



**UNIVERSIDAD MICHOACANA
DE SAN NICOLAS DE HIDALGO**



FACULTAD DE INGENIERÍA MECÁNICA

**“DESARROLLO Y VALIDACIÓN DEL MODELO
ENERGÉTICO DE UN MOTOR HÍBRIDO MCI Y
PILA PEM”**

TESIS

Que para obtener el título de:

MAESTRO EN CIENCIAS DE INGENIERÍA MECÁNICA

Presenta:

ING. EDSON DANNY GUZMÁN CRISANTOS

Asesor de tesis:

DR. CARLOS RUBIO MAYA

Morelia, Michoacán

Agosto, 2023

Dedicatoria.

A mi madre Ma. De los Ángeles Crisantos Lúa, que me enseñó a no darme por vencido nunca sin importar lo que pase, y que es mi ejemplo a seguir, aunque ya no este conmigo, la respeto, quiero y admiro mucho, todo lo que soy te lo debo a ti querida madre.

A mis hermanas Nancy Gabriela Guzmán Crisantos, Mayra Selene Guzmán Crisantos y María de los Ángeles Guzmán Crisantos, que, aunque lejos están al pendiente de mí y tratan de apoyarme en lo que pueden, dándome además ánimos para seguir adelante en la vida.

A todas las personas que he tenido el placer de conocer en el posgrado de Ingeniería Mecánica de la Facultad de Ingeniería Mecánica de la UMSNH, en especial a mis compañeros y profesores con los que tuve el gusto de trabajar.

Agradecimientos.

A dios por darme la vida y la oportunidad de superarme como persona día con día.

A mi madre por darme la vida y estar conmigo en las buenas y malas, brindándome su apoyo incondicional siempre, gracias por ser mi mamá.

A toda mi familia que me apoyo siempre a su manera.

A mi asesor el Dr. Carlos Rubio Maya que me ha tenido paciencia y me ha brindado sus valiosos consejos y compartido conmigo sus conocimientos para realizar este y otros proyectos y a quién considero además como un amigo.

A mis compañeros del área térmica de la FIM de la UMSNH.

A todos mis profesores que me han enseñado sus valiosos conocimientos durante mi estancia en el posgrado.

A todas las personas que conforman el posgrado de Ingeniería Mecánica de la Facultad de Ingeniería Mecánica de la UMSNH, en especial a la coordinación pasada y actual por su comprensión y paciencia con este trabajo.

Resumen.

Considerando las problemáticas ambientales y de agotamiento de recursos petroleros que se requieren para la necesidad de movilidad del ser humano, en el desarrollo de esta tesis se aborda el tema del ahorro de energía y optimización de los recursos naturales mediante el uso de tecnologías que permitan solventar el tema de la movilidad motriz con un impacto ambiental mínimo. En particular se desarrolla y válida un modelo termodinámico del sistema de propulsión de un vehículo híbrido basado en un motor de combustión interna (MCI) y una pila de combustible tipo PEM, operando con amoníaco como combustible, y diseñado a manera de que se aproveche la mayor parte de la energía disponible del sistema para la obtención del hidrógeno, y obteniendo como productos de la combustión y la reacción química del MCI y la pila PEM, respectivamente, únicamente nitrógeno y agua (caso ideal). Mediante la aplicación del modelo a tres situaciones particulares de vehículos automotrices se estudian los parámetros más importantes del sistema, lo que permite identificar el comportamiento energético cuando se cambian las condiciones de funcionamiento del sistema. El desarrollo del modelo y la validación muestran resultados coincidentes con la literatura; aunque fue necesario suponer algunos datos específicos que no fueron reportados. Se presenta como aporte todos los parámetros termodinámicos de las corrientes que caracterizan el sistema y las ecuaciones de sus componentes auxiliares, que en conjunto gobiernan el sistema. Los resultados muestran que el uso de amoníaco como combustible en un sistema híbrido es viable y además la combinación del motor de combustión interna y pila PEM permiten mejorar las prestaciones energéticas del vehículo híbrido.

Palabras clave: Movilidad; Exergía; Energías limpias; Amoníaco; Hidrógeno.

Abstract.

Considering the environmental problems and depletion of oil resources required for mobility of the human being, in the development of this thesis the issue of energy saving and optimization of natural resources is addressed through the use of technologies that allow addressing the issue of motor mobility with minimal environmental impact. In particular, a thermodynamic model of the propulsion system of a hybrid vehicle based on an internal combustion engine (ICE) and a PEM-type fuel cell, operating with ammonia as fuel, and designed in such a way that most of the available energy of the system is used to obtain hydrogen, and obtaining as products of the combustion and the chemical reaction of the MCI and the PEM stack, respectively, only nitrogen and water (ideal case). It is developed and validated. By applying the model to three particular situations of automotive vehicles, the most important parameters of the system are studied, which allows identifying the energy behavior when operating conditions of the system are changed. The development of the model and the validation show results that coincide with the literature; although it was necessary to assume some specific data that were not reported. It is presented as a contribution all the thermodynamic parameters of the currents that characterize the system and the equations of its auxiliary components, which together govern the system. The results show that the use of ammonia as fuel in a hybrid system is viable and also the combination of the internal combustion engine and PEM battery allow to improve the energy performance of the hybrid vehicle.

Keywords: Mobility; Exergy; Clean energies; Ammonia; Hydrogen.

Contenido:

Dedicatoria.....	i
Agradecimientos.....	ii
Resumen.....	iii
Abstract.	iv
1 Introducción.	1
1.1 Contexto general.....	1
1.1.1 Contaminación del aire y tipos de contaminantes.....	1
1.1.2 Calentamiento global.....	2
1.1.3 Agotamiento de recursos petroleros.....	3
1.1.4 Costos inducidos.	6
1.2 Motivación y justificación.....	6
1.3 Planteamiento del problema.....	7
1.4 Hipótesis.	8
1.5 Objetivos.	9
1.5.1 Objetivo general.....	9
1.5.2 Objetivos específicos.....	9
1.6 Revisión de la literatura.....	9
2 Vehículos propulsados con motores híbridos.....	12
2.1 Definición de vehículo híbrido.	12
2.2 Clasificación de los vehículos híbridos.....	12
2.3 Vehículos convencionales, modernos e híbridos.	15
2.3.1 Vehículos de gasolina/diésel MCI (Motor de combustión interna).	15
2.3.2 Vehículos eléctricos EV (Electric vehicle).....	17
2.3.3 Vehículo eléctrico híbrido HEV (Hybrid electric vehicle).	18
2.3.4 Vehículo eléctrico híbrido enchufable PHEV (Plug-in hybrid vehicle).19	
2.3.5 Vehículos eléctricos de celda de combustible FCEV (Fuel Cell Electric Vehicles).	21
3 Vehículo híbrido basado en MCI y pila PEM.	25
3.1 Sustancias y fluidos de trabajo, utilizadas en el sistema y subsistemas auxiliares.....	26
3.2 Componentes principales del sistema.....	30
3.2.1 Motor de combustión interna (MCI) usando NH ₃ como combustible. 30	

3.2.2	Unidad separadora de disociación (DSU).....	34
3.2.3	Pilas de combustible.....	36
3.3	Componentes auxiliares del sistema.....	39
3.4	Descripción general del funcionamiento del sistema.	41
4	Modelo energético del vehículo híbrido MCI-pila PEM.	43
4.1	Desarrollo del modelo.	43
4.1.1	Ecuaciones generales que gobiernan el sistema.	43
4.1.2	Modelado del subsistema 1: Tanque de NH ₃ , MCI, DSU y equipos complementarios.....	45
4.1.3	Modelado del subsistema 2: Pila PEM y equipos complementarios. .	64
4.1.4	Modelado del sistema global de vehículo híbrido de MCI y pila PEM. 82	
4.2	Validación.....	84
4.2.1	Comparación de resultados con modelo de referencia.....	84
4.2.2	Propiedades termodinámicas de las corrientes del sistema.	86
4.2.3	Flujos energéticos de las corrientes del sistema.	87
5	Análisis del sistema bajo diversos escenarios.....	88
5.1	Potencia del MCI (todo lo demás fijo, caso de referencia).	88
5.2	potencia de la pila PEM (todo lo demás fijo, caso de referencia).....	90
5.3	Caso de referencia - flujo N[1] (20% hacía arriba y hacia abajo).	92
5.4	Caso de referencia - flujo N[6] (20% hacía arriba y hacia abajo).	93
5.5	Caso de referencia - flujo N[9] (20% hacía arriba y hacia abajo).	94
5.6	Caso de referencia - relación m[9]/m[4] (20% hacía arriba y hacia abajo). 95	
	Conclusiones y comentarios finales.	97
	Apéndice A. Referencias de los fluidos de trabajo en EES.....	99
	Apéndice B. Cálculo de propiedades del amoníaco en fase gaseosa (altas temperaturas).	103
	Apéndice C. Código EES del sistema de vehículo híbrido de pila PEM y MCI.	105
	Nomenclatura y términos empleados en los sistemas.....	108
	Referencias y bibliografía.	109

Índice de figuras.

Figura 1. Cambio en la temperatura global de la superficie de la tierra en relación con las temperaturas promedio de 1951-1980.(Fuente: NASA's Goddard Institute for space studies) [2].	3
Figura 2. Niveles de dióxido de carbono (CO ₂) en la atmosfera, se aprecia el incremento de este con el pasar de los años lo que contribuye al calentamiento global. (Fuente: Monthly Measurements) [3].	3
Figura 3. Número de años en los que se agotarían las reservas de hidrocarburos de México al 1 de enero de 2019, suponiendo un ritmo de producción constante igual al observado en 2018. El término PCE se refiere a petróleo crudo equivalente.(Fuente: CNH) [4].	5
Figura 4. Relaciones de reservas a producción (R / P), 2019 por región (años). (Fuente: BP, anteriormente British Petroleum) [6].	6
Figura 5. Clasificación general de los vehículos híbridos [14].	12
Figura 6. Configuración de híbrido de combustión interna con motor eléctrico acoplados en paralelo [1].	13
Figura 7. Configuración de híbrido de combustión interna con motor eléctrico acoplados en serie [1].	13
Figura 8. Configuración de híbrido de combustión interna con motor eléctrico acoplados en serie-paralelo [1].	14
Figura 9. Configuración de híbrido de combustión interna con motor eléctrico acoplados en arreglo complejo [1].	14
Figura 10. Configuración y componentes de un vehículo MCI de gasolina tradicional [15].	16
Figura 11. Configuración y componentes de un vehículo EV [16].	17
Figura 12. Configuración y componentes de un vehículo híbrido eléctrico HEV [18].	18
Figura 13. Componentes y características de un vehículo PHEV operado con gasolina [19].	20
Figura 14. Características y componentes de un vehículo híbrido de celda de combustible FCEV, que emplea como combustible hidrógeno [20].	23
Figura 15. Sistema de vehículo híbrido impulsado por un MCI y una pila de combustible de hidrógeno PEM, obtenido a bordo a través de la unidad DSU que disocia el amoníaco del taque de almacenamiento [22].	25
Figura 16. Usos del amoníaco en sistemas de potencia, y sus distintas formas de ingresar a estos, considerando el amoníaco como fuente de hidrógeno [25].	27
Figura 17. Diagrama del sistema de combustible de un motor de combustión interna MCI de encendido por chispa SI, el cual trabaja con amoníaco e hidrógeno como combustibles, además se muestra la entrada de aire al sistema, basado en el sistema experimental de [32].	33

Figura 18. Motor de combustión interna experimental modelo Lombardini LGW 523 MPI, probado con amoníaco e hidrógeno, en él se aprecian los inyectores, utilizado para pruebas por [33].	33
Figura 19. Tipos de DSU (catalizadores) para la descomposición termo-catalítica del amoníaco [25].	35
Figura 20. Componentes básicos de una celda de combustible, operada con hidrógeno [25].	36
Figura 21. Clasificación general de las celdas de combustible FC [25].	38
Figura 22. Descripción de funcionamiento de una PEMFC operada con hidrógeno en el lado izquierdo. En la figura del lado derecho se muestran los elementos que componen una monocelda de una pila de tipo PEM [37].	39
Figura 23. Primera parte del modelo: tanque, MCI, DSU y componentes auxiliares.	46
Figura 24. Intercambiador de calor HEX_1 , con sus respectivas corrientes, donde el NH_3 es la corriente fría (3 a 5) y el H_2 es la corriente caliente (6 a 8).	58
Figura 25. Segunda parte del modelo: pila PEM y componentes auxiliares.	64
Figura 26. Parámetros para modelar una pila de combustible del tipo PEM, que consume H_2 y O_2 tomado del aire, en ella se observan los flujos que ocurren en ella [44].	66
Figura 27. Variación de la eficiencia energética, exergética y destrucción de exergía del MCI y pila PEM, así como del sistema general, variando la potencia de salida del MCI.	89
Figura 28. Potencia de salida de la pila PEM al variar la densidad de corriente. Así como la variación de la eficiencia energética, exergética, y la destrucción de exergía del MCI, de la pila PEM y del sistema general respectivamente, al variar la potencia de salida de la pila PEM.	91
Figura 29. Variación de la eficiencia energética, exergética y destrucción de exergía del MCI y pila PEM, así como del sistema general, variando el flujo de amoníaco NH_3 suministrado al sistema.	92
Figura 30. Variación de la eficiencia energética, exergética y destrucción de exergía del MCI y pila PEM, así como del sistema general, variando el flujo de H_2 suministrado al MCI.	94
Figura 31. Variación de la eficiencia energética, exergética y destrucción de exergía del MCI y la pila PEM, así como del sistema general, variando la relación de flujo $m[9]/m[4]$ suministrado al MCI.	96
Figura 32. Escala de referencias para la determinación de las entalpías de los gases ideales en el sistema de vehículo híbrido en EES.	100
Figura 33. Escala de referencias para la determinación de las entropías de los gases ideales en el sistema de vehículo híbrido en EES.	102

Índice de tablas:

Tabla 1. Algunas propiedades termo-físicas del hidrógeno [25].....	28
Tabla 2. Comparación de las características del amoníaco como combustible comparado con otros combustible comunes en su forma de almacenamiento en tanques en forma líquida [34].	32
Tabla 3. Parámetros termodinámicos, utilizados para el modelado de la primera parte del sistema, que incluye tanque, MCI, DSU, y HUP, estados del 1 al 14, tomados de las referencias [12], [22], [25], [41].	47
Tabla 4. Propiedades de datos de entrada útiles para el modelado del motor MCI tomados de [22].	54
Tabla 5. Parámetros de operación de la unidad de disociación térmica de amoníaco DSU, tomados de las referencias [12] y [22].	59
Tabla 6. Cálculo de la fracción molar de la reacción química del amoníaco.	60
Tabla 7. Parámetros de entrada para el modelo y validación, de la pila PEM y sus componentes auxiliares, que componen el sistema de vehículo híbrido de MCI y pila PEM, tomados de las referencias [22], [43], [44] y [45].	65
Tabla 8. Parámetros de empleados para la determinación de los flujos molares y másicos del sistema de pila de combustible PEM del sistema de vehículo híbrido de MCI y pila PEM, tomados de las referencias [22], [25], [39] y [48].	73
Tabla 9. Parámetros de entrada utilizados para el modelado de los componentes auxiliares del sistema de pila PEM, tomados de las referencias [22], [42], [39] y [48].	78
Tabla 10. Algunos datos de operación del sistema MCI, DSU y pila PEM, los cuales fueron utilizados para la validación del modelo de referencias [12] y [22].	84
Tabla 11. Comparación de parámetros importantes para la validación del modelo de vehículo híbrido de MCI-pila PEM, tomados de [12] y [22].	85
Tabla 12. Propiedades termodinámicas de las corrientes del sistema de vehículo de MCI y pila PEM obtenidas en el modelado y referenciadas a 0°C. *nr = No reportado. Entalpías y entropías calculadas a la temperatura de referencia de 0 [°C] o 273.15 [K], tanto para sustancias puras como para gases ideales del sistema (ver apéndice A).	86
Tabla 13. Flujos energéticos de los componentes del vehículo híbrido, obtenidas en el modelado del sistema de vehículo híbrido MCI y pila PEM. *nr = No reportado.	87
Tabla 14. Resultados obtenidos en el sistema al variar la potencia de salida del MCI.	89
Tabla 15. Resultados obtenidos en el sistema al variar la potencia de salida de la pila PEM, logrado al hacer variar la densidad de corriente y con la potencia de MCI fija a 118 kW.	90
Tabla 16. Resultados de los principales parámetros obtenidos en el sistema al variar el flujo de NH ₃ que se suministra al sistema N[1] en un 20% más, y posteriormente un 20% menos.	92
Tabla 17. Resultados de los principales parámetros obtenidos en el sistema al variar el flujo de H ₂ que se produce en el sistema es decir N[6] en un 20% más, y posteriormente un 20% menos.	93

Tabla 18. Resultados de los principales parámetros obtenidos en el sistema al variar el flujo de H_2 que se suministra al MCI, es decir $N[9]$ en un 20% más, y posteriormente un 20% menos.....	94
Tabla 19. Resultados de los principales parámetros obtenidos en el sistema, al variar la relación de flujo de H_2 con respecto al NH_3 que se suministra al MCI es decir $m[9]/m[4]$ en un 20% más, y posteriormente un 20% menos.	95
Tabla 20. Valores de las constantes de la ecuación de Shomate, para el cálculo de propiedades del amoníaco en fase gas, datos tomados de la referencia [41].	104

1 Introducción.

1.1 Contexto general.

1.1.1 Contaminación del aire y tipos de contaminantes.

En la actualidad, todos los vehículos dependen de la combustión de combustibles de hidrocarburos (HC) para obtener la energía necesaria para su propulsión. La combustión es una reacción entre el combustible y el aire que libera calor y productos de combustión. Idealmente, la combustión de un HC produce solo dióxido de carbono (CO_2) y agua, que no dañan el medio ambiente. De hecho, las plantas verdes "digieren" dióxido de carbono por fotosíntesis. El dióxido de carbono es un ingrediente necesario en la vida vegetal. Los animales no sufren al respirar dióxido de carbono a menos que su concentración en el aire sea tal que el oxígeno esté casi ausente. En realidad, la combustión de combustible HC en motores de combustión nunca es ideal. Además del dióxido de carbono y el agua, los productos de combustión contienen una cierta cantidad de óxidos de nitrógeno (NO_x), monóxidos de carbono (CO) y HC no quemados, todos los cuales son tóxicos para la salud humana y el medio ambiente [1].

Óxidos de nitrógeno (NO_x).

Resultan de la reacción entre el nitrógeno en el aire y el oxígeno. Teóricamente, el nitrógeno es un gas inerte. Sin embargo, las altas temperaturas y presiones en los motores crean condiciones favorables para la formación de óxidos de nitrógeno. La temperatura es, con mucho, el parámetro más importante en la formación de óxido de nitrógeno. El óxido de nitrógeno más comúnmente encontrado es el óxido nítrico (NO), aunque hay pequeñas cantidades de dióxido nítrico (NO_2) y trazas de óxido nitroso (N_2O). Una vez liberado a la atmósfera, el NO reacciona con el oxígeno para formar NO_2 . El dióxido de nitrógeno es en parte responsable del smog; Su color parduzco hace visible el smog. También reacciona con el agua atmosférica para formar ácido nítrico (HNO_3), que se diluye en la lluvia. Este fenómeno se conoce como "lluvia ácida" y es responsable de la destrucción de los bosques en los países industrializados. La lluvia ácida también contribuye a la degradación de los monumentos históricos hechos de mármol [1].

Monóxido de carbono (CO).

El monóxido de carbono es el resultado de la combustión incompleta de HC debido a la falta de oxígeno. Es un veneno para los seres humanos y los animales que lo inhalan o respiran. Una vez que el monóxido de carbono llega a las células sanguíneas, se fija a la hemoglobina en lugar de oxígeno, disminuyendo así la cantidad de oxígeno que llega a los órganos y reduciendo las capacidades físicas y mentales de los seres vivos afectados. El mareo es el primer síntoma de envenenamiento por monóxido de carbono, que puede conducir rápidamente a la muerte. El monóxido de carbono se une más fuertemente a la hemoglobina que el oxígeno [1].

Combustibles hidrocarburos (HC) no quemados.

Los HC no quemados son el resultado de la combustión incompleta de los combustibles hidrocarburos y dependiendo de su naturaleza, los HC no quemados pueden ser dañinos para

los seres vivos. Algunos de estos HC no quemados pueden ser venenos directos o sustancias químicas cancerígenas como partículas, benceno, u otras partículas [1].

Otros contaminantes.

Las impurezas en los combustibles provocan la emisión de contaminantes. La impureza principal es el azufre, se encuentra principalmente en el diésel y el combustible para aviones, pero también en la gasolina y el gas natural. La combustión de azufre (o compuestos de azufre como el sulfuro de hidrógeno) con oxígeno libera óxidos de azufre (SOx). El dióxido de azufre (SO₂) es el producto principal de esta combustión. En contacto con el aire, forma trióxido de azufre, que luego reacciona con el agua para formar ácido sulfúrico, un componente principal de la lluvia ácida. Cabe señalar que las emisiones de óxido de azufre se originan en fuentes de transporte, pero también en gran parte de la combustión de carbón en plantas de energía y fábricas de acero. Las compañías petroleras agregan compuestos químicos a sus combustibles para mejorar el rendimiento o la vida útil de los motores tales como el plomo tetraetilo, a menudo denominado simplemente "plomo", el cual como metal pesado que es causa cáncer y enfermedades, su uso ahora está prohibido en la mayoría de los países desarrollados y ha sido reemplazado por otros productos químicos [1].

