

# Modelamento Matemático

## Células PEM

Adonis Saliba

Dionísio

Keith

# Bases do modelamento da Célula a Combustível PEM

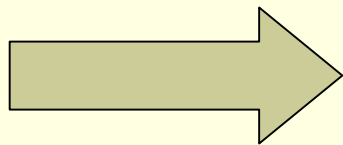
---

- 1ª Fase: Reprodução de uma curva de polarização (modelos de estados estacionários desenvolvidos na literatura)
- 2ª Fase: Simulação de experimentos em MEA's produzidos no IPEN e ajustagem de equacionamentos para esses MEA's

# Estado da Arte para modelagem matemática das PEMs

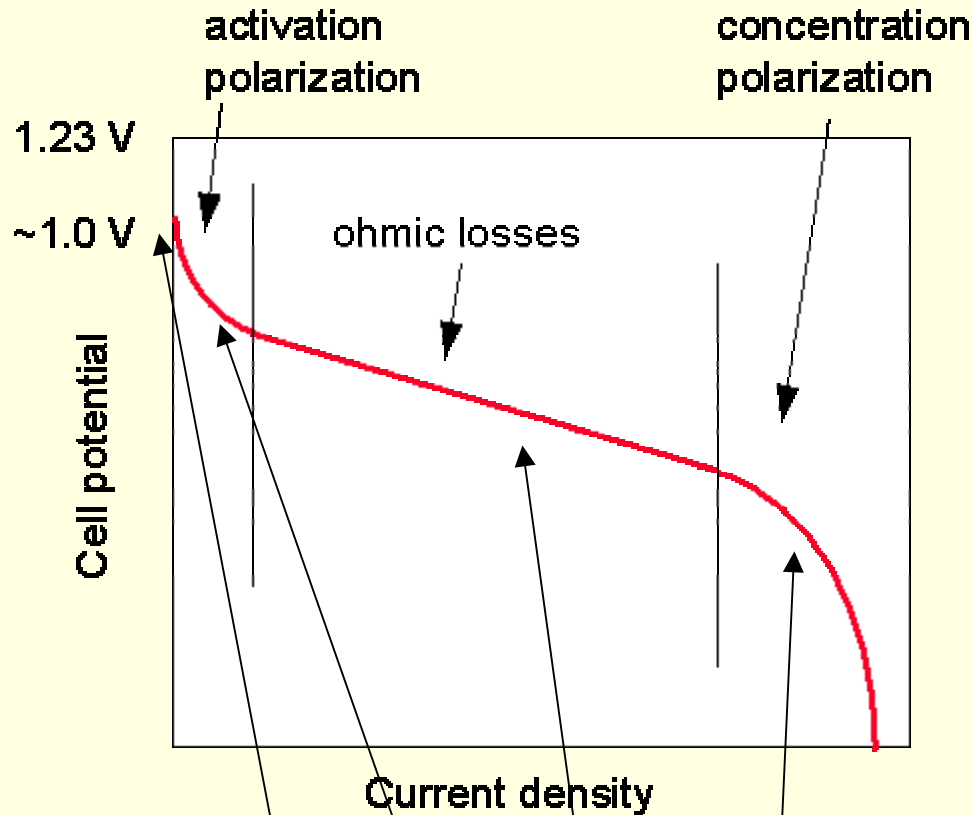
---

- Transporte de massa na PEM com diferentes misturas de  $O_2$  e outros gases.
- Estudos de temperatura e pressão
- Estudos da camada de difusão e desempenho da PEM.
- Umidificação da PEM



