} (\vec{V} \cdot \vec{n}) dA & \\ &= k_{up,ca} (p_{s,ca} - p_{ca}) c_{p,H_2} (T_{ca,in} - T_0) \\ &- k_{down,ca} (p_{ca} - p_{atm}) c_{p,O_2} (T_{ca} - T_0) \\ &- N \frac{i}{4F} M_{O_2} c_{p,O_2} (T_{corpo} - T_{ca}) \end{aligned} \quad (29)$$

$$\frac{dQ}{dt} = k_{conv,ca}(T_{corpo} - T_{ca}) \quad (30)$$

E, finalmente para o corpo da célula, como seus componentes consistem praticamente da membrana e alguns metais, e a difusão de gás e água produzida tem poucos efeitos em seu balanço de massas, o primeiro termo à esquerda da equação (4) se torna:

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_{V.C.} \rho_{corpo} dV = 0 \quad (31)$$

O transporte de massa através do corpo da célula é dado por:

$$- \iint_{S.C.} \rho_{corpo} (\vec{V} \cdot \vec{n}) dA = N \frac{i}{2F} M_{H_2} + N \frac{i}{4F} M_{O_2} - m_{H_2O} \quad (32)$$

A primeira e segunda parcelas à direita da equação (32) representam a difusão de gases pelos eletrodos, enquanto que a última parcela fornece a massa de água formada através das reações.

A taxa de variação da energia interna do corpo da célula é:

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_{V.C.} \rho_{corpo} u_t dV = m_{corpo} c_{p,corpo} \frac{dT_{corpo}}{dt} \quad (33)$$

Em que:

$C_{p,corpo}$ - calor específico médio do corpo da célula.

Por fim, o calor transferido e o trabalho realizado no volume de controle do corpo da célula são dados por:

$$\begin{aligned} \frac{dQ}{dt} + \frac{dW}{dt} = & k_{conv,an}(T_{an} - T_{corpo}) + k_{conv,ca}(T_{ca} - T_{corpo}) \\ & + k_{conv,amb}(T_{amb} - T_{corpo}) + \Delta H_{R,T} N \frac{i}{2F} M_{H_2} - NV_{célula} i \end{aligned} \quad (34)$$

Em que os três primeiros termos são os calores transferidos por convecção das vizinhanças, o quarto termo é o calor produzido pela reação de redução, e o último termo refere-se à potência elétrica convertida.