1.1.2 Calentamiento global.

El calentamiento global es el resultado del "efecto invernadero" inducido por la presencia de dióxido de carbono y otros gases, como el metano, en la atmósfera. Estos gases atrapan la radiación infrarroja del sol reflejada por el suelo, reteniendo así la energía en la atmósfera y aumentando la temperatura. Un aumento de la temperatura de la tierra provoca daños ecológicos importantes en sus ecosistemas y en muchos desastres naturales que afectan a las poblaciones humanas. Considerando los daños ecológicos inducidos por el calentamiento global, la desaparición de algunas especies en peligro es una preocupación porque esto desestabiliza los recursos naturales que alimentan a algunas poblaciones. También hay preocupaciones sobre la migración de algunas especies de mares cálidos a mares del norte previamente más fríos, donde potencialmente pueden destruir especies endémicas y las economías que viven de esas especies. Los desastres naturales llaman nuestra atención más que los desastres ecológicos debido a la amplitud de los daños que causan. Se cree que el calentamiento global ha inducido fenómenos meteorológicos como "El niño", que perturba la región del Pacífico Sur y regularmente causa tornados, inundaciones y sequías. El derretimiento de los casquetes polares, otro resultado importante del calentamiento global, eleva el nivel del mar y puede causar la inundación permanente de las regiones costeras y, a veces, de países enteros [1]. En la Figura 1 se ilustra el cambio en la temperatura global de la superficie de la tierra en relación con las temperaturas promedio de 1951-1980. Diecinueve de los 20 años más cálidos han ocurrido desde 2001, con la excepción de 1998.

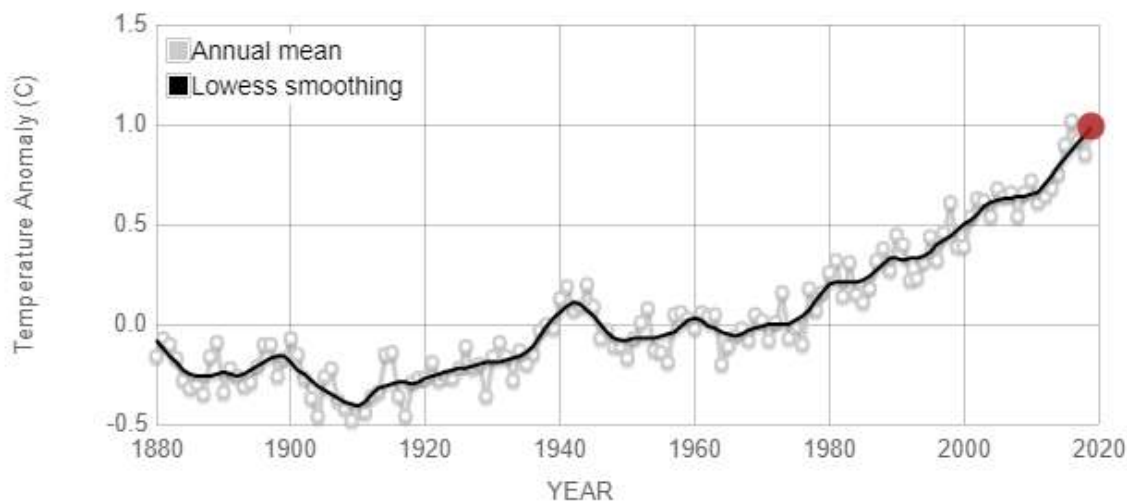


Figura 1. Cambio en la temperatura global de la superficie de la tierra en relación con las temperaturas promedio de 1951-1980.(Fuente: NASA's Goddard Institute for space studies) [2].

El dióxido de carbono (CO_2) es un importante gas que atrapa el calor (invernadero), que se libera a través de actividades humanas como la deforestación y la quema de combustibles fósiles, así como procesos naturales como la respiración y las erupciones volcánicas. En la Figura 2, se muestran los niveles de CO_2 atmosférico medidos en el Observatorio Mauna Loa, Hawai, en los últimos años, con un ciclo estacional promedio eliminado.

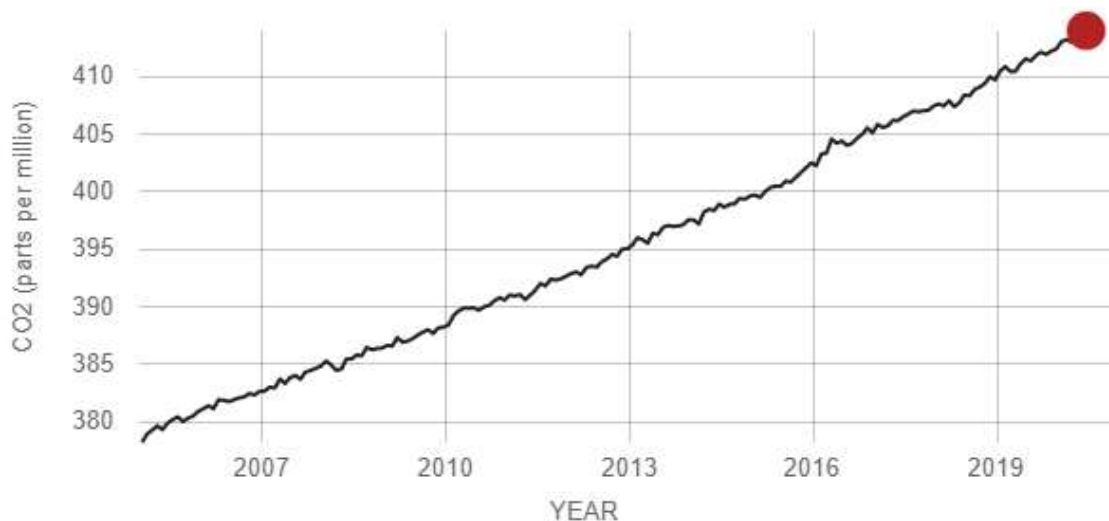


Figura 2. Niveles de dióxido de carbono (CO_2) en la atmosfera, se aprecia el incremento de este con el pasar de los años lo que contribuye al calentamiento global. (Fuente: Monthly Measurements) [3].

1.1.3 Agotamiento de recursos petroleros.

La gran mayoría de los combustibles para el transporte son combustibles líquidos procedentes del petróleo. El petróleo es un combustible fósil, resultante de la descomposición

de materias vivas que fueron encarceladas hace millones de años en capas geológicamente estables. Los seres vivos quedan atrapados en un espacio cerrado, donde encuentran altas presiones y temperaturas y se transforman lentamente en HC o carbón, dependiendo de su naturaleza. Este proceso lleva millones de años en realizarse. Esto es lo que hace que los recursos de la tierra en combustibles fósiles sean finitos.

El petróleo extraído hoy en día es el crudo fácilmente extraíble que se encuentra cerca de la superficie, en regiones donde el clima no plantea problemas importantes. Se cree que hay mucho más petróleo debajo de la corteza terrestre en regiones como Siberia o el Ártico estadounidense y canadiense. En estas regiones, las preocupaciones climáticas y ecológicas son obstáculos importantes para la extracción o prospección de petróleo. Las reservas probadas son aquellas cantidades que la información geológica y de ingeniería indica con certeza razonable que pueden extraer en el futuro de reservorios conocidos en las condiciones económicas y operativas existentes. La estimación de las reservas totales de la Tierra es una tarea difícil por razones políticas y técnicas. Sin embargo, es obvio que el consumo (y, por lo tanto, la producción) aumenta anualmente para mantenerse al día con el crecimiento de las economías desarrolladas y en desarrollo. Es probable que el consumo aumente en proporciones gigantescas con el rápido desarrollo de algunos países en gran parte poblados, particularmente en la región de Asia y el Pacífico mas no así el recurso disponible causando eventualmente la escasez de los combustibles fósiles [1].

Por otro lado, las reservas petroleras se clasifican, según datos del CNIH (Centro Nacional de Información de Hidrocarburos), en:

1P = Probadas

2P = (Probadas + Probables)

3P = (Probadas + Probables + Posibles)

Como ejemplo de lo anterior tenemos los siguientes datos en México cuya producción anual actual es de 1616 miles de barriles diarios de producción de petróleo a junio 2020, y cuyas reservas se aproximan a 25.1 miles de millones de barriles de petróleo crudo equivalente de la categoría 3P [4].

Con lo cual se observa en la Figura 3, una relación de reservas/producción en México y suponiendo que se mantiene la producción como en el año 2018, los años que se agotaran las reservas de combustibles fósiles.

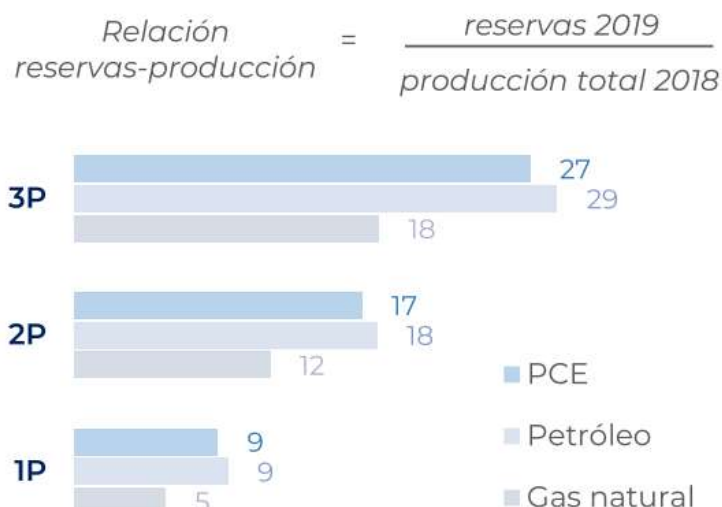


Figura 3. Número de años en los que se agotarían las reservas de hidrocarburos de México al 1 de enero de 2019, suponiendo un ritmo de producción constante igual al observado en 2018. El término PCE se refiere a petróleo crudo equivalente. (Fuente: CNH) [4].

Según BP's annual statistical review, en 2018 el mundo tenía reservas probadas de petróleo de 1,73 billones de barriles, suficientes para llenar 263,000 edificios Empire State. Si la sociedad sigue aprovechando esas reservas a la tasa de producción actual de alrededor de 100 millones de barriles por día, sería suficiente para durar unos 50 años, la mejor parte de la vida de la mayoría de las personas. Pero de acuerdo con la Agencia Internacional de Energía (AIE), la humanidad podría seguir consumiendo petróleo a tasas similares a las actuales, incluso en el futuro hasta 2040. La agencia con sede en París espera que el consumo mundial se estabilice en algún lugar por encima de 1 millón de barriles por día en la década de 2030, cuando los vehículos eléctricos comienzan a adelantar a los automóviles que funcionan con gasolina y diésel, y disminuyen solo un poco a partir de entonces al menos hasta 2040. Las proyecciones para 2070 son difíciles de lograr, pero si los escenarios de la AIE sugieren lo que está por venir, entonces para 2070, el año en que se agoten las reservas probadas actuales.[5].

Las reservas mundiales probadas de petróleo eran de 1734 mil millones de barriles a fines de 2019, una disminución de 2 mil millones de barriles en comparación con 2018. La relación R/P es el número de años que las reservas probadas durarían si la producción continuara en su nivel actual. La relación R/P global muestra que las reservas de petróleo en 2019 representaron 50 años de producción actual. A nivel regional, América del Sur y Central tiene la relación R/P más alta (144 años) mientras que Europa tiene la más baja (12 años). La OPEP posee el 70,1% de las reservas mundiales. Los principales países en términos de reservas son Venezuela (17.5% de las reservas mundiales), seguidos de cerca por Arabia Saudita (17.2%) y Canadá (9.8%). Lo anterior se muestra en la Figura 4 [6].

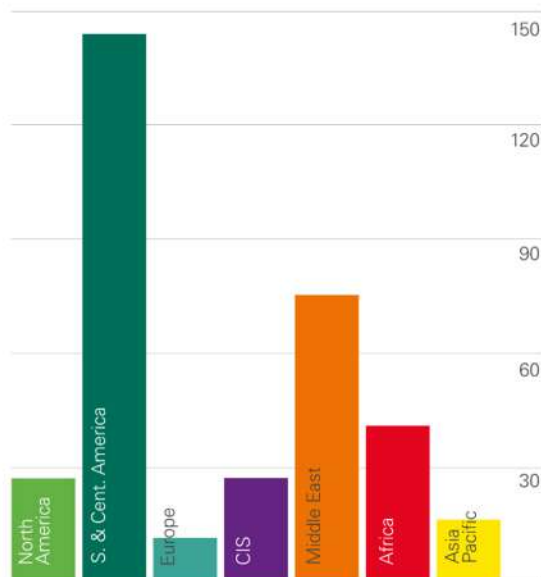


Figura 4. Relaciones de reservas a producción (R / P), 2019 por región (años). (Fuente: BP, anteriormente British Petroleum) [6].

1.1.4 Costos inducidos.

Los problemas asociados con la combustión frenética de los combustibles fósiles son muchos: contaminación, calentamiento global y agotamiento previsible de los recursos, entre otros. Aunque es difícil de estimar, los costos asociados con estos problemas son enormes e indirectos, y pueden ser financieros, humanos, o ambos. Los costos inducidos por la contaminación incluyen, entre otros, gastos de salud, el costo de replantar bosques devastados por la lluvia ácida y el costo de limpiar y reparar monumentos corroídos por la lluvia ácida.

Los gastos de salud probablemente representan la mayor parte de estos costos, especialmente en países desarrollados con medicina socializada o poblaciones aseguradas por la salud. Los costos asociados con el calentamiento global son difíciles de evaluar. Pueden incluir el costo de los daños causados por los huracanes, la pérdida de cultivos debido a la sequedad, las propiedades dañadas debido a las inundaciones y la ayuda internacional para aliviar a las poblaciones afectadas [1].

1.2 Motivación y justificación.

Dados los problemas expuestos en el contexto de este trabajo, es evidente que se requiere la investigación y posterior desarrollo de tecnologías alternativas que poco a poco vayan remplazando las que al día de hoy se utilizan para cubrir la necesidad de movilidad de las personas que requieren llegar a sus destinos y transportar materiales para la fabricación de bienes y servicios, pero que no generen los problemas ocasionados por las tecnologías actuales y que además sean sustentables y eficientes.

Se pretende estudiar y caracterizar un sistema de transporte eficiente y limpio, que sea una alternativa como medio de transporte real y que además sea posible desarrollar con los

avances tecnológicos actuales. Siendo esta una opción más con el cada vez más evidente avance de los sistemas de transporte puramente eléctricos.

En la actualidad predominan los vehículos a base de combustibles fósiles, junto con los problemas que estos conllevan, pero tanto a nivel académico como industrial, se trabaja en el desarrollo de tecnologías limpias y efectivas como lo son los vehículos eléctricos, más sin embargo estos tienen sus limitaciones como lo son los tiempos de carga prolongados de sus baterías y una baja autonomía para recorrer grandes distancias, por esta razón se propone la utilización de sistemas híbridos que funjan como un sistema de transición y una opción más para el desarrollo de estas tecnologías, pero sin ser totalmente dependientes de la red eléctrica, siendo de vital importancia que estos no produzcan emisiones o que sean lo menos posible dañinas a el medio ambiente y las personas.

En esta investigación se modelará y validará para su posterior estudio un sistema de vehículo híbrido a base amoníaco como combustible, el cual tendrá dos fuentes de potencia; un motor de combustión interna y un sistema de pila de combustible a base de hidrógeno, solo que este sistema producirá su propio hidrógeno a bordo mediante la disociación del amoníaco. Si bien este sistema ya ha sido propuesto anteriormente, se estudiará su comportamiento general, para caracterizar este último y entender sus posibles limitaciones y mejoras que se podrían implementar a futuro para su desarrollo.

Unos de los principales problemas de este tipo de sistemas es la falta de infraestructura para poder conseguir el hidrógeno necesario para el funcionamiento de la pila, y además lo costoso que resulta la obtención de este ya que se requiere una gran cantidad de energía para su obtención, problema que se pretende solucionar con la configuración del sistema que se estudia, ya que como se mencionó se producirá a bordo.

Sin embargo este tipo de sistemas requieren aún mucho estudio y experimentación para su implementación final como medios de transporte seguros, limpios y eficientes para las personas; así que en esta investigación se contribuirá con la recopilación de información y caracterización de este sistema, para poder generar una pequeña base de datos, obtenidos mediante la investigación y modelado del sistema, que puedan ser útiles para investigaciones posteriores y desarrollo de prototipos de este tipo de sistemas.

1.3 Planteamiento del problema.

El desarrollo de vehículos con motor de combustión interna (MCI), y especialmente automóviles, es uno de los mayores logros de la tecnología moderna. Los automóviles han hecho grandes contribuciones al crecimiento de la sociedad moderna al satisfacer muchas de las necesidades de movilidad en la vida cotidiana. La industria del automóvil y las otras industrias que la atienden, constituyen la columna vertebral de la economía mundial y emplean a la mayor parte de la población activa [2]. Sin embargo, la gran cantidad de automóviles en uso en todo el mundo ha causado y continúa causando serios problemas para el medio ambiente y la vida humana.

Conforme avanza el desarrollo de las naciones, se requiere tener sistemas de movilidad para realizar las tareas del día con día. Más sin embargo hasta ahora se recurre a la tecnología

(automóviles, barcos, aviones, etc.) impulsados por combustibles derivados del petróleo o también llamados hidrocarburos HC. Lo cual suple hasta la fecha esta necesidad de los seres humanos, pero a un costo bastante alto para el planeta y sus habitantes, trayendo consigo contaminación, destrucción, fenómenos naturales, daños a la salud, entre otros.

Por lo cual algunas personas e industrias han estado trabajando para desarrollar tecnologías que cubran las necesidades antes mencionadas, pero con un menor impacto al medio ambiente y a futuro a menor costo económico cuando estas tecnologías alcanzan su desarrollo máximo y sean producidas en masa. Entre ellas se encuentran los motores híbridos, que si bien no son totalmente libres de emisiones de CO₂ (excepto el vehículo eléctrico y pila de combustible operado con hidrógeno), en algunos casos son necesarios, ya que una transición ideal que sería a tener autos 100 % eléctricos, es complicada hoy en día en varios países debido a algunas limitaciones tecnologías y limitadas o inexistentes instalaciones necesarias para su implementación.

Hay que mencionar que el vehículo híbrido es una buena alternativa para contribuir a la reducción de emisiones contaminantes; además, al disminuir el consumo de gasolina, también se reducen los costos de operación del automóvil, permitiéndonos ahorrar dinero. Aunque su costo inicial puede ser alto si se le compara con los vehículos de combustión interna, no obstante, si hacemos un estudio económico, veremos que, a pesar de la diferencia del valor comercial de las tecnologías, a largo plazo tendremos un ahorro significativo [7].

Además de lo anteriormente mencionado, se busca aprovechar al máximo el uso de los recursos, en este caso de la energía, para lo que se hará uso de la termodinámica para la realización de un análisis exergético, para posteriormente realizar un análisis paramétrico del sistema en cuestión.

1.4 Hipótesis.

El desarrollo tecnológico y los problemas con el medio ambiente, así como el agotamiento de recursos petroleros, llevan a desarrollar opciones de transporte para la movilidad, siendo de valiosa aportación el estudio de sistemas donde se haga un mayor aprovechamiento de los recursos naturales, y reducir el impacto ambiental al planeta. Dado que la movilidad es necesaria, se requiere el desarrollo de tecnologías limpias, para esto se propone estudiar un sistema de vehículo híbrido libre de CO₂.

Si se conocen las condiciones de diseño y operación de un vehículo híbrido de MCI y pila PEM que funcione a base de amoníaco como fuente de hidrógeno, se pueden obtener datos útiles para analizar su viabilidad pensando en un posible prototipo de investigación, además de conocer las limitantes que este puede presentar. Para lo anterior es necesario conocer los parámetros de funcionamiento del sistema, para determinar su impacto en el funcionamiento del mismo y ver si existe alguna modificación que vuelvan más eficiente dicho diseño del vehículo o de lo contrario se descarta su implementación como medio de transporte amigable con el medio ambiente.

1.5 Objetivos.

1.5.1 Objetivo general.

Realizar el análisis de un sistema energético avanzado formado por un motor híbrido y determinar las variables de diseño y operativas adecuadas para una aplicación automotriz, mediante el desarrollo de un modelo termodinámico, buscando diferentes parámetros que influyan en el funcionamiento del sistema, que permitan: a) Validar el sistema, b) realizar un estudio paramétrico del sistema y c) Aportar datos y una recopilación de información respecto a esta tecnología para su incorporación como medio de transporte sustentable.

1.5.2 Objetivos específicos.

1. Búsqueda de información detallada de los sistemas híbridos para conocer sus ventajas y desventajas, además de datos que justifiquen y den solidez a la investigación.
2. Recopilación de antecedentes y estudios previos del tema en cuestión que aporten al desarrollo de la investigación.
3. A partir de los objetivos específicos anteriores, seleccionar y proponer un modelo del sistema para llevar a cabo la investigación correspondiente.
4. Mediante un estudio paramétrico, identificar las variables más determinantes del sistema mediante la aplicación de las leyes de la termodinámica.
5. Analizar y presentar sistemáticamente los resultados que se obtengan del modelado y el estudio paramétrico del sistema.