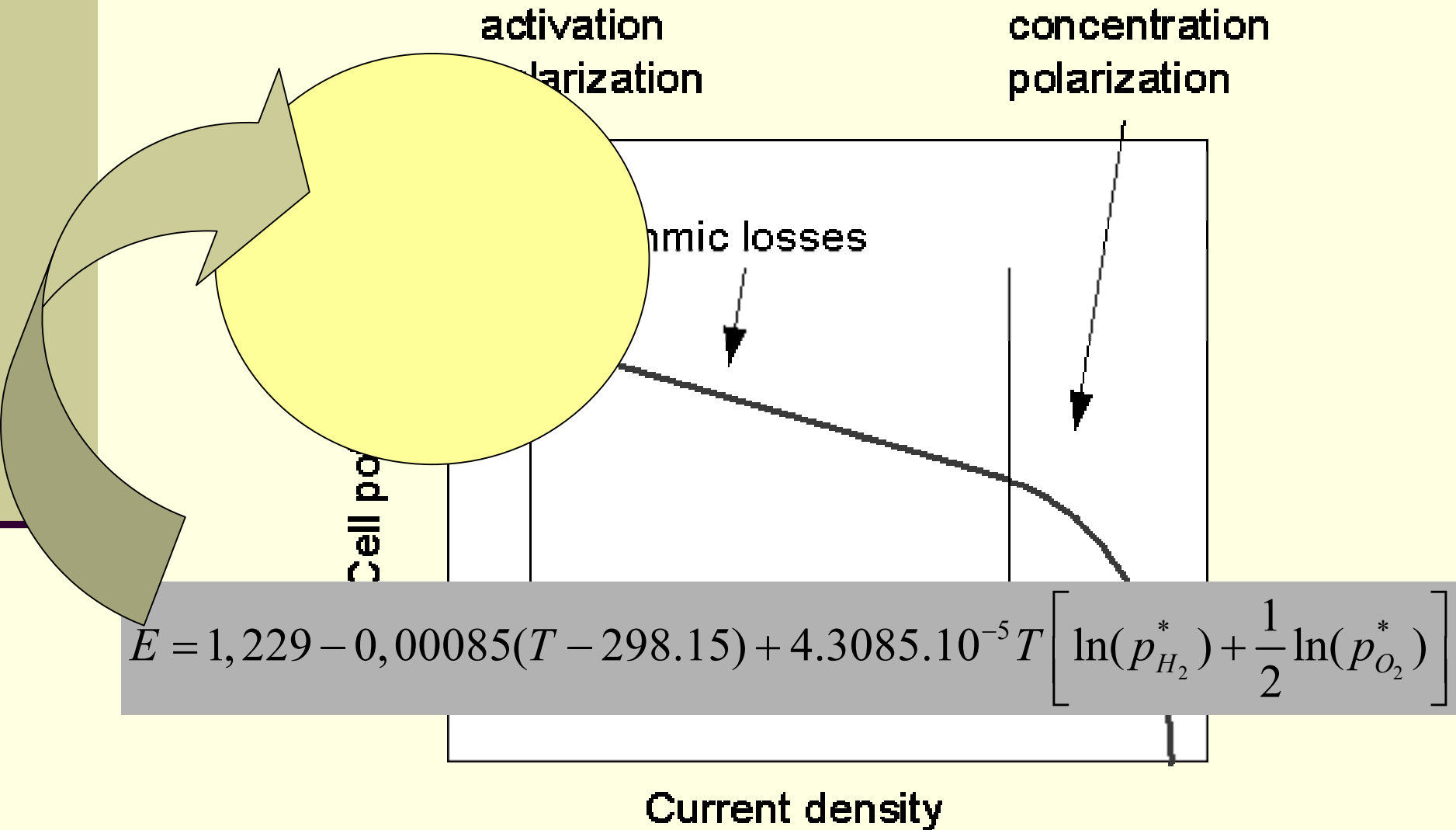
Desempenho na curva de polarização da célula

# Curva de Polarização de uma PEM



$$V = E + \eta_{ativ} + \eta_{ohm} + \eta_{conc}$$

# Potencial termodinâmico (E)



# Polarização por Ativação

$$\eta_{act-total} = \eta_{act.anod} + \eta_{act.cat}$$

$$V_{act} = v_0 + v_a \left(1 - e^{-c_1 i}\right)$$

$$v_0, v_a = f(p_{cat}, p_{sat}, T_{cel})$$

- Polarização fortemente associada a atividade de catálise de redução do O<sub>2</sub>
- A modelagem dessa área para os MEAs IPEN devem diferir do equacionamento disponível na literatura, portanto, o equacionamento deve ser devidamente monitorado para os próprios MEAs do IPEN.