1.6 Revisión de la literatura.

Como antecedentes de esta investigación, se tienen los siguientes casos, en [7] se realiza una optimización del tren de potencia y la estrategia de control de un vehículo eléctrico híbrido para máxima economía de energía, en él se presenta una solución para incrementar la economía de combustible en vehículos eléctricos híbridos derivada de las características físicas del vehículo, el tren de potencia y la estrategia de control, en un estudio de caso se demuestra el incremento en la economía de combustible y la sustentabilidad en la carga de las baterías; aquí, las variables estudiadas se someten a un algoritmo de optimización multiobjetivo.

En [8] se realiza un análisis de rendimiento del sistema de transmisión del tren de fuerza del vehículo híbrido Toyota Camry Hybrid el cual es un modelo híbrido a gasolina y motor eléctrico, en dicho trabajo se realizan diferentes pruebas a este automóvil bajo diferentes condiciones de manejo para buscar el rendimiento más adecuado para el sistema eléctrico y el motor de combustión interna.

En [9] se realiza una optimización del consumo de combustible para vehículos eléctricos híbridos inteligentes evaluándolos durante un trayecto definido, en este se busca lograr excelentes rendimientos en términos de dinámica, economía, respeto al medio ambiente, seguridad y comodidad. La optimización matemática se plantea un problema con un modelo no lineal, el cual tiene condiciones de restricción, objetivos óptimos y estados del sistema, para lograr una mayor carga informática y hacer una simulación más precisa. El sistema que se propone modelar es un motor de combustión interna y un motor eléctrico y este modelo

se introduce a un software para su optimización matemática, llegando a la conclusión que bajo ciertas condiciones de uso del vehículo inteligente logra un ahorro de combustible del 5% del usado antes de la optimización.

Si bien hasta ahora se describieron los antecedentes de trabajos exclusivamente con sistemas híbridos de motores de combustión interna y motores eléctricos en las distintas configuraciones que estos se pueden, no son los únicos sistemas que se han investigado he intentado poner a prueba para su mayor eficiencia energética y optimización.

Se tiene en [10] un ejemplo de un sistema el cual consiste en un vehículo híbrido, pero empleando una celda de combustible la cual opera con hidrógeno, y un motor eléctrico para transformar la reacción química del hidrógeno en energía para tal motor y expulsar únicamente agua como productos de salida del vehículo. Este automóvil incluye un motor eléctrico que está conectado a una celda de combustible y un complejo que incluye una batería y un ultracondensador. La evaluación de este vehículo híbrido se lleva a cabo mediante el uso de varios ciclos de manejo y según este autor los parámetros que más impactan su estudio son el estado de carga de la batería y el consumo de combustible de hidrógeno son los parámetros efectivos que influyen en el rendimiento del vehículo. Los resultados de este trabajo mostraron que en el ciclo de conducción NEDC (El New European Driving Cycle) mediante el uso de ultracapacitor en este modelo, se puede lograr una reducción del 3.3% en el consumo de combustible y una disminución del 20.2% en la diferencia entre el estado de carga inicial y final en el paquete de baterías.

En [11] se realiza un análisis y optimización de un sistema de gestión térmica con material de cambio de fase para vehículos eléctricos híbridos, el cual consiste en realizar un análisis de energía y exergía para investigar un nuevo sistema de enfriamiento de vehículos eléctricos híbridos (HEV), Se calcula la tasa de destrucción de exergía y la eficiencia de exergética de cada componente en un sistema híbrido de gestión térmica. Los resultados del análisis de exergía revelan que la eficiencia de exergía general del sistema con presencia de refrigerante n-octadecano es del 31%, teniendo la mayor tasa de destrucción de exergía de 0,4 kW en el compresor.

Finalmente, en [12] se presenta un análisis exergo-económico y una optimización de un nuevo tipo de vehículo híbrido de pila de combustible. El sistema de propulsión híbrido propuesto incorpora un tanque de amoníaco líquido, una unidad de disociación y separación de amoníaco (DSU), un motor de combustión interna (MCI) y un sistema de pila de combustible PEM. Los gases de escape liberados por el MCI se explotan para suministrar la energía térmica necesaria para descomponer térmicamente el amoníaco en hidrógeno y nitrógeno a bordo. El MCI se alimenta con una mezcla de amoníaco e hidrógeno generado por la DSU. El hidrógeno adicional liberado por la DSU también se proporcionará al sistema de celdas de combustible y generará energía eléctrica, que se suministrará al motor eléctrico para proporcionar la tracción requerida al vehículo. Se estudia la influencia de la variación de los diferentes parámetros operativos en las eficiencias de energía y exergía del sistema, así como la tasa de costos exergo-económicos del sistema. La función objetivo para la optimización multiobjetivo comprende la eficiencia de exergética a maximizar y la tasa de costo total del sistema a minimizar, el estudio de optimización se realiza utilizando un algoritmo genético evolutivo. Los resultados obtenidos en este estudio son:

-
- Las eficiencias globales de energía y exergía del sistema se encuentran en 38.66% y 36.2% respectivamente a un flujo molar de amoníaco de 38.9 mol/min, a una densidad de corriente de la celda de combustible de 1150 mA/cm², y relación de masa de hidrógeno a amoníaco del 1%.
 - La tasa de costo total del sistema se encuentra en 38.47 US\$/h.
 - El factor exergoeconómico del sistema es 36.2%.
 - El sistema integrado puede lograr una eficiencia exergética máxima de 61.3% con una tasa de costo total más baja de 7.8 US\$/h, con una densidad de corriente de la celda de combustible de 1348 mA/cm², con una tasa de interés de 0.02, así como una tasa de flujo de amoníaco de 24 mol/min y vida operativa del sistema de casi 20 años.

2 Vehículos propulsados con motores híbridos.

2.1 Definición de vehículo híbrido.

Un vehículo híbrido combina dos fuentes de energía (potencia). Las posibles combinaciones incluyen diésel/eléctrico, gasolina/eléctrico y pila/batería de combustible, etc. Por lo general, una fuente de energía es el almacenamiento y la otra es la conversión de un combustible en energía. Todos los coches híbridos combinan dos propulsores o fuentes de energía. A un auto se le denomina “híbrido” cuando funcionan con dos o más tipos de fuentes de potencia para su propulsión. Lo normal es que encontremos autos con motor de combustión interna (el común) más uno o más motores eléctricos.

Una definición alternativa para híbrido depende de un modo de operación. Para ser un híbrido, el vehículo debe tener al menos dos modos de propulsión. Un camión que usa un motor diésel para alimentar un generador, que a su vez alimenta varios motores eléctricos para la tracción total, no es un híbrido. Si el camión tiene almacenamiento de energía eléctrica para proporcionar un segundo modo, el cual sea de asistencia eléctrica, entonces es un híbrido [13]. Es difícil en general dar una definición de vehículo híbrido ya que depende del modo en que se clasifiquen estos sistemas.

2.2 Clasificación de los vehículos híbridos.

Es complicado dar una clasificación de estos sistemas, dado que se sigue innovando actualmente configuraciones y prototipos por parte de las empresas que desarrollan estas tecnologías, sin mencionar que cada compañía posee su sistema de clasificarlos, pero en general en la Figura 5, se muestra una clasificación general.

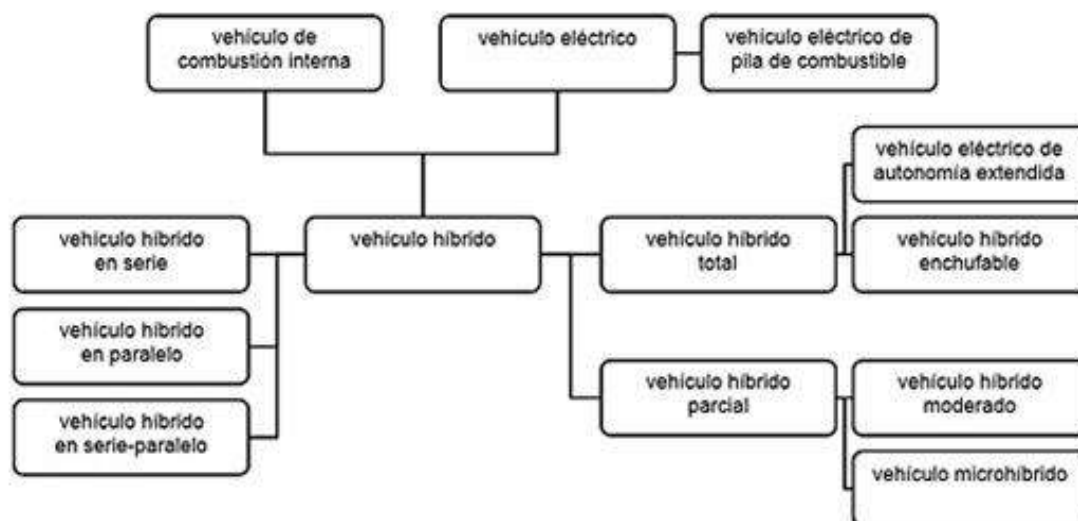


Figura 5. Clasificación general de los vehículos híbridos [14].

Como se observa en la Figura 5, hay varios tipos de motores híbridos en vehículos, a continuación, se detallarán algunos y se toma como ejemplo la combinación de un vehículo eléctrico y uno que funciona con motor de combustión interna alimentado con gasolina, el

cual resulta en un vehículo híbrido eléctrico y atendiendo a su principio de funcionamiento se pueden clasificar en tres tipos, que se describen a continuación:

Híbrido en paralelo.

Tanto el motor convencional como el eléctrico trabajan a la vez para transmitir la potencia a las ruedas. Es decir, ambos motores trabajan simultáneamente. Es una solución relativamente sencilla, pero no es la más eficiente. También son conocidos como semi-híbridos. Esto se ilustra en la Figura 6.

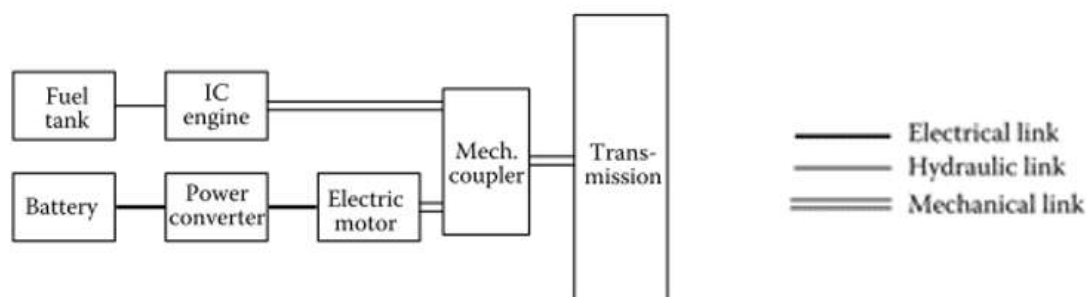


Figura 6. Configuración de híbrido de combustión interna con motor eléctrico acoplados en paralelo [1].

Híbrido en serie.

El motor de combustión convencional no tiene conexión mecánica con las ruedas, sólo se usa para generar electricidad. Es decir, su cometido es generar electricidad para que el motor eléctrico mueva al vehículo. Cuando la batería se llena, el motor convencional se desconecta temporalmente. Esta configuración se muestra en la Figura 7.

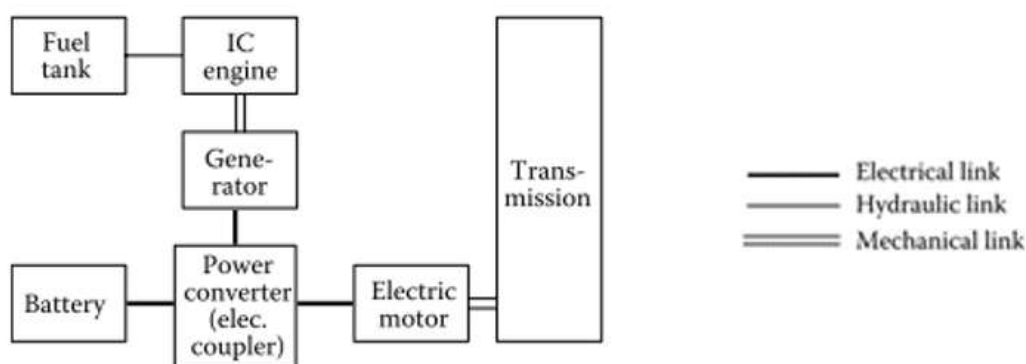


Figura 7. Configuración de híbrido de combustión interna con motor eléctrico acoplados en serie [1].

Híbrido total.

El coche se puede mover con el impulso de cualquiera de sus motores (convencional y eléctrico), ya que ambos tienen conexión mecánica con las ruedas, lo que permite circular en

modo eléctrico. Es la solución más eficiente. También son conocidos como vehículos híbridos totales.

Híbrido combinado.

Puede darse el caso de que el motor de gasolina pueda funcionar a la vez como generador o como impulsor, indistintamente, eso es un híbrido combinado. Dentro de los híbridos combinados tenemos las siguientes configuraciones:

Híbrido serie-paralelo.

La característica distintiva de esta configuración es el empleo de dos acopladores de potencia mecánicos y eléctricos. En realidad, esta configuración es la combinación de estructuras en serie y paralelo, que posee las principales características de ambos modos de operación y más abundantes que las de ambas estructuras por sí solas. Por otro lado, es relativamente más complicado y puede ser de mayor costo. En la Figura 8 se observa esta configuración.

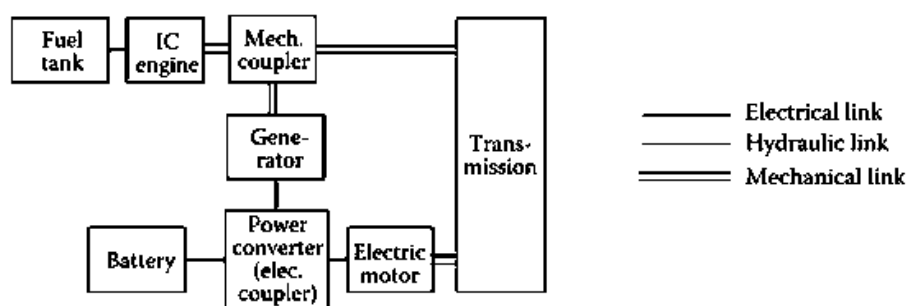


Figura 8. Configuración de híbrido de combustión interna con motor eléctrico acoplados en serie-paralelo [1].

Híbrido complejo.

Este tiene una estructura similar a la serie-paralelo. La única diferencia es que la función de acoplamiento eléctrico se mueve del convertidor de potencia a las baterías y se agrega un convertidor de potencia más entre el motor/generador y las baterías. Esto se ejemplifica en la Figura 9.

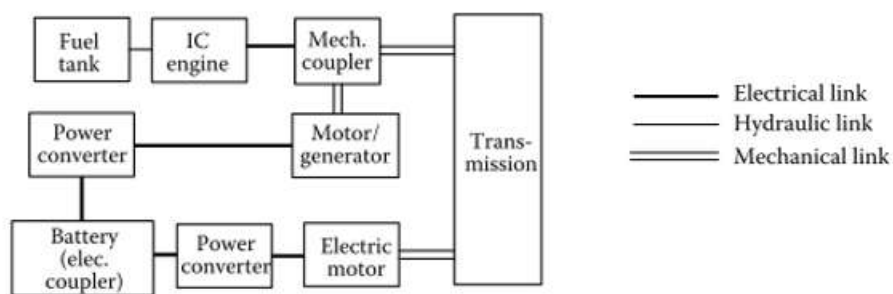


Figura 9. Configuración de híbrido de combustión interna con motor eléctrico acoplados en arreglo complejo [1].

Otros tipos de vehículos híbridos (Clasificación alternativa).

Existe otra clasificación de los vehículos híbridos que depende del grado de "hibridación". Así, los híbridos se dividen en vehículos híbridos totales y vehículos híbridos parciales. El híbrido total puede funcionar autónomamente usando sólo el motor de combustión interna o el motor eléctrico únicamente. En el caso de los híbridos parciales, el motor eléctrico es secundario al de combustión interna.

Una de las características de los vehículos híbridos parciales es que disponen de las funciones de arranque y parada (el motor se apaga automáticamente al detenerse el vehículo y se vuelve a poner en marcha al soltar el freno o apretar el embrague) y de freno regenerativo (la energía cinética empleada en frenar se transforma en energía eléctrica para recargar la batería). Los vehículos híbridos parciales se subdividen a su vez en vehículos híbridos moderados y vehículos microhíbridos.

Existe también un vehículo híbrido enchufable, que es un tipo de vehículo híbrido total debido al grado de autonomía que puede conseguir con la batería eléctrica. Una de las últimas novedades es el vehículo eléctrico de autonomía extendida. Según asegura Chevrolet para describir su modelo Volt, el vehículo utiliza la electricidad como principal fuente de alimentación generada por un paquete de baterías de iones de litio en forma de "T". El motor de combustión genera energía para recargar las baterías, pero no para propulsar el vehículo.

Otra opción de vehículos propulsados con combustibles alternativos es aquellos que utilizan hidrógeno de alguna forma. Los vehículos de hidrógeno pueden utilizar un motor de combustión interna o una pila de combustible. Un ejemplo de automóvil de hidrógeno impulsado con pila de combustible es el Honda FCX Clarity.

El hidrógeno está igualmente presente en el vehículo eléctrico de pila de combustible. Este funciona con un motor eléctrico alimentado con la electricidad generada por un dispositivo electroquímico que convierte hidrógeno y oxígeno en agua (pila de combustible).[14].

Además de lo anterior también se pueden clasificar por su tipo de combustible o fuente de energía y conforme avanzan las investigaciones es posible que se intenten realizar más variantes de sistema híbridos con tecnologías alternativas a los combustibles fósiles como paneles solares, energía eólica, magnetismo, etc. Además de sustancias alternativas como combustible como lo es el amoníaco NH_3 el cual se propone como una manera de transportar hidrógeno y producirlo a bordo del vehículo, entre otros fluidos.

2.3 Vehículos convencionales, modernos e híbridos.

A continuación, se describen los sistemas de vehículos más importantes en la actualidad, ya que de ellos se procederá a realizar una comparación de sistemas convencionales versus los principales y más comunes sistemas híbridos más desarrollados hasta ahora.

2.3.1 Vehículos de gasolina/diésel MCI (Motor de combustión interna).

Los vehículos de gasolina y diésel son similares. Ambos usan motores de combustión interna. Un automóvil de gasolina generalmente usa un motor de combustión interna encendido por chispa, en lugar de los sistemas de encendido por compresión utilizados en vehículos diésel.

En un sistema de encendido por chispa, el combustible se inyecta en la cámara de combustión y se combina con aire. La mezcla de aire/combustible se enciende por una chispa de la bujía. Aunque la gasolina es el combustible de transporte más común, existen opciones alternativas de combustible que usan componentes y sistemas de motor similares.

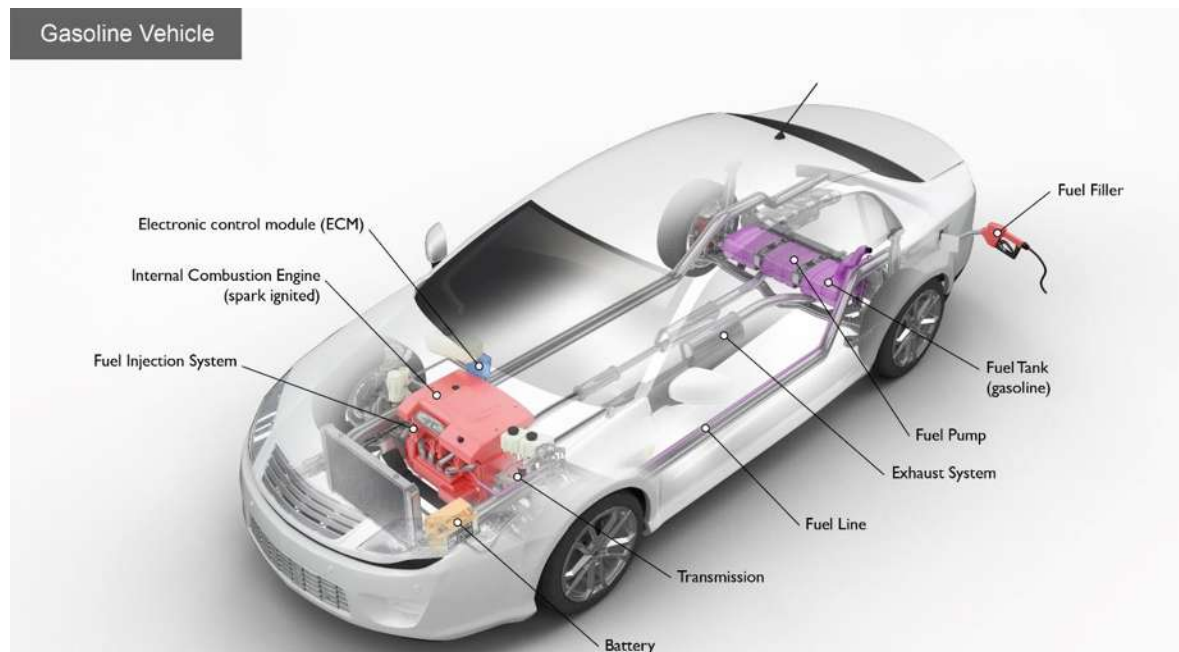


Figura 10. Configuración y componentes de un vehículo MCI de gasolina tradicional [15].

Ventajas de MCI.

- Repostaje (recarga) fácil y rápido.
- Tipo de motor más sencillo.
- Motor conveniente en coches sencillos y baratos debido a su desarrollo en masa.
- Autonomía de muchos kilómetros.
- Potencia y rendimiento en situaciones adversas (altas y bajas temperaturas).

Desventajas de MCI.

- Eficiencias energéticas menores en comparación con otros sistemas.
- Combustible fácilmente incendiable.
- Emite CO₂ y contaminantes que dañan el ambiente y generan el calentamiento global.
- Agotamiento de los combustibles fósiles.
- Liberan contaminantes que dañan la salud de las personas como azufre que forman lluvia ácida.
- Transformación mayoritaria del combustible en calor, ya que un diésel de última generación aprovecha el 43% de ese combustible para transformarlo en potencia mecánica, disipando el resto como calor [15].
- Solo pueden operar con hidrocarburos (modelos actuales), es decir consume HC y no opera con otras fuentes de energía alternas y limpias [15].

Ejemplos: Prácticamente cualquier vehículo comercial actual.

2.3.2 Vehículos eléctricos EV (Electric vehicle).

Los vehículos totalmente eléctricos (EV) tienen un motor eléctrico en lugar de un motor de combustión interna. El vehículo utiliza una batería de tracción grande para alimentar el motor eléctrico y debe enchufarse a una estación de carga o toma de corriente para cargar. Debido a que funciona con electricidad, el vehículo no emite gases de escape de un tubo de escape y no contiene los componentes típicos de combustible líquido, como una bomba de combustible, una línea de combustible o un tanque de combustible.

All-Electric Vehicle

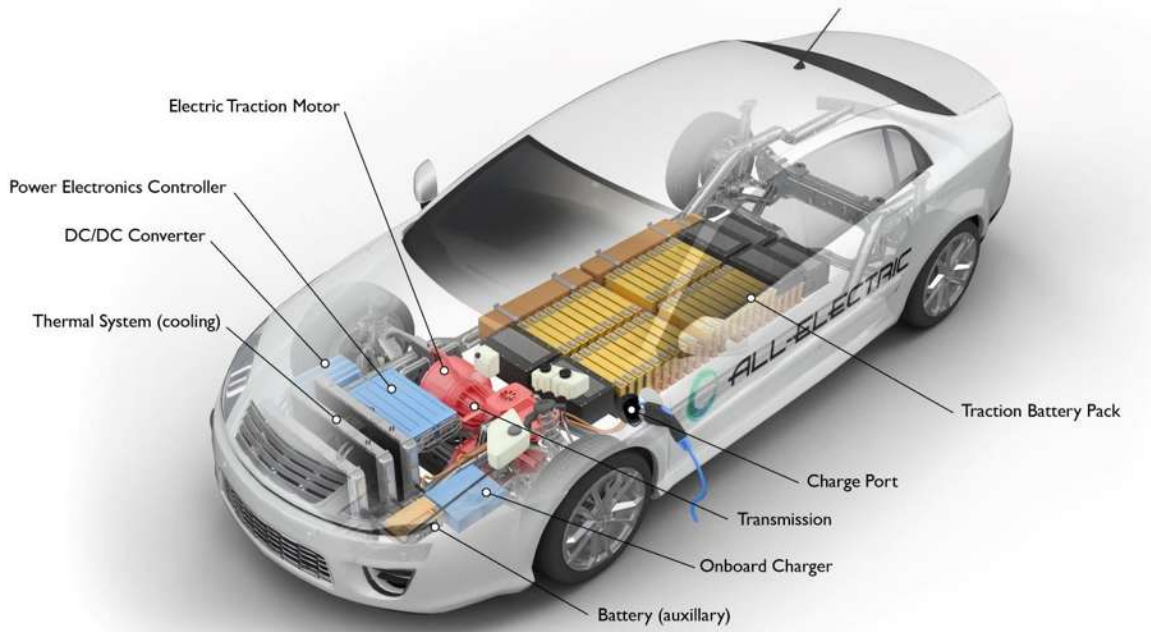


Figura 11. Configuración y componentes de un vehículo EV [16].

Ventajas de EV.

- Diversidad de fuentes energéticas.
- Cero emisiones.
- Alta eficiencia (0.1 y 0.23 kW/h por kilómetro) [16].
- Mantenimiento muy barato y un gran ahorro en combustible
- Silencio total
- Comodidad y confort
- Impuestos e incentivos

Desventajas de EV.

- Poca autonomía que van de los 200 a los 600 kilómetros. La autonomía media de alrededor de 291 kilómetros [16].
- Tiempos de recarga lentos.
- Poca oferta comercial.
- Son caros de adquirir, aunque no de mantener.

- Requieren una infraestructura adecuada (puntos de carga), para que los usuarios tengan una movilidad decente.
- Baterías (vida útil, peso, bajas temperaturas).

Ejemplos: Renault ZOE, Jaguar e-Pace, Audi e-tron, Seat Mii o Hyundai Kona [17].

2.3.3 Vehículo eléctrico híbrido HEV (Hybrid electric vehicle).

Los vehículos eléctricos híbridos funcionan con un motor de combustión interna y un motor eléctrico, que utiliza la energía almacenada en las baterías. Un vehículo eléctrico híbrido no se puede enchufar para cargar la batería. En cambio, la batería se carga mediante el frenado regenerativo y el motor de combustión interna. La potencia adicional proporcionada por el motor eléctrico puede permitir un motor más pequeño. La batería también puede alimentar cargas auxiliares y reducir el ralentí del motor cuando está parado. Juntas, estas características resultan en una mejor economía de combustible sin sacrificar el rendimiento.

Los HEV combinan los beneficios de la alta economía de combustible y las bajas emisiones del tubo de escape con la potencia y el alcance de los vehículos convencionales. Una amplia variedad de modelos HEV están disponibles actualmente. Aunque los HEV a menudo son más caros que los vehículos convencionales similares, algunos costos pueden recuperarse mediante el ahorro de combustible o incentivos estatales.

El frenado regenerativo captura la energía que normalmente se pierde durante el frenado utilizando el motor eléctrico como generador y almacenando la energía capturada en la batería.

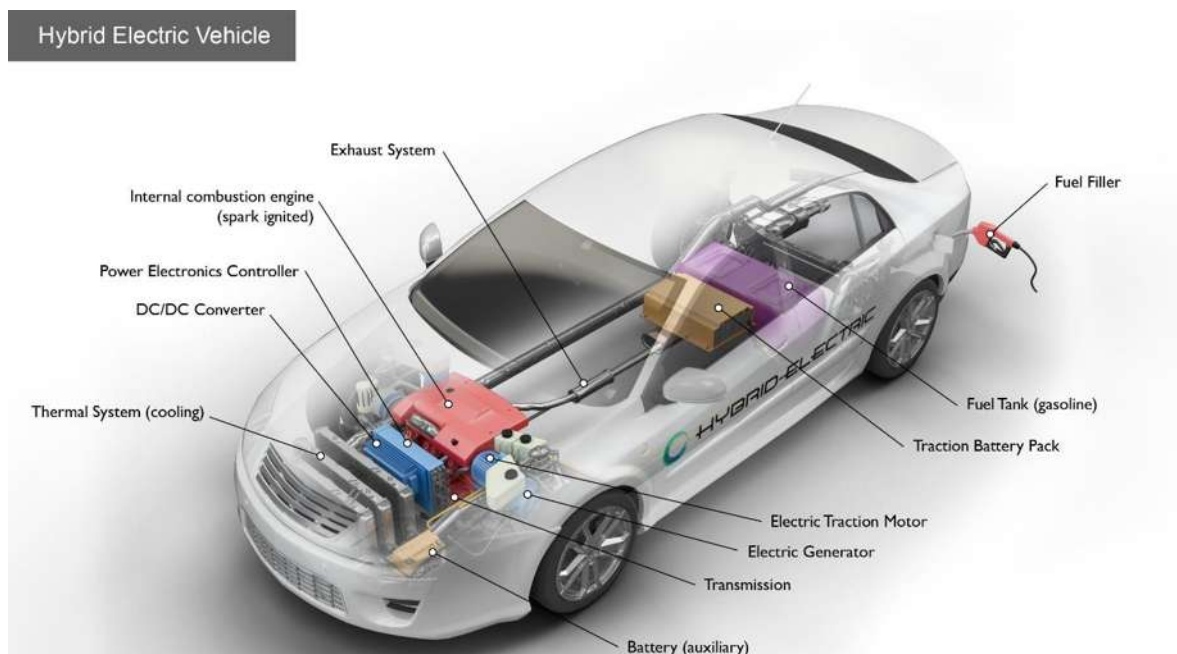


Figura 12. Configuración y componentes de un vehículo híbrido eléctrico HEV [18].

Ventajas de HEV.

- Reducen las emisiones de CO₂ y otros contaminantes.

-
- Reducen el consumo de gasolina en aproximadamente un 30% [18].
 - Mayor rendimiento energético ya que con el frenado regenerativo recuperan parte de la energía de fricción.
 - Motor de combustión trabaja más relajado.
 - Motor de combustión de menor tamaño y por ende menos peso.
 - No contribuye en gran medida al cambio climático.
 - Más autonomía que un vehículo EV puro.
 - Reducen las emisiones.
 - Ideales para conducir en ciudades donde las distancias sean cortas, y con paradas constantes, y por ende se aproveche solo el motor eléctrico y tener cero emisiones.
 - No requiere enchufarse ya que se recarga con el frenado regenerativo y por ende no es necesario tener estaciones de recarga donde conectarlo (baterías se autorecargan).
 - Impuestos e incentivos por parte del gobierno.
 - La batería es pequeña.
 - Mayor aprovechamiento de la energía disponible en el sistema.

Desventajas de HEV.

- La batería no se puede recargar enchufándola a la red.
- Pueden circular aproximadamente menos de 5 km en modo 100% eléctrico [18].
- Mayor costo de producción en comparación con los MCI.
- Mantenimientos más complejos.
- Poca duración de la batería ya que almacena poca carga.
- No funcionan en lugares muy fríos.
- Mayor emisión de contaminantes que un EV.
- Materiales poco sostenibles.
- Mayor peso al tener 2 motores y demás componentes.
- Depende de combustibles hidrocarburos los cuales eventualmente se agotarán.

Ejemplos: Toyota C-HR, Ford Mondeo, Kia Niro, Subaru XV o Renault Clio [17].

2.3.4 Vehículo eléctrico híbrido enchufable PHEV (Plug-in hybrid vehicle).

Los vehículos eléctricos híbridos enchufables (PHEV) generalmente usan baterías para alimentar un motor eléctrico y usan otro combustible, como gasolina, para alimentar un motor de combustión interna (MCI) u otra fuente de propulsión. Las baterías PHEV se pueden cargar usando un toma corriente de pared o una estación de carga, mediante el MCI o mediante un frenado regenerativo. El vehículo generalmente funciona con energía eléctrica hasta que la batería se agota, y luego el automóvil cambia automáticamente para usar el MCI.

Usar electricidad de la red para hacer funcionar el vehículo una parte o la totalidad del tiempo reduce los costos operativos y el uso de combustible, en relación con los vehículos convencionales. Los PHEV también pueden producir niveles más bajos de emisiones, dependiendo de la fuente de electricidad. Hay varios PHEV de servicio liviano disponibles comercialmente, y los vehículos de servicio mediano ahora están ingresando al mercado. Los vehículos de servicio mediano y pesado también se pueden convertir a PHEV. Aunque los PHEV son generalmente más caros que los vehículos convencionales e híbridos similares,

algunos costos pueden recuperarse mediante el ahorro de combustible, un crédito fiscal federal o incentivos estatales.

Los PHEV generalmente tienen paquetes de baterías más grandes que los vehículos eléctricos híbridos. Esto hace posible conducir distancias moderadas usando solo electricidad (alrededor de 10 a más de 50 millas (de 10 a 80 km) en los modelos actuales), comúnmente conocido como el "rango eléctrico" del vehículo.

Durante la conducción urbana, la mayor parte del poder de un PHEV puede provenir de la electricidad almacenada. Por ejemplo, un conductor de PHEV de servicio liviano podría conducir hacia y desde el trabajo con energía totalmente eléctrica, enchufar el vehículo para cargarlo por la noche y estar listo para otro viaje totalmente eléctrico al día siguiente. El motor de combustión interna alimenta el vehículo cuando la batería está casi agotada, durante una aceleración rápida o cuando hay cargas intensas de calefacción o aire acondicionado.

El consumo de combustible PHEV depende de la distancia recorrida entre las cargas de la batería. Por ejemplo, si el vehículo nunca está enchufado para cargar, el ahorro de combustible será aproximadamente el mismo que el de un vehículo eléctrico híbrido de tamaño similar. Si el vehículo se conduce a una distancia más corta que su rango totalmente eléctrico y está enchufado para cargar entre viajes, puede ser posible usar solo energía eléctrica.

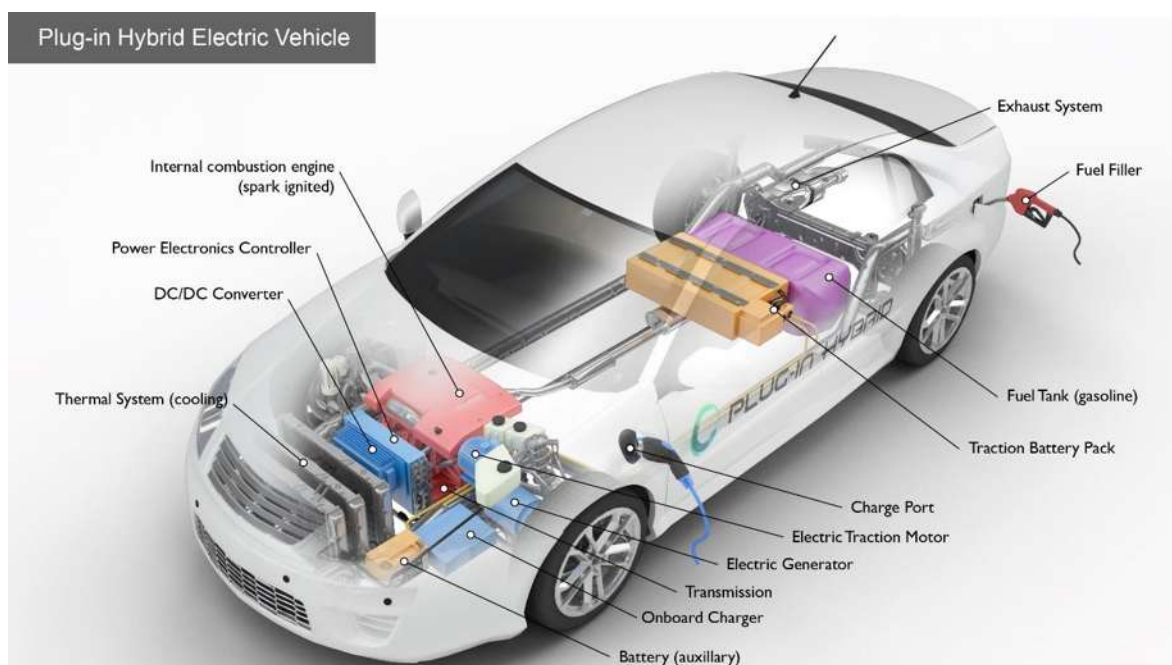


Figura 13. Componentes y características de un vehículo PHEV operado con gasolina [19].

Ventajas de PHEV.

- Consumo de combustible muy bajo o casi nulo en ciudad.
- Pueden circular en modo eléctrico en promedio entre 50 y 80 kilómetros con una carga [19].
- Son ideales para ir y volver del trabajo sin gastar una gota de gasolina.

-
- Es posible recorrer distancias medias en modo cero emisiones.
 - Se pueden hacer largos viajes sin preocuparse por la autonomía.
 - Menor ruido.
 - Conducción más eficiente y cómoda.
 - Incentivos fiscales.
 - El costo de la electricidad es menor que el de la gasolina.
 - Los km por litro en un híbrido enchufable son a menudo sorprendentes. Se habló de hacer un vehículo de 100 mpg (millas por galón= 42.5144 km/litro). Algunos híbridos enchufables incluso excedieron esa marca [17].
 - Las emisiones más bajas, se utiliza menos combustible, por lo que salen menos emisiones. Los niveles de emisión son incluso más bajos que los de los híbridos regulares, y obviamente mucho más bajos de lo normal, los automóviles de gasolina.
 - Mejor aprovechamiento de la energía.
 - Se puede cargar la batería en horas que no esté funcionando el MCI a diferencia de los HEV.
 - En la mayoría de los países hay redes eléctricas para su carga incluso se pueden cargar en viviendas.

Desventajas de PHEV.

- Es necesario enchufarlo constantemente a la red eléctrica (dependiendo del uso).
- Hay pocos centros de carga disponibles en algunos lugares, es decir requiere tener infraestructura o un lugar donde cargar la batería.
- Largos periodos de carga de las baterías aproximadamente 7.5 horas [19].
- Peso de la batería, una vez se queda sin autonomía eléctrica, tiene un lastre de 300 kg que únicamente mueve el MCI [19].
- Alto precio inicial.
- Siguen teniendo emisiones ya que usan combustibles fósiles.
- Limitaciones de temperatura de la batería y sistema eléctrico.
- Depende de combustibles hidrocarburos los cuales eventualmente se agotarán.

Ejemplos: Skoda Superb, Mitsubishi Outlander, Opel Grandland X o Mini Countryman [17].

2.3.5 Vehículos eléctricos de celda de combustible FCEV (Fuel Cell Electric Vehicles).

Al igual que los vehículos totalmente eléctricos, los vehículos eléctricos de celda de combustible (FCEV) usan electricidad para alimentar un motor eléctrico. A diferencia de otros vehículos eléctricos, los FCEV producen electricidad utilizando una celda de combustible alimentada por hidrógeno, en lugar de extraer electricidad de una batería.

Si bien los fabricantes de automóviles podrían diseñar un FCEV con capacidades de enchufe para cargar la batería, la mayoría de los FCEV de la actualidad usan la batería para recuperar la energía de frenado para proporcionar energía adicional durante eventos de aceleración cortos y disminuir la energía entregada desde la celda de combustible con la opción de inactivo o apague de la pila de combustible durante las necesidades de baja potencia.

La cantidad de energía almacenada a bordo está determinada por el tamaño del tanque de combustible de hidrógeno. Esto es diferente de un vehículo totalmente eléctrico, donde la cantidad de energía y energía disponible están estrechamente relacionadas con el tamaño de la batería.

Los vehículos eléctricos de celda de combustible (FCEV) funcionan con hidrógeno. Son más eficientes que los vehículos convencionales con motor de combustión interna y no producen emisiones del tubo de escape: solo emiten vapor de agua y aire caliente. Los FCEV y la infraestructura de hidrógeno para alimentarlos se encuentran en las primeras etapas de implementación.

Los FCEV se alimentan con gas de hidrógeno puro almacenado en un tanque en el vehículo. Al igual que los vehículos convencionales con motor de combustión interna, pueden cargar combustible en menos de 5 minutos y tener un alcance de conducción de más de 300 millas. Los FCEV están equipados con otras tecnologías avanzadas para aumentar la eficiencia, como los sistemas de frenado regenerativos, que capturan la energía perdida durante el frenado y la almacenan en una batería. Los principales fabricantes de automóviles están ofreciendo un número limitado pero creciente de FCEV de producción al público en ciertos mercados, en sintonía con lo que puede soportar la infraestructura en desarrollo [20].

A diferencia de un automóvil eléctrico, la celda de combustible no se recarga mediante un enchufe. En su lugar dispone de unos tanques de hidrógeno que mezclan dicho gas con oxígeno para generar la propulsión del vehículo.

El proceso electroquímico resultante de mezclar oxígeno e hidrógeno se produce en la celda de combustible y genera energía eléctrica, además de agua. Mientras la electricidad resultante se almacena en las baterías para ir nutriendo el motor, el agua restante, en forma de vapor, se expulsa. Efectivamente, los coches de hidrógeno sólo emiten vapor de agua por el tubo de escape.

El procedimiento de funcionamiento de un vehículo FCEV es el siguiente:

1. El hidrógeno es almacenado en los tanques que abastecen la pila de combustible.
2. Se inyecta aire (oxígeno) a las celdas de combustible que conforman la pila.
3. La reacción del oxígeno del aire y el hidrógeno almacenado dentro de las celdas genera tanto electricidad como agua.
4. La electricidad producida alimenta la batería, la cual a su vez abastece al motor.
5. El agua sobrante se expulsa mediante el sistema de escape [21].

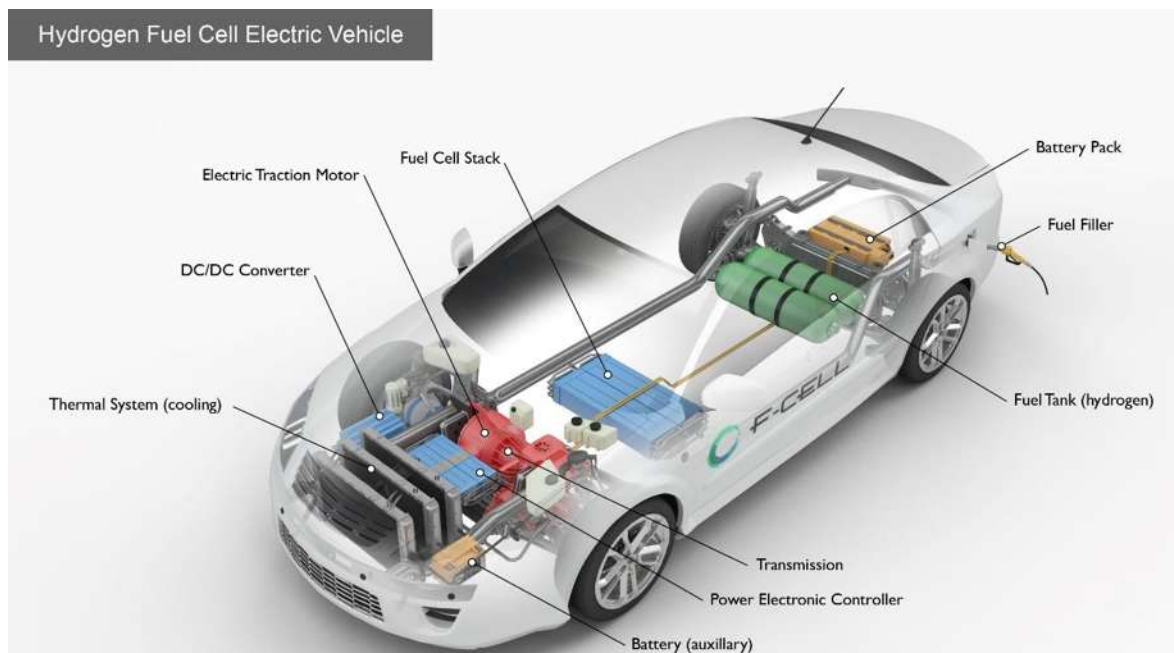


Figura 14. Características y componentes de un vehículo híbrido de celda de combustible FCEV, que emplea como combustible hidrógeno [20].