# Polarização por resistência ôhmica

$$\eta_{\Omega} = -i.R^{\text{int}}$$

Basicamente se relaciona a transmissão protônica através do MEA, portanto é dependente da confecção do MEA.

$$R^{\text{int}} = R^{\text{elet}} + \frac{RT}{F^2 A} \int_0^{lm} \frac{dz}{D_{H^+} c_{H^+}} - \frac{RT}{Fi} \int_0^{lm} \frac{dc_{H^+}}{c_{H^+}} dz + \frac{RT}{Fi} \int_0^{lm} \frac{vdz}{D_{H^+}}$$

mas, essa equação é de difícil solução, portanto deve ser obtida por regressão estatística para simular essa resistência interna em função da Temperatura da célula e da variação com  $i^2$ .

Há outra linha de raciocínio que seria via análise da umidade da membrana.

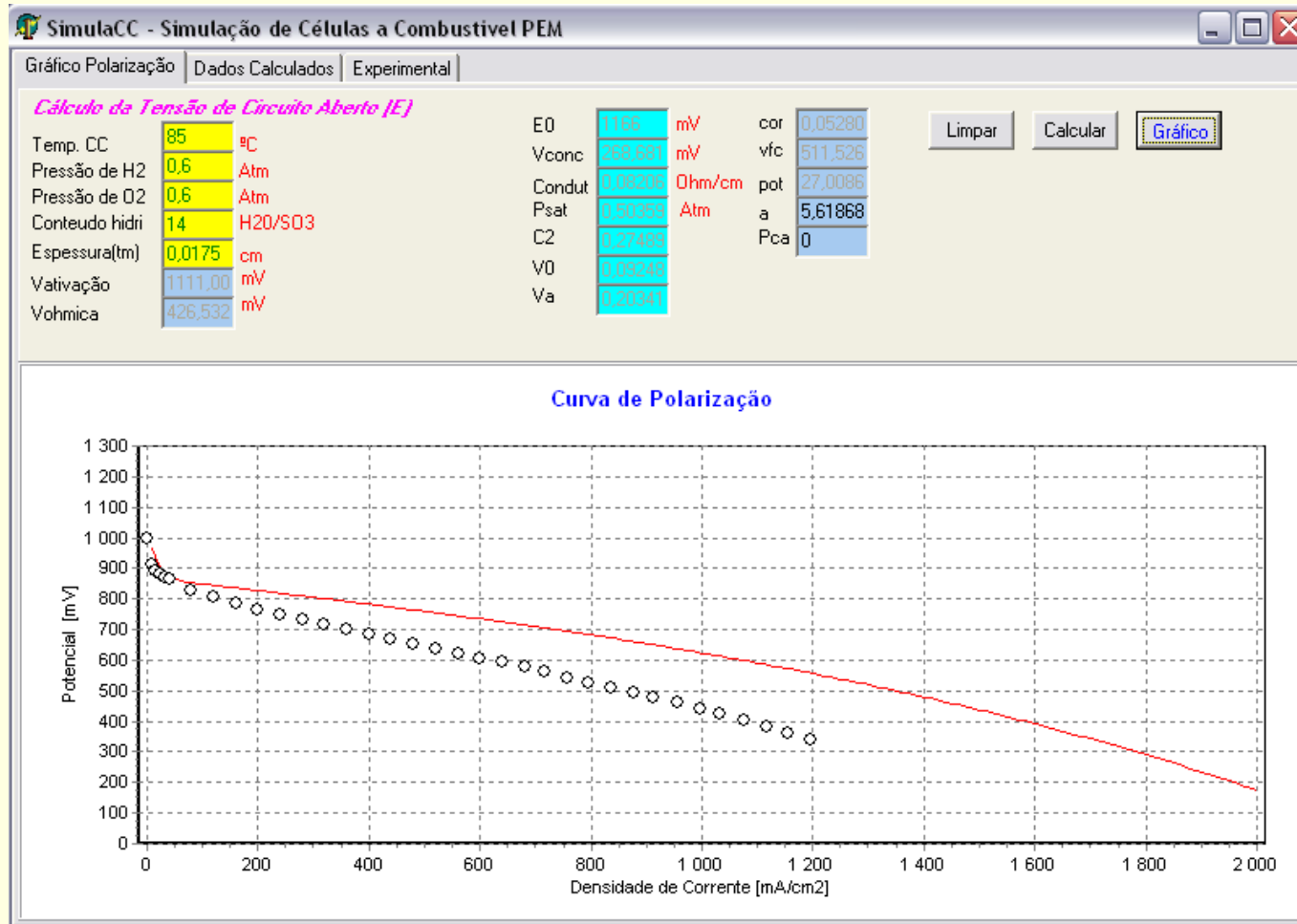
# Polarização por Concentração

$$V_{conc} = i \left( c_2 \frac{i}{i_{\max}} \right)^{c_3}$$

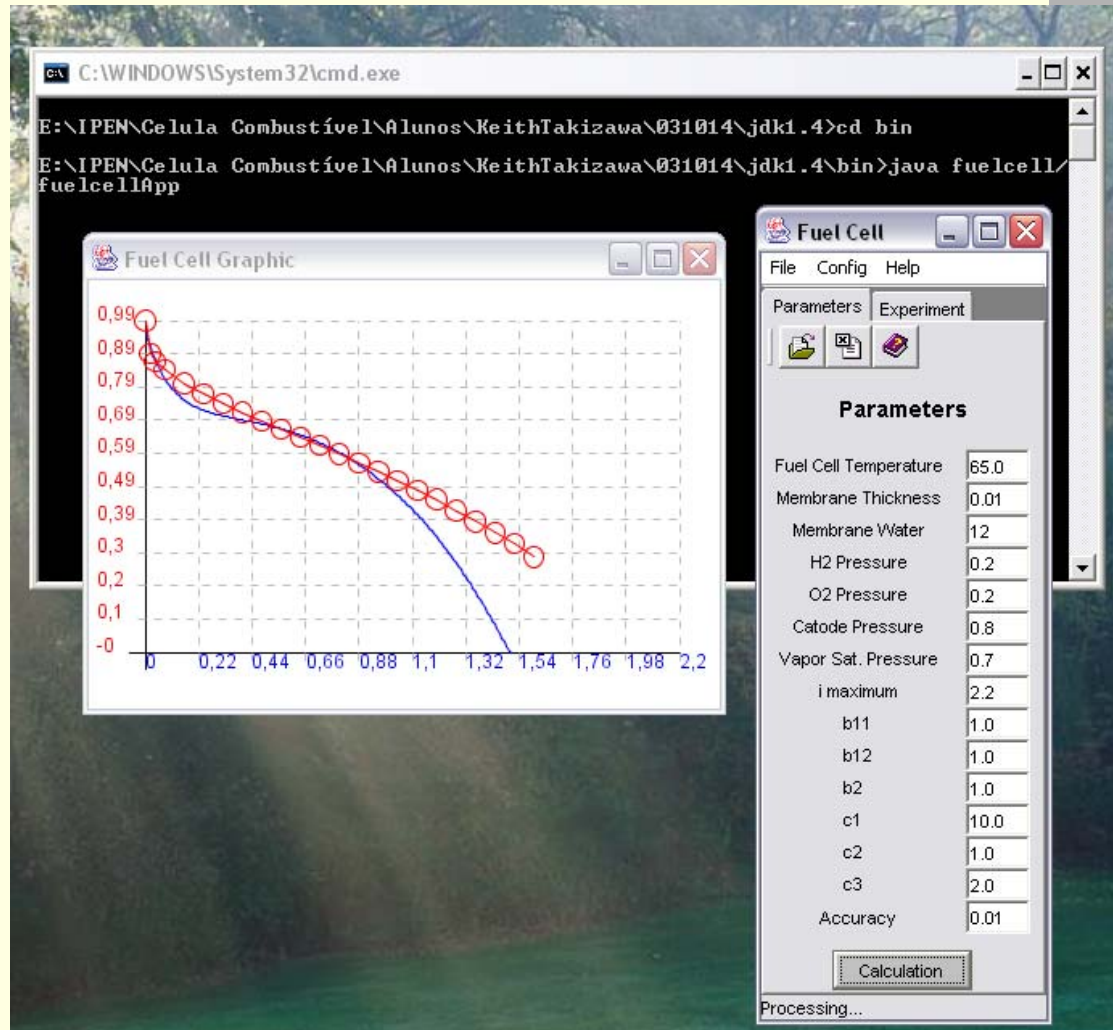
A queda de potencial na fase final está ligada resistência de transporte de massa. O fenômeno é severo no cátodo onde o  $O_2$  é o reagente e onde o produto de reação deve ser removido.