Ventajas de FCEV.

- Cero emisiones ya que solo libera vapor de agua.
- El hidrógeno es abundante en la tierra.
- Pueden cargar combustible en menos de 5 minutos [20].
- Autonomía de conducción de más de 300 millas (482.803 km) [17].
- Trabaja 100 % con el motor eléctrico el cual es más eficiente que un MCI.
- No es necesario utilizar baterías de alta capacidad, reduciendo así el peso del vehículo.
- No depende de combustibles fósiles en apariencia.
- Comparado con los MCI las eficiencias de las pilas PEM van de los 50% a 60%, por lo tanto, aprovechan más la energía.
- Mantenimiento económico.
- Incentivos gubernamentales.

Desventajas de FCEV.

- Infraestructura para recargar hidrógeno nula y con costos de instalación elevados.
- El hidrogeno es explosivo, además de que es un combustible, pero no es una fuente de energía
- Alto costo del sistema y combustible, para ser competitivo en el mercado, el costo de las celdas de combustible tendrá que disminuir sustancialmente sin comprometer el rendimiento.
- El contenido de energía del hidrógeno por volumen es bajo. Esto hace que almacenar hidrógeno sea un desafío porque requiere altas presiones, bajas temperaturas o procesos químicos para almacenarse de manera compacta.

-
- La producción del hidrógeno, sí generan emisiones. No podemos encontrar hidrógeno en la naturaleza listo para ser utilizado, el 96% del hidrógeno que se consume en el mundo se ha obtenido a partir de un combustible fósil, básicamente gas natural, por tanto, ni es renovable ni es cero emisiones [20].
 - Baja demanda en el mercado actual.

Ejemplos: Toyota Mirai y Hyundai Nexu [17].

3 Vehículo híbrido basado en MCI y pila PEM.

Se eligió para su estudio un sistema de vehículo híbrido, el cual consta de dos fuentes de potencia, un motor de combustión interna MCI (ICE por sus siglas en inglés) y además una pila PEM (FC por sus siglas en inglés). Para su propulsión se utiliza NH_3 amoníaco, como combustible el cual es separado mediante un procesos termo-químico llevado a cabo en la unidad de separadora de disociación (DSU) por sus siglas en inglés, en la cual se separan el H_2 hidrógeno del N_2 Nitrógeno, siendo el H_2 el combustible necesario para la pila PEM y también para el MCI junto con el amoníaco, con este se mejora el rendimiento general del sistema [12]. En la Figura 15, se muestra el sistema seleccionado para su estudio.

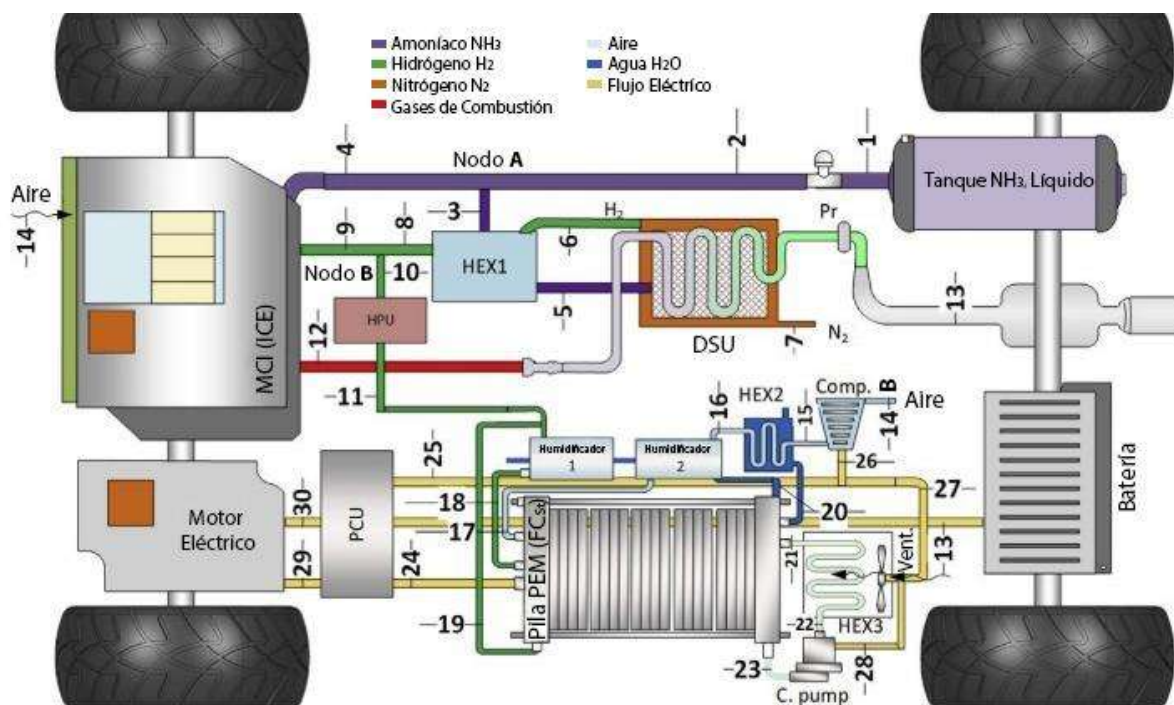


Figura 15. Sistema de vehículo híbrido impulsado por un MCI y una pila de combustible de hidrógeno PEM, obtenido a bordo a través de la unidad DSU que disocia el amoníaco del tanque de almacenamiento [22].

Además, el sistema cuenta con varios subsistemas auxiliares necesarios para el correcto funcionamiento general entre ellos se tienen: intercambiadores de calor para la recuperación de calor residual de las diversas corrientes, algunos filtros y purificadores, válvulas antirretorno para regular la presión, un tanque de almacenamiento de amoníaco, una batería para el sistema de arranque y para almacenar la energía generada de la pila PEM cuando el vehículo no requiera la potencia generada, además de un sistema de enfriamiento para la pila en el cual encontramos un compresor, un ventilador, una bomba de circulación del refrigerante, adicionalmente un motor eléctrico propio de los sistemas de propulsión que incorporara una pila de combustible. Así como tuberías y una unidad de control inteligente de los sistemas, a grandes rasgos esto es lo que conforma el sistema general.

Este es un sistema que produce su propio hidrógeno a bordo mediante procesos que se describen más adelante, siendo para ello necesario conocer y entender los procesos termo-

químicos que se realizan en el sistema, tales como la disociación o craqueo térmico del amoníaco para obtener dos productos como lo son N_2 y H_2 , esta reacción se lleva a cabo en la DSU, además los procesos de la celda de combustible los cuales también conllevan reacciones químicas teniendo como protagonistas el aire con su oxígeno y el hidrógeno para la producción de potencia y generar como residuos únicamente vapor de agua.

3.1 Sustancias y fluidos de trabajo, utilizadas en el sistema y subsistemas auxiliares.

Este sistema utiliza varias sustancias o fluidos requeridos para su funcionamiento, las cuales algunas ingresan al sistema y de esta manera se someten a algún proceso y otras son resultado de dichos procesos, es necesario conocer algunas características y propiedades físicas y químicas de dichos fluidos, para así se pueda llevar a cabo los cálculos de sus respectivas reacciones que se realizarán en el sistema. Todo lo visto aquí será descrito desde el punto de vista del sistema es decir con un enfoque adecuado al tema en cuestión. Entre los principales fluidos de trabajo tenemos los siguientes:

Amoníaco (NH_3).

El amoníaco, también conocido como NH_3 , es un gas incoloro con un olor característico compuesto de nitrógeno y átomos de hidrógeno [23]. El amoníaco es una sustancia formada a partir del hidrógeno, el elemento químico más abundante del universo, y el nitrógeno, el principal componente de la atmósfera terrestre (79%). Es interesante notar que el segundo componente principal de la atmósfera terrestre, el oxígeno (21%) en combinación con el hidrógeno forma agua. De manera similar al agua, el amoníaco juega un papel importante en el ecosistema global, representa una fuente de nitrógeno para todas las especies vivas.

Al mismo tiempo, el amoníaco puede desempeñar un papel importante en el desarrollo sostenible de la humanidad, ya que es una fuente de hidrógeno que contiene 1.5 mol de hidrógeno por mol de NH_3 a una densidad de hasta 106 kg H_2 / m³.

Propiedades físicas del amoníaco, [24]:

- Fórmula química: NH_3 .
- Masa molecular: 17.03 g/mol.
- Punto de ebullición: -33 °C.
- Punto de fusión: -78 °C.
- Densidad relativa del líquido (agua = 1g/ml): 0.68.
- Solubilidad en agua: Buena (34 g/100 ml a 20 °C).
- Presión de vapor (kPa a 26 °C): 1013.
- Límites de explosividad, (% en volumen en el aire): 15-28.
- Temperatura de autoignición: 651°C.
- Densidad relativa del gas (aire = 1 g/ml): 0.59.

Recientemente, se ha propuesto el amoníaco como fuente de hidrógeno porque el hidrógeno se puede generar a partir del amoníaco con un gasto energético relativamente bajo. Es decir, el amoníaco es un medio atractivo para almacenar hidrógeno a través de enlaces químicos.

El uso de amoníaco en aplicaciones de generación y conversión de energía presenta oportunidades únicas. El amoníaco puede desempeñar múltiples funciones simultáneamente: se puede usar como combustible, fuente de hidrógeno, fluido de trabajo, refrigerante y agente reductor de NO_x [25].

El amoníaco como combustible tiene la ventaja de ser libre de carbono y puede manipularse en la infraestructura existente. Los motores de combustión interna, tanto de encendido por chispa como de encendido por compresión, han sido probados con amoníaco como combustible, pero el amoníaco tiene sus desventajas como combustible, como lo son:

- Temperatura de autoignición muy alta (651 ° C).
- Baja velocidad de llama.
- Alto calor de vaporización.
- Límites de inflamabilidad estrechos (16-25% por volumen en aire).
- Tóxico.

El amoníaco se puede mezclar con otras sustancias para superar sus desventajas como combustible, tanto para motores de encendido por compresión (CI) como de encendido por chispa (SI). Los posibles combustibles que se pueden usar en los motores SI, además del amoníaco, son el hidrógeno y la gasolina, el (bio) diésel, entre otros [26]. En la Figura 16 se mencionan las formas en las que se puede inyectar el NH₃ a un MCI y una pila de combustible.

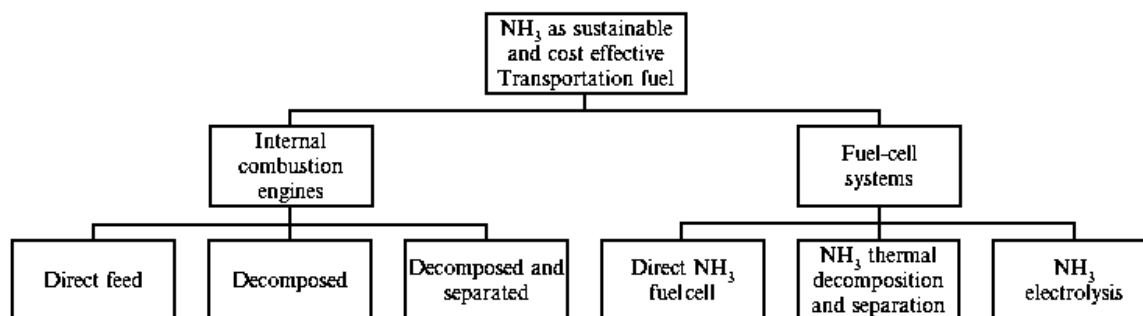


Figura 16. Usos del amoníaco en sistemas de potencia, y sus distintas formas de ingresar a estos, considerando el amoníaco como fuente de hidrógeno [25].

Hidrógeno (H₂).

El hidrógeno es el primer elemento de la tabla periódica. Es el elemento químico más ligero que existe, su átomo está formado por un protón y un electrón y es estable en forma de molécula diatómica (H₂). En condiciones normales se encuentra en estado gaseoso, y es insípido, incoloro e inodoro.

En la tierra es muy abundante, constituye aproximadamente el 75 % de la materia del universo, pero se encuentra combinado con otros elementos como el oxígeno formando moléculas de agua, o al carbono, formando compuestos orgánicos. Por tanto, no es un combustible que pueda tomarse directamente de la naturaleza, sino que es un vector energético (como la electricidad) y por ello se tiene que fabricar o producir.

Una de las aplicaciones más importantes del hidrógeno es su uso como almacenamiento de energía, éste es un punto clave para su introducción en el mercado y uno de los principales valor y ventaja que tiene como vector energético. El hidrógeno se caracteriza por tener una alta densidad energética por unidad de masa, pero su mayor problema es que ocupa mucho volumen. Con respecto a la energía, el hidrógeno puede ser utilizado como combustible para el transporte, y para generar electricidad mediante pilas de combustible. Un kilogramo de hidrógeno libera más energía que cualquier otro combustible (casi el triple de la gasolina o gas natural), y para liberar esa energía no emite dióxido de carbono, sólo vapor de agua, por lo que el impacto ambiental es nulo [27].

En cuanto a sus propiedades, el hidrógeno tiene un alto valor calórico, el menor peso molecular, la mayor conductividad térmica entre todos los gases y la menor viscosidad. Principalmente, el hidrógeno se almacena en forma de gas comprimido o como líquido criogénico. En cualquiera de estas condiciones de almacenamiento, el poder calorífico del hidrógeno por unidad de volumen es el más bajo de todos los combustibles convencionales, sin embargo, la eficiencia de los sistemas de generación de energía alimentados con hidrógeno es mucho mayor que la obtenida con el combustible convencional, y este hecho compensa el problema de la baja densidad de almacenamiento del hidrógeno.

La recuperación de calor se puede aplicar de manera intensiva a la combustión de hidrógeno para obtener agua líquida, que se puede reciclar para producir hidrógeno nuevamente a través de varios métodos para extraer hidrógeno del agua, incluida la electrólisis y la división termoquímica [25].

En el sistema aquí presentado, el hidrógeno se encuentra presente como combustible, y se obtiene del NH_3 mediante un proceso de craqueo térmico en la DSU para su combustión el MCI y así mejorar la combustión del amoníaco, y para su posterior envío hacia la pila de combustible PEM en donde igualmente se utiliza para producir energía de manera limpia, el exceso de H_2 se retorna a la entrada de la pila de combustible para su reutilización. En la Tabla 1 se muestran algunas propiedades del hidrógeno monoatómico H_2 .

Tabla 1. Algunas propiedades termo-físicas del hidrógeno [25].

Property	MP	BP	T_c	P_c	Flammability	IT	AFT	Flame velocity	LHV
Value	14.01 K	20.3 K	32.97	12.9 bar	4.1–75%	850 K	2,400 K	2.75 m/s	120 MJ/kg

MP melting point; *BP* normal boiling point; *IT* ignition temperature; *AFT* adiabatic flame temperature

Aire (Oxígeno O_2).

Comúnmente llamamos aire a la mezcla homogénea de gases atmosféricos que son retenidos por la gravedad de nuestro planeta. El aire es una mezcla gaseosa de suma importancia para la vida en la tierra, ya que cumple funciones de protección de los rayos solares y de otros elementos foráneos como los meteoritos. Además, brinda a la dinámica química del planeta un conjunto de elementos indispensables de naturaleza gaseosa, como el oxígeno necesario para la respiración. Además, el aire permite que se produzca el ciclo hidrológico, pues contiene vapor de agua, que produce las precipitaciones mediante la condensación y la formación de las nubes. El aire está compuesto por diversos elementos gaseosos, que

normalmente no pueden ser diferenciados ni percibidos por separado. El aire está compuesto principalmente por un 20.94 % de oxígeno, 78.08 % de nitrógeno, 0.93 % de argón, 0.035 % de dióxido de carbono y 0.40 % de vapor de agua, siendo estos sus componentes predominantes. Otros elementos presentes en el aire, aunque minoritariamente, son neón (0.0018 %), helio (0.0005 %), metano (0.00017 %), kriptón (0.00014 %), hidrógeno (0.00005 %) y amoníaco (0.0003 %) [28].

En este modelo se considera aire estándar y compuesto únicamente por O_2 y H_2 para su análisis, siendo este el que proporcionara el oxígeno O_2 necesario para la combustión en el MCI tanto para el amoníaco NH_3 y el hidrógeno respectivamente, así como el agente de oxidación en la pila PEM, donde igualmente proporcionara el oxígeno necesario para el proceso.

Además, se encuentra presente como parte del sistema de enfriamiento de la pila PEM donde por medio de un ventilador disipa calor producido por la misma pila.

Nitrógeno (N_2).

El nitrógeno es el mayor componente de nuestra atmósfera (78% en volumen, 75.5% en peso). Es un gas incoloro, inodoro y sin sabor, no tóxico y casi totalmente inerte. A presión atmosférica y temperatura menor a $-196\text{ }^{\circ}\text{C}$, es un líquido incoloro, un poco más liviano que el agua. Es un gas no inflamable y sin propiedades comburentes. Por su escasa actividad química, es usado como protección inerte contra contaminación atmosférica en muchas aplicaciones en que no se presentan altas temperaturas [29].

En el sistema el N_2 es únicamente un residuo del craqueo térmico del NH_3 amoníaco en la DSU y por lo tanto se desecha a la atmosfera, pero se podría emplear en algún otro proceso útil.

Agua (H_2O).

El agua es una sustancia líquida desprovista de olor, sabor y color, que existe en estado más o menos puro en la naturaleza y cubre un porcentaje importante (71 %) de la superficie del planeta Tierra. Además, es una sustancia bastante común en el sistema solar y el universo, aunque en forma de vapor (su forma gaseosa) o de hielo (su forma sólida). Una molécula de agua contiene únicamente dos elementos: un átomo de oxígeno y dos de hidrógeno (H_2O) enlazados covalentemente [30].

En el sistema el agua es parte de los productos de la combustión de la combustión de el amoníaco e hidrógeno respectivamente en el MCI; y además uno de los productos obtenidos en la pila de combustible PEM.

Etilenglicol ($C_2H_6O_2$).

El etilenglicol es un compuesto químico orgánico que pertenece al grupo de los dioles. Es un líquido transparente, incoloro, ligeramente espeso como el almíbar y leve sabor dulce. Se utiliza como anticongelante en los circuitos de refrigeración de motores de combustión interna, como difusor del calor, mezclado con agua para los procedimientos de deshielo y antihielo de los aviones comerciales, entre otros. Su punto de ebullición es de $197\text{ }^{\circ}\text{C}$ y su

punto de fusión de $-13\text{ }^{\circ}\text{C}$ [31]. En el sistema se utiliza como refrigerante para enfriar la pila de hidrogeno, en un pequeño ciclo de refrigeración.

Productos de combustión.

Formados en el motor de combustión MCI los cuales constan de vapor de agua y nitrógeno, y al suponerse una combustión completa e ideal, no hay residuos de amoníaco ni de hidrógeno en los gases de escape del MCI. Además, estos productos de combustión son reutilizados primeramente como fuente térmica para el proceso de separación térmica del amoniaco en la DSU, donde fungirán como activador térmico, para posteriormente pasar por un catalizador donde serán arrojados a la atmosfera sin causar mayor daño ambiental.

3.2 Componentes principales del sistema.

El vehículo híbrido del tipo MCI y pila PEM (Motor de Combustión interna y Pila de combustible PEM), del tipo híbrido total o combinado de acuerdo a sus condiciones de funcionamiento, consta principalmente de tres subsistemas principales para su funcionamiento dos de potencia y uno de producción y suministro del hidrógeno, en los cuales se centraran los análisis a realizar, aclarando que no por esto el resto de los componentes sean de menos o mayor importancia para el correcto funcionamiento del sistema.

A continuación, se detalla el funcionamiento de cada subsistema principal y sus componentes auxiliares, además se abordan las principales reacciones termo-químicas que se llevan a cabo en cada uno de estos.

3.2.1 Motor de combustión interna (MCI) usando NH_3 como combustible.

Este subsistema, está constituido por un motor de combustión interna especial, el cual está diseñado en fase beta para poder quemar en el amoníaco e hidrógeno mezclado con su respectivo flujo de aire, para la producción de potencia y la emisión de gases libres de CO_2 . Si bien hoy en día esta tecnología de MCI aún se encuentra en estado de pruebas dado las limitantes del amoníaco e hidrógeno como combustible y las complicaciones que estos ocasionan ya hay estudios realizados que demuestran que estos son factibles para su uso en vehículos como se mencionan en [32] y [33]. Según [26] hay dos tipos de motores de combustión para el amoníaco, estos se clasifican por el tipo de encendido de la mezcla, y son el CI (Compression-ignition engine) y el motor SI (Spark-ignition engine) por sus siglas en ingles.

El combustible se puede introducir en los cilindros de dos formas diferentes, es decir, por inyección en puerto (port-injection) o por inyección directa (direct-injection). El puerto de inyección desplaza el aire suministrado a la cámara de combustión y reduce así la eficiencia volumétrica del motor. La inyección directa reduce significativamente la temperatura en el cilindro debido al alto calor latente del amoníaco. La inyección de amoníaco líquido proporciona una mejor eficiencia volumétrica ya que no desplaza el aire y enfría la mezcla de admisión.

Una forma posible de mejorar la mezcla y, por lo tanto, facilitar la combustión del amoníaco es crear turbulencias en la cámara de combustión. Sin embargo, un remolino demasiado pequeño no tiene ningún efecto sobre la combustión, mientras que un remolino demasiado alto afecta negativamente a la combustión al apagar la llama debido a la lenta propagación de la llama de amoníaco. Otra forma de mejorar las desventajas del amoníaco como combustible es mezclándolo con otros combustibles como se verá más adelante. Se considera la utilización de un motor encendido por chispa es decir SI, de inyección por puertos y el NH_3 entrando en fase líquida para el modelo.

Motores de encendido por chispa SI (Spark-Ignition Engine).

Como este tipo de MCI su característica principal es que requiere de algún detonante o chispa para su funcionamiento, además de una unidad o dispositivo encargado de regular dicho encendido, estos MCI por lo general poseen bujías y una unidad PCU (unidad de control de potencia) (Power Control Unit) para controlar el orden de encendido. Hay distintos tipos de MCI encendidos por chispa, pero esta investigación se enfocará en el que es del tipo dual es decir que funciona a base de dos combustibles, a continuación, se hablara brevemente de este tipo de MCI centrados en el que utiliza amoníaco e hidrógeno como combustible que es lo que compete al sistema en cuestión.

Motor de combustión interna dual encendido por chispa (Ammonia dual-fuel).

Dadas las limitantes que presenta el amoníaco como combustible único, se requiere que este esté acompañado por otro combustible para formar una mezcla que al quemarse produzca el suficiente calor para el sistema, para este trabajo se tiene un MCI de SI que consume NH_3 y H_2 como combustibles y como comburente oxígeno tomado del aire.

El hidrógeno es capaz de disociarse a 400 °C y puede utilizarse como promotor de combustión con amoníaco como combustible. Un contenido de hidrógeno de 3-5% en peso es la cantidad mínima de hidrógeno que se puede utilizar como promotor de combustión. El amoníaco líquido reduciría la temperatura en el cilindro y por lo tanto obstaculizaría las turbulencias posteriores, lo que provocaría una combustión deteriorada y fallas de encendido. Por lo tanto, el amoníaco gaseoso se inyecta directamente, donde se inyecta gasolina en el puerto para mejorar la combustión (caso ideal). La mayoría de estos motores son de investigación cooperativa de combustibles CFR (Cooperative Fuel Research) por sus siglas en inglés, que se utilizan para determinar la tasa de cetano de los combustibles diésel. Este tipo de motores no se pueden comparar con los diseños de motores existentes aún [26].

En [32] se realizó el experimento en un motor de prueba, ahí se analizan motores de combustión interna alimentados con amoníaco que utiliza complejos de amina metálica como almacenamiento de amoníaco, así como el uso de mezclas de amoníaco con hidrógeno como combustible para motores SI. Ellos introdujeron amoníaco e hidrógeno en el colector de admisión de un motor CFR, y llevaron a cabo una serie de experimentos con diferentes proporciones de aire en exceso y diferentes proporciones de amoníaco a hidrógeno. Además, ellos demostraron que una mezcla de combustible con 10% en volumen de hidrógeno se comporta mejor con respecto a la eficiencia y la potencia. Finalmente ellos realizaron una comparación con gasolina, la cual mostró que las eficiencias y potencia aumentada debido a la posibilidad de una mayor relación de compresión. El análisis del sistema mostró que es posible cubrir la mayor parte del calor necesario utilizando el calor de escape.

Muchas de estas investigaciones han demostrado que el hidrógeno es un combustible adecuado para el motor de combustión interna encendido por chispa. Sin embargo, se han informado ampliamente sobre problemas con la combustión anormal, como el efecto contraproducente. Con amoníaco, el número de investigaciones es limitado, algunas investigaciones citadas en [32], muestran que es posible utilizar amoniaco como combustible para motores SI. Con la descomposición de una pequeña cantidad de amoniaco que equivale a un contenido de hidrógeno de aproximadamente el 1% en masa (aproximadamente el 8% en volumen), el rendimiento fue satisfactorio. Una ventaja del amoniaco y el hidrógeno es que no contienen carbono, eliminando las emisiones de óxidos de carbono del motor.

Todo lo anterior, relacionado con el MCI, se observa en la Figura 15, en el sistema se utiliza un motor dual a base de amoníaco con hidrógeno, en lo subsecuente se explicará el funcionamiento del MCI, y verán algunas ventajas de usar estos combustibles. A continuación, se muestra la Tabla 2, con datos de el amoniaco, comparándolos con la gasolina, entre los cuales podemos darnos una idea del uso estos como combustibles.

Tabla 2. Comparación de las características del amoníaco como combustible comparado con otros combustible comunes en su forma de almacenamiento en tanques en forma líquida [34].

Comparison of fuel properties.

Properties	Ammonia	Propane	Gasoline	Diesel fuel (No. 2)
Formula	NH ₃	C ₃ H ₈	–	–
Storage method	Liquid	Liquid	Liquid	Liquid
Approximate AKI octane rating	120	103	87–93	–
Cetane rating	–	–	–	40–55
Storage temp (°C)	25	25	25	25
Storage pressure (kPa)	1030	1020	101.3	101.3
Fuel liquid density (kg/m ³)	602.8	492.6	745	832
LHV (MJ/kg)	18.8	45.8	43.4	42.7
Latent heat of vaporization (kJ/kg)	1370	426.2	348.7	232.4
Ignition temperature (°C)	651	493–548	275	254–285
Ignition limit (Vol.%)	15.8–28	2.15–9.6	1.4–7.6	1–6

A grandes rasgos se observa en la Figura 17, como es el funcionamiento en general del MCI del sistema utilizado en [32], dado que el amoníaco se introduce al múltiple de admisión como gas para simplificar la configuración, se utilizaron como combustible hidrógeno presurizado y amoníaco.

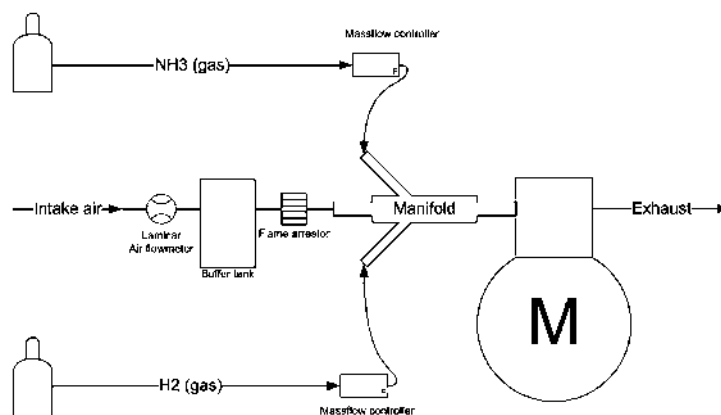


Figura 17. Diagrama del sistema de combustible de un motor de combustión interna MCI de encendido por chispa SI, el cual trabaja con amoníaco e hidrógeno como combustibles, además se muestra la entrada de aire al sistema, basado en el sistema experimental de [32].

El amoníaco se puede quemar directamente en los motores de CI, sin embargo, es necesario un promotor de combustión para apoyar la combustión. De hecho, el mejor promotor (y libre de carbono) es el hidrógeno, que tiene una velocidad de combustión muy alta y un amplio rango de inflamabilidad, mientras que la combustión del amoníaco se caracteriza por una baja velocidad y una baja temperatura de la llama, un estrecho rango de inflamabilidad y una alta energía de ignición.

En [33] se realizan pruebas de un motor de gasolina modificado para quemar amoníaco con hidrógeno, y sus resultados experimentales confirman que es necesario agregar hidrógeno a la mezcla aire-amoníaco para mejorar el encendido y aumentar la velocidad de combustión, con relaciones que dependen principalmente de la carga y menos de la velocidad del motor. Algunas investigaciones mencionadas en el anterior artículo proponen el hidrógeno como promotor, lo que demuestra que una pequeña cantidad, añadida a la mezcla de aire y amoníaco, es eficaz para acelerar la combustión (aproximadamente 1% de proporción de hidrógeno a amoníaco en masa, casi 8% en volumen, permite un funcionamiento satisfactorio del motor).

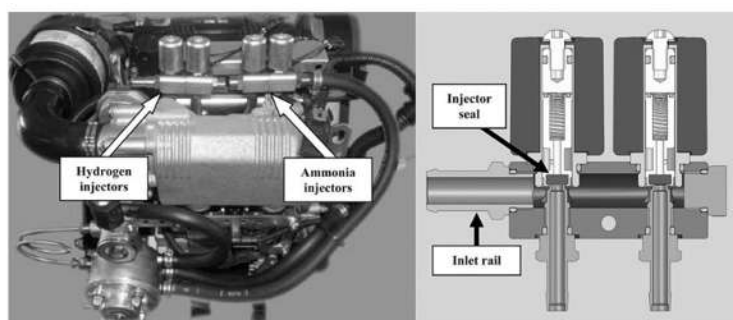


Figura 18. Motor de combustión interna experimental modelo Lombardini LGW 523 MPI, probado con amoníaco e hidrógeno, en él se aprecian los inyectores, utilizado para pruebas por [33].

3.2.2 Unidad separadora de disociación (DSU).

La descomposición del amoníaco es un proceso endotérmico que requiere la utilización de catalizadores, compuestos de una fase activa (un metal o combinación de metales tales como rutenio, cobalto, hierro, níquel, etc.) y un soporte en el que se deposita el metal. Estos catalizadores deben tener una elevada actividad a temperaturas moderadas y bajo costo [35].

La unidad DSU juega en el sistema, un interesante papel ya que es la encargada de llevar a cabo la reacción química de disociación del hidrógeno H_2 del nitrógeno N_2 , proveniente del amoníaco NH_3 , está es una forma de obtener hidrógeno a bordo del vehículo, a través de un proceso llamado craqueo térmico, donde se requiere una fuente de energía para lograr separar el enlace covalente de amoníaco que une al hidrógeno y al nitrógeno, para este sistema se aprovecha la energía contenida en los gases de escape, producto de la combustión en el MCI, obteniendo como producto el hidrógeno, que será posteriormente enviado a la pila PEM y generando como residuo únicamente nitrógeno que se expulsa a la atmosfera (caso ideal). Si bien hay más métodos de obtener hidrógeno por medio de estos catalizadores únicamente se describirá el que ocurre con un proceso de craqueo térmico.

Obtención de hidrógeno por medio de craqueo termo-catalítico.

El hidrógeno se puede extraer de una gran variedad de recursos materiales como agua, hidrocarburos fósiles, biomasa, sulfuro de hidrógeno, hidruros de boro y otros, tales como el NH_3 amoníaco que es el que se utilizará en el sistema. Para extraer y separar hidrógeno de tales recursos materiales, se necesita energía. Las formas de energía que pueden impulsar un proceso de producción de hidrógeno se pueden clasificar en cuatro categorías: térmica, eléctrica, fotónica y bioquímica. Estos tipos de energía se pueden obtener de la energía primaria (fósil, nuclear y renovable) o de la energía recuperada a través de varios caminos, en este sistema se utilizará la energía térmica de los gases de escape para activar la DSU [25]. El proceso que ocurre en la DSU, donde se descompone el NH_3 , es llamado craqueo termo-catalítico el cual utiliza energía térmica para romper la unión del nitrógeno con el hidrógeno, y así tener este último para su uso. A continuación, se describe a detalle el anterior proceso de funcionamiento de la DSU.

Descomposición termo-catalítica del NH_3 para la separación del H_2 .

La reacción de craqueo del amoníaco no necesita que la catálisis se lleve a cabo a altas temperaturas (por ejemplo, más de 1000 K); sin embargo, a temperaturas más bajas, la velocidad de reacción es demasiado baja para aplicaciones prácticas como la generación de hidrógeno para la conversión de energía. Sin embargo, a 400 °C, la conversión de equilibrio de NH_3 es muy alta al 99.1%, y a aproximadamente 430 °C, casi todo el amoníaco se convierte en hidrógeno en equilibrio, bajo condiciones de presión atmosférica. Existe una gran variedad de catalizadores aplicables a la descomposición del amoníaco (por ejemplo, Fe, Ni, Pt, Ir, Pd y Rh), pero el rutenio (Ru) parece ser el mejor cuando se apoya en nanotubos de carbono, generando hidrógeno a más de 60 kW de potencia equivalente por kilogramo de catalizador. En catalizadores de rutenio, a temperaturas inferiores a 300 °C, la recombinación de átomos de nitrógeno limita la velocidad, mientras que, a temperaturas superiores a 550 °C, la ruptura del enlace N-H del amoníaco es limitante. Sin embargo, la energía de activación es mayor a temperaturas más bajas (180 kJ/mol) y menor a temperaturas más altas (21 kJ/mol) [25].

El mejor rango de temperatura para la descomposición del amoníaco sobre los catalizadores de rutenio puede ser de 350 °C a 525 °C, lo que sugiere que los gases de combustión de los MCI de hidrógeno u otros gases de escape calientes de los procesos de combustión o la conversión de energía electroquímica en celdas de combustible de alta temperatura pueden usarse para impulsar la descomposición del amoníaco [25].

La Figura 19 presenta tres posibles configuraciones de reactor para la descomposición del amoníaco. Los productos directos de descomposición consisten en hidrógeno y nitrógeno y trazas de amoníaco sin reaccionar. Para la generación de hidrógeno puro, la tecnología de membranas se puede aplicar en el mismo reactor o por separado.

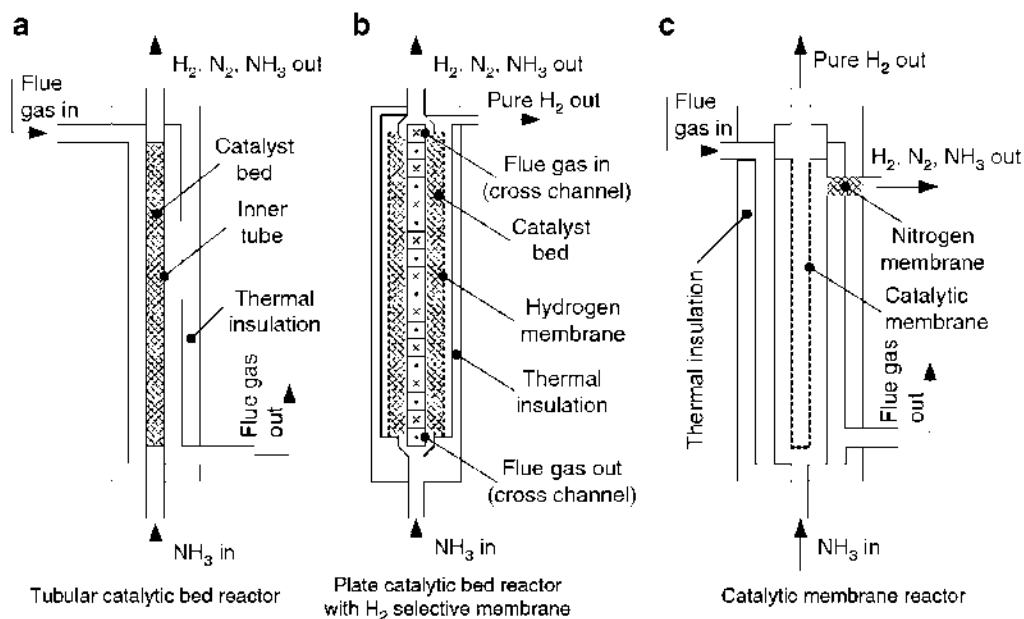


Figura 19. Tipos de DSU (catalizadores) para la descomposición termo-catalítica del amoníaco [25].

El reactor de la Figura 19a, consiste en un tubo simple (que se puede enrollar) que se llena con el lecho catalítico y se calienta desde el exterior con gases de combustión. La reacción ocurre en la superficie y no puede ir más allá de la conversión de equilibrio químico a la temperatura de operación, en este los residuos de amoníaco no son separados del hidrógeno de salida.

La Figura 19b, representa la construcción de un reactor catalítico tipo placa con membrana selectiva de hidrógeno integrada. El reactor se calienta con gases de combustión que circulan en flujo cruzado con las corrientes de productos reactivos. El amoníaco se alimenta por la parte inferior y pasa sobre el lecho catalítico donde ocurre la reacción de disociación. El lecho catalítico está rodeado por una membrana selectiva de hidrógeno que solo permite que pase hidrógeno puro. Las membranas a base de paladio son las más eficientes conocidas para la separación de hidrógeno. El reactor produce una corriente pura de hidrógeno y una corriente de residuos, que contienen principalmente nitrógeno y trazas de hidrógeno y amoníaco.

El tercer reactor de descomposición, que se muestra en la Figura 19c, comprende una membrana catalítica. Los catalizadores utilizados de este tipo se basan en Ni (níquel) sobre un soporte de alúmina [25].

En el caso del sistema de este trabajo se tiene un catalizador DSU del tipo c, en el cual el amoníaco es craqueado térmicamente, con la utilización de los productos de la combustión del MCI como fuente de energía térmica para provocar la reacción necesaria para obtener hidrógeno, que será posteriormente enviado al sistema de pila PEM, y de igual manera se coloca un filtro HUP (Unidad de purificación de hidrógeno), para asegurar que está corriente no contamine las celdas de la pila. En el sistema se considera un caso ideal, es decir que los productos de salida de la DSU son únicamente nitrógeno y no habrá en ellos H_2 ni tampoco residuos de amoníaco NH_3 .

3.2.3 Pilas de combustible.

Una pila de combustible es un dispositivo que lleva a cabo la reacción electroquímica entre el hidrógeno y el oxígeno para producir agua y generar electricidad, estas pueden utilizar combustibles como el hidrógeno, u otros en algunas configuraciones especiales. La aplicación principal de estos dispositivos es la generación de energía sostenible. La estructura básica de una pila de combustible, consta de un baño de electrolítico y dos electrodos, uno llamado ánodo y el otro cátodo, esto se representa en la Figura 20. Actualmente se encuentran disponibles varios tipos de pilas de combustible con electrolitos líquidos y sólidos.

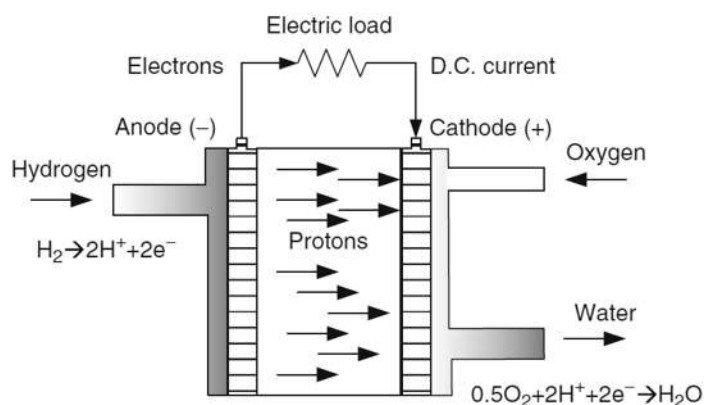


Figura 20. Componentes básicos de una celda de combustible, operada con hidrógeno [25].

Una pila de combustible está formada por un número determinado de celdas colocadas en un patrón o arreglo determinado, las cuales producen un voltaje de salida individual que se suma a la salida de la pila para obtener su voltaje de salida total. A continuación, se describe a grandes rasgos su funcionamiento y posteriormente se menciona una clasificación de estos dispositivos, dado que en el sistema utiliza hidrógeno H_2 como combustible a partir de este punto se centrará la atención en este tipo de celdas.

Funcionamiento y reacciones termo-químicas de una celda de combustible de H_2 .

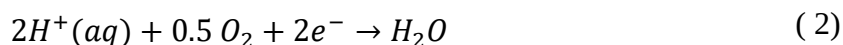
El hidrógeno se suministra en el ánodo de la celda de combustible, donde entra en contacto con un electrodo de medio poroso que es permeable a los protones y tiene una carga positiva.

Debido a la carga positiva del electrodo, los electrones de valencia de la molécula de hidrógeno se dislocan, y así la molécula se rompe, formando dos protones, según la siguiente reacción anódica:



El electrodo se descarga continuamente electrones por un circuito externo que establece una corriente a través de la carga eléctrica. Dado que los electrones fluyen del ánodo al cátodo, como se muestra en la Figura 20, para el circuito exterior, el ánodo es el electrodo negativo y el cátodo es el positivo.