# Modelamento via Delphi (Dionísio)



# Modelamento via Java (Keith)



# Estatística para Experimentos

O grupo de modelamento dá suporte aos demais grupos de estudo de células na elaboração de projetos de experimentos, realização e análise de resultados.

## Response Surface Regression: VOL\_2 versus T\_CEL; VAZ\_H2; T\_UMID

The analysis was done using coded units.

Estimated Regression Coefficients for VOL\_2

Term	Coef	SE Coef	T	P
Constant	0.64883	0.007940	81.718	0.000
Block 1	-0.00583	0.004245	-1.374	0.178
Block 2	0.00417	0.004245	0.982	0.333
T_CEL	-0.00520	0.003881	-1.339	0.189
VAZ_H2	-0.01360	0.003881	-3.504	0.001
T_UMID	0.00015	0.002555	0.057	0.955
T_CEL*T_CEL	-0.00199	0.003945	-0.504	0.617
VAZ_H2*VAZ_H2	-0.00199	0.003945	-0.504	0.617
T_UMID*T_UMID	-0.00079	0.000986	-0.803	0.427
T_CEL*VAZ_H2	-0.00833	0.004245	-1.963	0.057
T_CEL*T_UMID	-0.00125	0.002123	-0.589	0.560
VAZ_H2*T_UMID	0.00125	0.002123	0.589	0.560

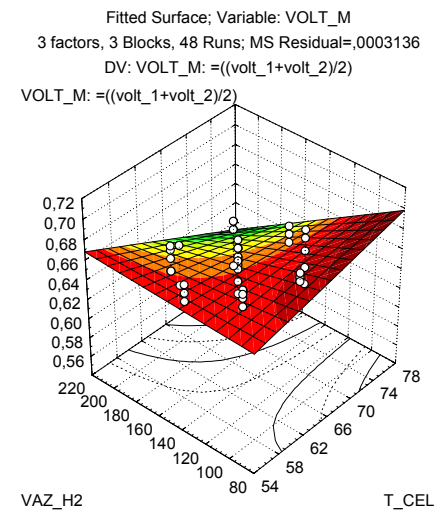
S = 0.02080 R-Sq = 42.3% R-Sq(adj) = 24.7%

Analysis of Variance for VOL\_2

Source	DF	Seq SS	Adj SS	Adj MS	F	P
Blocks	2	0.000867	0.000867	0.000433	1.00	0.377
Regression	9	0.010555	0.010555	0.001173	2.71	0.016
Linear	3	0.008288	0.006086	0.002029	4.69	0.007
Square	3	0.000301	0.000301	0.000100	0.23	0.873
Interaction	3	0.001967	0.001967	0.000656	1.52	0.227
Residual Error	36	0.015570	0.015570	0.000432		
Lack-of-Fit	33	0.015420	0.015420	0.000467	9.35	0.045
Pure Error	3	0.000150	0.000150	0.000050		
Total	47	0.026992				

Unusual Observations for VOL\_2

Observation	VOL_2	Fit	SE Fit	Residual	St Resid
29	0.630	0.667	0.011	-0.037	-2.09R
40	0.570	0.623	0.010	-0.053	-2.96R
47	0.570	0.613	0.011	-0.043	-2.40R



# Modelamento em Impedância Eletroquímica

## Circuitos Equivalentes - Caracterização de Células PEM