Los protones que atraviesan el ánodo poroso son sumergidos en una solución electrolítica sometida a un campo eléctrico que los impulsa desde el ánodo al cátodo. Los protones penetran a través del cátodo, el cual al tener una carga positiva permite la reacción más compleja de formación de agua. Durante este proceso, la molécula de oxígeno que se alimenta a través del flujo oxidante en el lado del cátodo recibe electrones adicionales que interfieren con sus electrones de valencia; en consecuencia, la molécula de oxígeno se separa y cada uno de los iones resultantes puede reaccionar con dos protones y formar dos moléculas de agua; la reacción catódica se puede escribir de la siguiente manera:



La reacción anterior genera energía en forma de calor y electricidad [25].

Tipos de celdas y su clasificación general.

Los principales tipos de celdas de combustible se clasifican como en la Figura 21 y comprenden tres categorías principales según el nivel de temperatura de funcionamiento: celdas de combustible de temperatura baja, intermedia y alta. Otra forma de categorizar las celdas de combustible es por la naturaleza de los iones que atraviesan el electrolito. Hay dos posibilidades: los protones (H^+) o los iones de oxígeno (O_2) migran de un electrodo al otro. A continuación, se muestra en la Figura 21, la clasificación de las celdas de combustible de acuerdo a su temperatura de operación, su tipo de electrolito y algunas condiciones de operación.

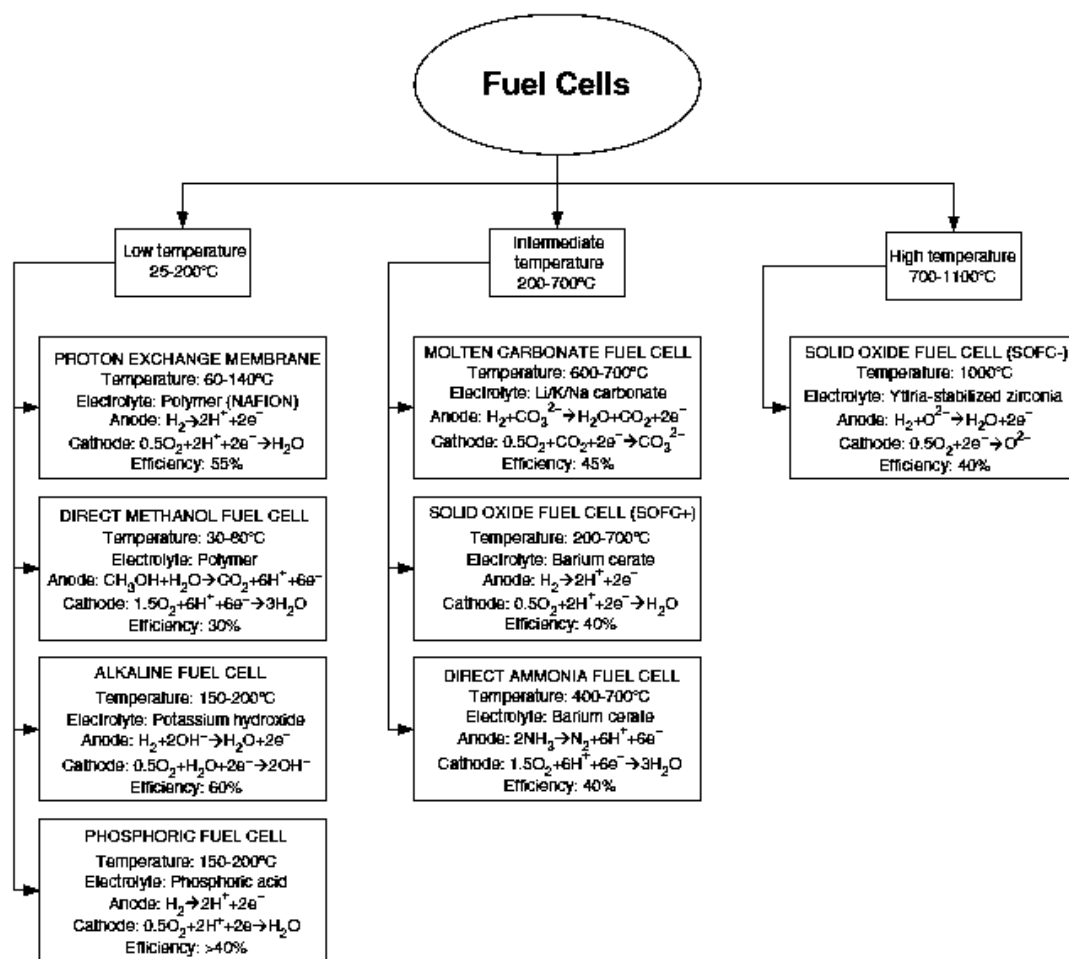


Figura 21. Clasificación general de las celdas de combustible FC [25].

La celda de combustible de membrana de intercambio de protones (PEM) es el sistema de generación de energía de baja capacidad y de vehículos más utilizado y por tanto el que se ha seleccionado para el sistema.

Pila de combustible de membrana de intercambio de protones PEMFC (Proton exchange membrane fuel cell).

La celda de combustible de membrana de intercambio de protones (PEM) consta de un cátodo, un ánodo y una membrana de electrolito. El hidrógeno se oxida en el ánodo y el oxígeno se reduce en el cátodo. Los protones se transportan desde el ánodo al cátodo a través de la membrana del electrolito y los electrones se transportan a través de una carga de circuito externo. En el cátodo, el oxígeno reacciona con protones y electrones produciendo calor y formando agua como subproducto.

Tiene un electrolito de membrana de polímero sólido de un material, conocido como Nafion. Un sistema de pila basado en PEM, incluye varios equipos auxiliares como lo son: un compresor de aire, intercambiadores de calor y un subsistema de gestión de agua bastante grande y complicado [36]. Estos sistemas están compuestos por muchas pequeñas celdas, también llamadas monoceldas que se apilan en un patrón designado para formar una pila de

combustible (Stack). Aunque los sistemas PEM tienen una pila relativamente compacta, son bastante voluminosos y, además, su costo es alto porque incluyen catalizadores metálicos costosos (platino) en los electrodos y su vida útil es relativamente corta. En las pilas PEM trabajando con hidrógeno son su moléculas de H_2 las que posee la carga positiva y que viajan a través de la membrana de electrolito [37].

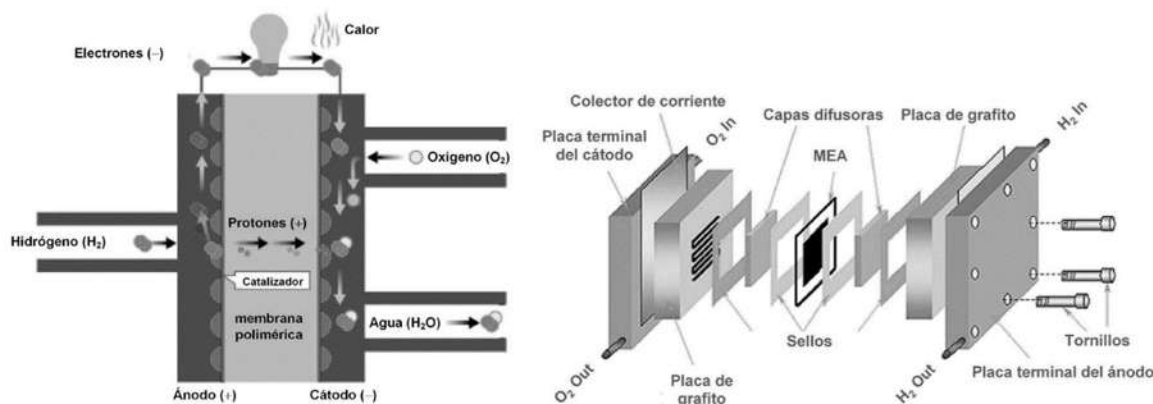


Figura 22. Descripción de funcionamiento de una PEMFC operada con hidrógeno en el lado izquierdo. En la figura del lado derecho se muestran los elementos que componen una monocelda de una pila de tipo PEM [37].

3.3 Componentes auxiliares del sistema.

Además de los 3 principales subsistemas se tienen algunos componentes adicionales para garantizar el buen funcionamiento de los subsistemas y del sistema en general, como son los que se mencionan a continuación.

Tanque de almacenamiento de amoníaco líquido.

Una solución prometedora es almacenar hidrógeno en forma de amoníaco, es en su forma líquida a aproximadamente entre 9 y 17 bar y a una temperatura ambiente [26] y, por lo tanto, involucra volúmenes relativamente pequeños y requiere tanques livianos y de bajo costo.

Válvula antirretorno al tanque Pr.

Esta es colocada a la salida del tanque de dónde va el amoníaco, y cumple básicamente dos funciones que son: la de provocar una caída de presión en el amoníaco líquido del tanque y la de evitar que el amoníaco retorne al tanque.

Intercambiador de calor número 1 HEX 1.

La función de este es la disminuir la temperatura de la corriente de hidrógeno que sale del DSU hacia el MCI, cediendo esta corriente su calor al amoníaco que entrara a la DSU proveniente de la línea principal de la salida de la válvula antirretorno del tanque.

HPU (unidad purificadora de hidrógeno).

Esta está ubicada a la salida del intercambiador de calor 1, en la corriente que lleva el hidrógeno y su función es la de garantizar que el hidrógeno que va hacia la pila PEM llegue

limpio de impurezas de amoníaco, nitrógeno o cualquier otra que no se haya expulsado en la DSU.

Tubo de Escape.

Su función es la de circular los gases de escape producidos en el MCI, una vez que estos pasaron por el DSU y arrojarlos a la atmosfera, sin olvidar que estos productos son única e idealmente agua y nitrógeno. Estos últimos se podrían usar en otras funciones del vehículo, pero eso está fuera de los alcances de esta investigación.

Humidificador 1 y 2.

El humidificador 1 proporciona humedad al aire de entrada a la pila PEM, mientras que el humidificador 2 proporciona humedad a el hidrógeno para una mejor refrigeración en la pila, el agua que se inyecta se puede obtener de la salida de la pila de hidrógeno, o bien puede ser suministrada aparte. No serán considerados para este modelo.

Compresor de aire.

En el ingresa aire atmosférico, el cual aumenta su presión para posteriormente este aire ser circulado por el intercambiador de calor número 2.

Intercambiador de calor 2 HEX 2.

Se encuentra ubicado a un costado de la celda de hidrógeno, por el circula la corriente de agua que sale de la pila PEM, esta transfiere su energía térmica al flujo de aire que entrara al humidificador número 2.

Sistema de enfriamiento de la pila de combustible PEM.

Como se menciona en el punto donde se analiza la pila PEM está genera calor por lo cual requiere un sistema de enfriamiento que garantice el buen funcionamiento del sistema, este opera con etilenglicol y consta de los siguientes componentes:

Bomba de circulación del refrigerante de la pila de hidrógeno.

Esta se encarga de recircular el refrigerante a través del cuerpo de la pila PEM, para evitar que esta falle, toma su potencia de la energía que se produce en la pila.

Intercambiador de calor 3 o condensador del refrigerante.

Su función es la de disipar el calor del refrigerante, para desechar este al aire atmosférico y así poderlo recircular por el sistema de la pila. Es auxiliado por un ventilador y se puede considerar un radiador.

Componentes eléctricos y electrónicos.

El sistema consta de varios componentes que consumen un flujo eléctrico, algunos auxiliares en el enfriamiento de la pila PEM, otros convertidores de energía, y algunos de inteligencia y control del vehículo. A continuación, describiremos estos componentes.

Batería.

Almacena energía de la pila de hidrógeno, además proporciona la energía suficiente para arrancar el sistema al inicio del ciclo.

Ventilador.

Proporciona un flujo de aire al intercambiador de calor 3, a manera de flujo cruzado para disipar el calor del refrigerante, funciona con energía proporcionada por la pila.

Unidad de control de potencia (PCU).

La unidad de control de potencia (PCU) por sus siglas en inglés, es usada en vehículos eléctricos e híbridos. Esta PCU consta de tres componentes: un inversor para alimentar el motor, un convertidor elevador para aumentar el voltaje y un convertidor DC-DC para reducir el voltaje. Durante la aceleración, la PCU convierte la energía eléctrica de una batería de CC a CA y luego suministra energía al motor. Durante la desaceleración, convierte la energía eléctrica de CA a CC para recuperar la energía eléctrica regenerada [38].

Motor eléctrico.

Este convierte la energía eléctrica entregada por la pila de combustible PEM en energía mecánica para la propulsión del vehículo.

3.4 Descripción general del funcionamiento del sistema.

El sistema que se muestra en la Figura 15 consiste básicamente en un subsistema de MCI, la DSU para separar el amoníaco en sus componentes de H_2 y N_2 , y un subsistema de pila PEM, auxiliados todos por una batería para iniciar el funcionamiento del MCI. La energía producida por el MCI y la pila PEM se utilizará para propulsar el vehículo; ambas fuentes de alimentación proporcionarán al vehículo una potencia de salida máxima de 118 kW en el caso del MCI y 99 kW en el caso de la pila PEM, funcionando bajo ciertas condiciones. Tanto el motor de combustión interna como el motor eléctrico están conectados al eje motriz delantero a través de un tren de engranajes. Un sistema de pila de combustible PEM se híbrida con el MCI y funciona utilizando el hidrógeno producido por la DSU.

Para mejorar las características del proceso de combustión y el rendimiento del MCI de amoníaco, una parte del hidrógeno que se produce a partir del DSU se suministra al MCI con una relación másica de hidrógeno a amoníaco del 1%. El suministro de hidrógeno contaminado con amoníaco para el sistema pila PEM podría provocar un deterioro en el rendimiento propio de la pila. Por lo tanto, es necesario colocar una unidad de purificación (HPU) entre la DSU y la entrada del humidificador 1 para separar y eliminar el amoníaco del vapor de hidrógeno suministrada al sistema de pila de combustible. Cualquier exceso de hidrógeno de la pila PEM, se volverá a circular hacia la compuerta del humidificador 1 o a la entrada del ánodo si esta se considera seca.

El aire se suministrará a la pila PEM a través del estado 14B, luego el aire se presuriza y humidifica utilizando el compresor y el humidificador 2, respectivamente como se muestra en la Figura 15, y el Intercambiador de calor 2 es colocado después del compresor para

disminuir la temperatura de salida del aire presurizado. La reacción dentro de la pila de PEM es exotérmica es decir que desprende calor, por lo tanto, es necesario instalar un ciclo de refrigerante para eliminar cualquier exceso de calor de la pila PEM y evitar que esta se dañe en su funcionamiento. La electricidad generada por la pila PEM se utilizará para alimentar el vehículo a través del motor eléctrico y para alimentar los componentes auxiliares del subsistema, como lo son: el compresor de aire, la bomba de circulación y el ventilador de la pila. En este sistema, la pila PEM opera utilizando el hidrógeno producido a bordo del vehículo sin la necesidad de la existencia de ninguna infraestructura de repostaje de hidrógeno [12].

Básicamente lo anterior describe el funcionamiento general del sistema de vehículo híbrido de MCI y Pila PEM a base amoníaco NH_3 , más adelante en el modelo se describen más detalles del sistema, así como de cada corriente y estado termodinámico que lo componen.

4 Modelo energético del vehículo híbrido MCI-pila PEM.

4.1 Desarrollo del modelo.

Una vez descritos los funcionamientos de los principales componentes que constituyen el sistema se procederá a la validación del modelo, para esto se realizará un análisis termodinámico del modelo en base a la primera y segunda ley de la termodinámica, así como de los principios de la disponibilidad de la energía, es decir la exergía.

Se realizará el cálculo de propiedades del sistema, así como de los flujos molares, de masa, energía y exergía de las corrientes del sistema. El modelado del sistema se llevará a cabo en el software EES (Engineering Equation Solver), para facilitar el cálculo de propiedades y la resolución de las ecuaciones del sistema. Los cálculos se llevaron a cabo en el modelo de este trabajo en el orden que aparecen en este capítulo.

Finalmente se comparan los resultados con [12] para tener un modelo validado, y realizar los posteriores cálculos y estudios correspondientes a los objetivos de esta investigación.

4.1.1 Ecuaciones generales que gobiernan el sistema.

Balances molares y de masa del sistema (flujo estacionario).

Durante un proceso de flujo estacionario, la cantidad total de masa contenida dentro de un volumen de control no cambia con el tiempo ($m_{VC} = \text{constante}$). Entonces el principio de conservación de la masa requiere que la cantidad total de masa que entra a un volumen de control sea igual a la cantidad total de masa que sale del mismo. Cuando se trata de procesos de flujo estacionario, el interés no se centra en la cantidad de masa que entra o sale de un dispositivo con el tiempo, pero sí se está interesado en la cantidad de masa que fluye por unidad de tiempo, es decir, el flujo másico $\dot{m}$. El principio de conservación de la masa para un sistema general de flujo estacionario con entradas y salidas múltiples se puede expresar en forma de tasa como:

$$\sum_{\text{Entrada}} \dot{m} = \sum_{\text{Salida}} \dot{m} \quad (3)$$

La que expresa que la tasa total de masa que entra a un volumen de control es igual a la tasa total de masa que sale del mismo [39]. Todos los balances de masa del sistema se realizan en estado estacionario, y expresado en kg/s por conveniencia.

Análogamente se determinarán los flujos molares por minuto y segundo respectivamente, en los estados donde esto aplica, utilizando la siguiente ecuación:

$$\dot{N} = \frac{\dot{m}}{P_m} \quad (4)$$

Donde:

$\dot{N}$ = Flujo molar expresado en mol/min. (Por conveniencia de unidades más sencillas numéricamente, pero empleado en cálculos con unidades de kmol/s).

Pm = Peso molecular de la corriente en cuestión en kg/kmol.

Balance de energía.

Para esta parte se hace uso de la primera ley de la termodinámica, aplicada a volúmenes de control en estado estable, la cual es simplemente una expresión del principio de la conservación de la energía y afirma que la energía es una propiedad termodinámica [39]. La primera ley de la termodinámica es en esencia una expresión del principio de conservación de la energía, conocida también como balance de energía. Los balances generales de masa y energía para cualquier sistema que experimenta cualquier proceso se pueden expresar en forma de tasa como:

$$\dot{E}_{entrada} - \dot{E}_{salida} = \frac{dE_{sistema}}{dt} \quad (5)$$

Donde:

$\dot{E}_{entrada} - \dot{E}_{salida}$ = Transferencia neta de energía por calor, trabajo y masa.

$\frac{dE_{sistema}}{dt}$ = Tasa de cambio en las energías interna, cinética y potencial, etc.

Balance de entropía y entropía generada (segunda ley).

La tasa de destrucción de entropía generada denotada por S_{gen} se puede determinar de un balance de entropía como sigue:

$$\sum \dot{m}_{in} s_{in} + \sum \frac{\dot{Q}_{vc}}{T} + \dot{S}_{gen} = \sum \dot{m}_{out} s_{out} \quad (6)$$

Exergía de Flujo y Balance de Exergía.

La exergía (también llamada disponibilidad), se define como el trabajo útil máximo que puede obtenerse del sistema en un estado y un ambiente especificados, en esta parte se debe considerar el trabajo reversible que es el trabajo útil máximo que puede obtenerse cuando un sistema experimenta un proceso entre dos estados especificados, así como la irreversibilidad (también llamada destrucción de exergía o trabajo perdido), que es el potencial de trabajo desperdiciado durante un proceso como resultado de irreversibilidades, y se define una eficiencia según la segunda ley, para poder determinar estas irreversibilidades utilizaremos el balance de exergía [39]. Las ecuaciones necesarias para la determinación de los conceptos de exergía son las siguientes:

La exergía total específica de flujo se expresa utilizando la siguiente ecuación:

$$ex_{flujo} = ex^{ph} + ex^{ch} + ex^{ke} + ex^{pe} \quad (7)$$

La exergía física de una corriente se puede escribir de la siguiente manera:

$$ex^{ph} = (h - h_0) - T_0(s - s_0) \quad (8)$$

La exergía química para algunas mezclas de gases, se expresa por:

$$ex_{mix}^{ch} = \sum y_i ex_i^{ch} + RT_0 \sum y_i \ln y_i \quad (9)$$

En el modelado del sistema solo será tomada en cuenta la parte de la exergía física de flujo de las diversas corrientes, la exergía química no se considera, ni tampoco las exergías potencial y cinética, salvo en las partes donde sea necesario su cuantificación.

Para determinar la exergía destruida por los componentes del sistema se tiene la siguiente ecuación, llamada balance de exergía:

$$\sum \dot{Ex}_{flow,in} - \sum \dot{Ex}_{flow,out} = \sum \dot{m}_{in} ex_{in} - \sum \dot{m}_{out} ex_{out} \quad (10)$$

La tasa de destrucción de exergía de los componentes puede determinarse de:

$$\dot{Ex}_{dest} = T_0 \dot{S}_{gen} \quad (11)$$

Destrucción de exergía térmica de los equipos:

$$\dot{Ex}_Q = \left(1 - \frac{T_0}{T_i}\right) \dot{Q} \quad (12)$$

4.1.2 Modelado del subsistema 1: Tanque de NH₃, MCI, DSU y equipos complementarios.

Para simplificar el análisis del sistema de vehículo híbrido se propone analizar este en dos partes, la primera que abarca desde el tanque de almacenamiento del amoníaco hasta el filtro purificador de hidrógeno HUP, mientras que la segunda parte que se propone analizar es la que concierne de la salida del HUP, hasta la salida de la pila de combustible PEM. En la primera parte del modelo se incluye el tanque de NH₃, el subsistema de MCI, y la parte encargada de la producción del hidrógeno es decir la que incluye la unidad de disociación de amoníaco DSU y sus componentes y equipos secundarios asociados a estos subsistemas, como se muestra en la Figura 23.

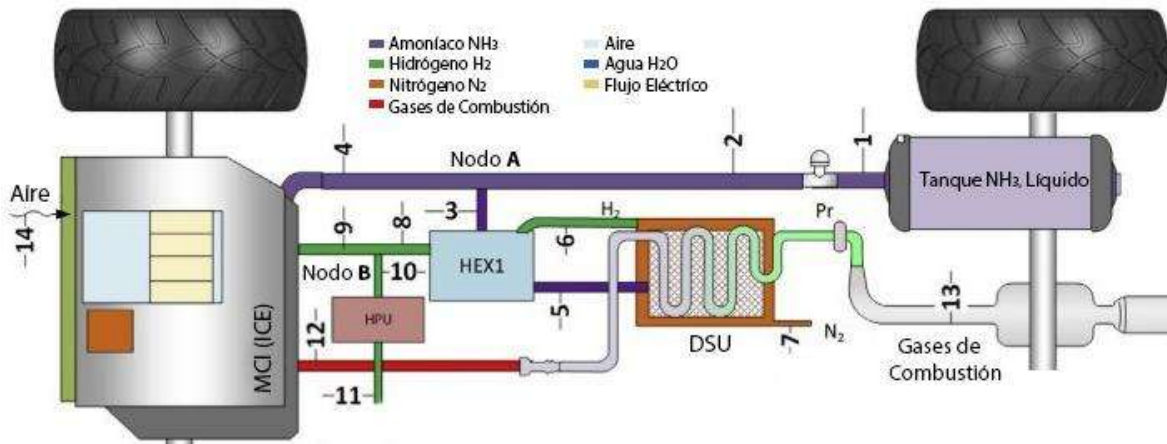


Figura 23. Primera parte del modelo: tanque, MCI, DSU y componentes auxiliares.

En esta parte se plantearán las ecuaciones que gobiernan el sistema, en el orden en el cual son modeladas en el software EES. Algunos parámetros que se calculan, son requeridos posteriormente para calcular otros, por lo cual se trata de seguir un orden sistemático en el desarrollo del modelo.

Mientras que, en la segunda parte, principalmente se analiza lo que concierne a la pila PEM y sus respectivos componentes auxiliares, para así posteriormente proceder a unir ambos submodelos y formar el sistema general que describa en su casi totalidad al vehículo híbrido de esta investigación.

Consideraciones y suposiciones para el modelado del sistema primera parte.

Se realizan las siguientes suposiciones para el modelado y la evaluación del sistema:

- La temperatura de referencia T_0 se considera 298 K y el valor de la presión de referencia P_0 se considera 101.325 kPa.
- En la primera parte del modelo a bajas temperaturas el amoníaco se modela como sustancia pura.
- Los gases del sistema se modelan como gases ideales.
- Se asume que cualquier cambio en la energía y exergía cinética y potencial son cero.
- No se considera reducción de presión en el modelo, excepto las caídas de presión debido a los reguladores de presión.
- La potencia máxima del MCI es de 118 kW, operando a ciertas condiciones de flujo [40].
- La temperatura de operación de la DSU será la que tengan las corrientes de las especies disociadas dentro de ella.
- Solo se considera la exergía física para las corrientes del sistema, donde aplica.
- La combustión se produce por completo, y sus productos incluyen agua en forma de vapor.

Datos de entrada para el modelado del sistema (primera parte).

A continuación, se presentan en la Tabla 3, los parámetros utilizados en el modelado y validación del sistema de vehículo híbrido, en la parte que concierne al MCI y sus

componentes auxiliares y del sistema encargado de la producción de hidrógeno DSU, en la parte superior de la tabla se muestran las referencias de los datos mostrados.

Tabla 3. Parámetros termodinámicos, utilizados para el modelado de la primera parte del sistema, que incluye tanque, MCI, DSU, y HUP, estados del 1 al 14, tomados de las referencias [12], [22], [25], [41].

Parámetro	Valor	Unidad
Flujo molar de NH_3 suministrado al sistema, N_1 .	70	mol/min
Flujo molar de H_2 producido, N_6 .	6.246	mol/min
Flujo molar de H_2 inyectado al MCI, N_9 .	3.32	mol/min
Peso molecular de H_2O , $P_{\text{mH}_2\text{O}}$.	18.02	kg/kmol
Peso molecular de nitrógeno, P_{mN_2} .	28.01	kg/kmol
Potencia de MCI, W_{ICE} .	118	kW
Temperatura de referencia de fluidos, T .	0	$^{\circ}\text{C}$
Presión de referencia, P_0 .	101.325	kPa
Temperatura de referencia, T_0 .	25	$^{\circ}\text{C}$
Presión del tanque, P_1 .	17	bar
Temperatura del NH_3 en tanque, T_1 .	20	$^{\circ}\text{C}$
Presión de operación del MCI, P_4 .	2.5	bar
Temperatura de salida de H_2 de DSU, T_6 .	600	$^{\circ}\text{C}$
Temperatura de los gases salida del MCI, T_{12} .	900	$^{\circ}\text{C}$
Relación hidrógeno-amoniaco de MCI, $\dot{m}_9/\dot{m}_4$	1	%
Efectividad de intercambiador de calor 1, ε .	80	%
Temperatura de operación de DSU, T_{DSU} .	600	$^{\circ}\text{C}$
Presión de operación de la pila PEM, P_{11} .	2	bar
Temperatura de salida de N_2 de DSU, T_7 .	600	$^{\circ}\text{C}$

Con estos datos de entrada, se procede a analizar el subsistema 1, como se mencionó anteriormente tratándolo en dos partes. Se determinan las propiedades termodinámicas de los estados con los que se cuentan con datos de entrada suficientes. Se calcularán los parámetros de Presión, Temperatura, Entalpía y Entropía. Mediante estos datos y realizando este análisis se pueden determinar las propiedades de los estados del 1 al 7. Existen un par de corrientes en el sistema, las cuales se les dará un trato especial, ya que por su naturaleza no puede ser llamadas directamente de EES (debido a su punto de referencia de temperatura, y a que son una mezcla de gases), estas son las corrientes 12 y 13, las cuales son los gases de escape del MCI y DSU respectivamente, y como se mencionó en capítulos anteriores estas están compuestas de agua y nitrógeno, y pueden ser modeladas como una mezcla de gases no reactiva, una vez que se produce la combustión en el MCI (ver apéndice A y B).

Balance de energía de la válvula Pr.

Para poder determinar las propiedades del estado 2, es necesario realizar el análisis de la válvula reguladora del tanque y para esto, se considerará esta como adiabática y que no realiza ningún trabajo, y además se desprecia su energía cinética y potencial, por lo que se tiene que en estado estable:

$$h_1 = h_2 \quad (13)$$

Donde:

h_1 = Entalpía de NH_3 , de la corriente 1, expresada en kJ/kg.

h_2 = Entalpía de NH_3 , de la corriente 2, expresada en kJ/kg.

De la ecuación 13 se conoce h_2 .

Modelado de las corrientes 12 y 13 tratados como mezclas no reactivas (gases de combustión del MCI).

Como se planteó anteriormente estos gases están compuestos por vapor de agua y nitrógeno, que son los productos de la combustión del amoníaco y el hidrógeno con el aire que aporta el oxígeno. Se supondrá que los gases de escape de ambas combustiones son una misma corriente denominada 12 que sale del MCI con alta energía térmica y se dirigen hacia la DSU para aportar el calor necesario para la reacción química de separación del amoníaco en H_2 y N_2 . Para finalmente abandonar el sistema en el estado 13, a continuación, se muestran las ecuaciones estequiométricas del MCI, tomadas de [12].

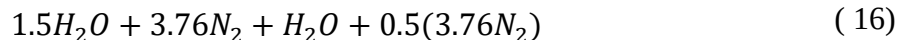
Para la combustión del amoníaco, se tienen los siguientes productos:



Para la combustión del hidrógeno, se tienen los siguientes productos:



Bajo la suposición de que estos productos escapan juntos hacia el DSU en una sola corriente, se tiene que:



Para poder modelar y determinar las propiedades termodinámicas de las corrientes 12 y 13 respectivamente, primero se deben determinar los siguientes parámetros, que se verán a continuación.

Determinación de las fracciones molares para la mezcla de gases de MCI.

La relación entre el número de moles de un componente y el número de moles de la mezcla se conoce como fracción de molar [39].

$$y_i = \frac{n_i}{n_m} \quad (17)$$

Donde:

y_i = Fracción molar de cada especie de gases en la mezcla, en kmol/kmol o Adimensional.

n_i = Número de moles de cada especie de la mezcla, expresada en kmol.

n_m = Número de moles totales de la mezcla del gas, expresada en kmol.

Por lo tanto, de la ecuación 16, sumando las especies que conforman la mezcla con sus respectivas partes de la misma especie, se conocen los moles totales por especie, y sumando todos los moles de la mezcla se tienen los moles totales de la mezcla en cuestión.

Para poder determinar la fracción molar de para cada especie se tiene; para el vapor de agua y el nitrógeno, respectivamente, lo siguiente:

$$y_{H_2O} = \frac{n_{H_2O}}{n_{gases}} \quad (18)$$

$$y_{N_2} = \frac{n_{N_2}}{n_{gases}} \quad (19)$$

Determinación de la masa de mezcla de gases.

La masa de una sustancia puede expresarse en términos del número de moles n_i y el peso molar P_{mi} una sustancia como:

$$m_i = n_i P_{mi} \quad (20)$$

Donde:

m_i = Masa de la sustancia en cuestión, expresada en kg.

n_i = Número de moles de una sustancia, expresada en kmol.

P_{mi} = Peso molecular de la especie en cuestión, en kg/kmol.

Acoplando la ecuación 20, al caso que compete a este sistema, se tiene que, para cada especie de la mezcla de gases, las siguientes expresiones:

$$m_{H_2O} = n_{H_2O} M_{H_2O} \quad (21)$$

$$m_{N_2} = n_{N_2} M_{N_2} \quad (22)$$

Para la masa de la mezcla total de gases de escape del MCI, se tiene que:

$$m_{gases} = m_{H_2O} + m_{N_2} \quad (23)$$

Determinación de fracciones de masa.

La relación entre la masa de un componente y la masa de la mezcla se conoce como fracción de masa [39], y se expresa de la siguiente forma:

$$f_{m_i} = \frac{m_i}{m_m} \quad (24)$$

Donde:

f_{m_i} = Fracción de masa de cada especie de gases en la mezcla, Adimensional o kg/kg.

m_i = Masa de cada especie de la mezcla, en kg.

m_{gases} = Masa total de la mezcla, de gases en kg.

La ecuación 24 expresada para cada sustancia de la mezcla de gases, dice que la fracción de masa molar para el agua H_2O y nitrógeno N_2 es respectivamente:

$$f_{m_{H_2O}} = \frac{m_{H_2O}}{m_{gases}} \quad (25)$$

$$f_{m_{N_2}} = \frac{m_{N_2}}{m_{gases}} \quad (26)$$

Si se desea se puede conocer el peso molecular o masa molar aparente o promedio de una mezcla de gases, y esta se expresa como:

$$P_m = \sum_{i=1}^k y_i P_{mi} \quad (27)$$

Para este caso en particular tenemos que:

$$P_{m_{gases}} = y_{H_2O} P_{m_{H_2O}} + y_{N_2} P_{m_{N_2}} \quad (28)$$

Determinación de propiedades termodinámicas de la mezcla de gases.

Las propiedades intensivas de una mezcla de gases no reactiva, como lo son la entalpía, la entropía y el calor específico, de la mezcla de gases, por unidad de masa se pueden determinar mediante las siguientes ecuaciones:

$$h_m = \sum_{i=1}^k f m_i h_i \quad (29)$$

$$s_m = \sum_{i=1}^k f m_i s_i \quad (30)$$

Donde:

h_m = Entalpía de la mezcla de gases, en kJ/kg.

h_i = Entalpía por unidad de masa de cada especie en la mezcla, en kJ/kg.

s_m = Entropía de la mezcla de gases, en kJ/kg·K.

s_i = Entropía por unidad de masa de cada especie en la mezcla, en kJ/kg·K.

Los calores específicos de una mezcla de gases pueden calcularse como sigue:

$$C_{v,m} = \sum_{i=1}^k f m_i C_{v,i} \quad (31)$$

$$C_{p,m} = \sum_{i=1}^k f m_i C_{p,i} \quad (32)$$

Donde:

$C_{v,m}$ = Calor específico a volumen constante de la mezcla de gases, en kJ/kg·K o °C.

$C_{v,i}$ = Calor específico a volumen constante de cada especie en la mezcla, en kJ/kg·K o °C.

$C_{p,m}$ = Calor específico a presión constante de la mezcla de gases, en kJ/kg·K o °C.

$C_{p,i}$ = Calor específico a presión constante de cada especie en la mezcla, en kJ/kg·K o °C.

En esta primera parte de validación del sistema se aplicarán las ecuaciones 29, 30 y 32 respectivamente para las corrientes 12 y 13 que corresponden a mezcla de gases, para determinar sus correspondientes propiedades termodinámicas. Además, se debe tomar en cuenta la referencia de temperatura para calcular las entalpías y entropías del sistema ya que se está trabajando tanto con amoníaco como sustancia pura y con gases ideales según corresponde, esto se detalla más a fondo, en el apéndice A de este trabajo.

Flujos másicos y molares de cada corriente de primera parte del sistema.

En esta parte se procederá a plantear las ecuaciones que gobiernan el flujo másico y molar de cada corriente de la primera parte del sistema de vehículo híbrido a analizar, estas incluyen el sistema de motor MCI, el sistema de separación del amoníaco y sus respectivos componentes auxiliares ya antes mencionados. En este trabajo solo se realizan cálculos con los flujos másico, es decir en base a su masa, pero con las mismas ecuaciones, planteadas a continuación y la ecuación 4 que involucra el peso molecular de una corriente se pueden determinar los flujos molares de cada corriente del sistema y sus propiedades en base molar si se desea.

Balance de masa para la válvula reguladora de presión del tanque Pr.

Esta válvula tiene la tarea de evitar que el amoníaco que sale del tanque de almacenamiento, retorne, y al ser únicamente una entrada y una salida se tiene lo siguiente:

$$\dot{m}_1 = \dot{m}_2 \quad (33)$$

Donde:

$\dot{m}_1$ = Flujo másico de NH_3 de la corriente 1, proveniente del tanque, en kg/s.

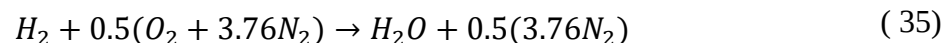
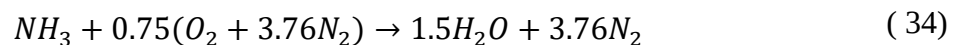
$\dot{m}_2$ = Flujo másico de NH_3 de la corriente 2, que se estrangula en válvula Pr en kg/s.

De la ecuación 33, se determina el flujo másico de la corriente 2.

Balance de masa y estequiometria del MCI.

El motor de combustión interna trabaja con dos fluidos como combustibles uno de ellos es amoníaco que es el principal, pero como se mencionó en el capítulo 3 este tiene algunas deficiencias como combustible, por lo cual es necesario adicionar hidrógeno como segundo combustible a las cámaras del motor, para mejorar la combustión, como comburente se utiliza el oxígeno el cual lo contiene el aire y será modelado como aire seco estándar.

El amoníaco y el hidrógeno pueden quemarse dentro del MCI de acuerdo con las siguientes reacciones estequiométricas [40]:



De la estequiometria de la combustión en el MCI, podemos obtener las siguientes relaciones adimensionales que nos serán de ayuda para la determinación de los flujos másicos del MCI:

$$r_{Aa} = \frac{\dot{m}_4}{\dot{m}_{AireNH3}} \quad (36)$$

$$r_{Ha} = \frac{\dot{m}_9}{\dot{m}_{AireH2}} \quad (37)$$

Donde:

r_{Aa} = Relación de NH₃ amoníaco aire suministrado al MCI.

r_{Ha} = Relación de H₂ hidrógeno aire suministrado al MCI.

De estas ecuaciones se conocen respectivamente los flujos de aire necesarios para la combustión del amoníaco y el hidrógeno en el MCI, respectivamente.

Al realizar un balance de masa en estado estable y estacionario al MCI, tenemos que:

$$\dot{m}_4 + \dot{m}_9 + \dot{m}_{14} = \dot{m}_{12} \quad (38)$$

Donde:

$\dot{m}_4$ = Flujo másico de NH₃ que se suministra al MCI, en kg/s.

$\dot{m}_9$ = Flujo másico de H₂ que se suministra al MCI, en kg/s.

$\dot{m}_{14}$ = Flujo de aire que aporta el oxígeno para la combustión en el MCI, en kg/s.

$\dot{m}_{12}$ = Flujo másico de gases de escape de la combustión en el MCI, en kg/s.

De la ecuación 38 se conoce el flujo másico de la corriente 12.

El flujo 14, está compuesto por 2 corrientes de aire que ingresan al motor para su respectiva combustión.

$$\dot{m}_{14} = \dot{m}_{AireNH3} + \dot{m}_{AireH2} \quad (39)$$

Donde:

$\dot{m}_{AireNH3}$ = Flujo de aire necesario para la combustión del amoníaco en el MCI, en kg/s

$\dot{m}_{AireH2}$ = Flujo de aire necesario para la combustión del hidrógeno en el MCI, en kg/s

Además, como se sugiere en [22] se tendrá una relación de flujo de hidrógeno a amoníaco que se inyecta al motor de 1%, como se muestra a continuación:

$$\frac{\dot{m}_9}{\dot{m}_4} = 0.01 \quad (40)$$

De la ecuación 40 se conoce el flujo másico de la corriente 4.

En la Tabla 4, tomada de [22], se muestran algunas propiedades de datos de entrada del motor MCI, usados en el modelado del sistema.

Tabla 4. Propiedades de datos de entrada útiles para el modelado del motor MCI tomados de [22].

Parámetro	Unidades	Amoníaco	Hidrógeno
Formula molecular.	N/A	NH ₃	H ₂
Peso molecular.	(kg/kmol)	17.03	2.016
Relación estequiométrica aire-combustible.	(Kmol aire/Kmol i)	3.57	2.387
Relación estequiométrica aire-combustible.	(kg aire/kg i)	6.05	34.2
Límites de ignición.	(% Vol. En Aire)	16-25	4-75
Temperatura de flama adiabática.	(°C)	1803	2110
Temperatura de auto ignición.	(°C)	651	571
Poder calorífico inferior.	(MJ/kg)	18.61	119.95
Poder calorífico superior.	(MJ/kg)	22.5	141.6
Exergía química estándar.	(MJ/kg)	119.52	20.29

Balance de masa del intercambiador de calor HEX₁, y de los nodos de tuberías del sistema.

Considerando estado estable y flujo estacionario, de la Figura 23, se tiene, que:

$$\dot{m}_3 = \dot{m}_5 \quad (41)$$

$$\dot{m}_6 = \dot{m}_8 \quad (42)$$

Donde:

$\dot{m}_3$ = Flujo másico de NH₃ que entra al HEX₁, en kg/s.

$\dot{m}_5$ = Flujo másico de NH₃ que sale del HEX₁, en kg/s.

$\dot{m}_6$ = Flujo de másico de hidrógeno que entra al HEX₁, en kg/s.

$\dot{m}_8$ = Flujo de másico de hidrógeno que sale del HEX₁, en kg/s.

Recordando que, los flujos 4 y 6 son datos de entrada del modelo, y son dados en la Tabla 3, se determina el valor del flujo 8 de manera inmediata, de la ecuación 42. Mientras que para el caso del flujo 3 y 5, ambas corrientes son desconocidas aún, por lo cual, es necesario, aplicar un balance de masa para el nodo A del sistema de tuberías de NH₃, el cual se muestra en la Figura 23.

Realizando un balance de masa en estado estable y estacionario, al nodo A, de la tubería de amoníaco, se tiene la siguiente ecuación:

$$\dot{m}_2 = \dot{m}_3 + \dot{m}_4 \quad (43)$$

Donde:

$\dot{m}_2$ = Flujo másico de NH_3 que sale de la válvula Pr, en kg/s.

$\dot{m}_3$ = Flujo másico de NH_3 que entra al HEX 1, en kg/s.

$\dot{m}_4$ = Flujo másico de NH_3 que se suministra al MCI, en kg/s.

Y dado que, ya se conoce previamente de la ecuación 33, el flujo de la corriente 2, y también se conoce el flujo 4, es posible conocer el flujo de la corriente 3, de la ecuación 43. Una vez conocido el flujo de la corriente 3, se conoce, de la ecuación 41 el flujo de la corriente 5.

Del mismo modo que para el nodo A, se realiza un balance de masa para el nodo B de la tubería de hidrógeno, que se muestra en la Figura 23. Por lo que, se tiene la siguiente ecuación:

$$\dot{m}_8 = \dot{m}_9 + \dot{m}_{10} \quad (44)$$

Donde:

$\dot{m}_8$ = Flujo de másico de hidrógeno que sale del HEX₁, en kg/s.

$\dot{m}_9$ = Flujo másico de hidrógeno que se suministra al MCI, en kg/s.

$\dot{m}_{10}$ = Flujo de másico de hidrógeno que entra al HPU, en kg/s.

De la ecuación 44 se conoce el flujo másico de la corriente 10, recordando que, los flujos 8 y 9 se conocían previamente.

Balance de masa de unidad disociadora de separación DSU.

De la Figura 23, al aplicar un balance de masa en estado estable, y flujo estacionario, a la unidad DSU, del lado de los gases de escape, se tiene que:

$$\dot{m}_{12} = \dot{m}_{13} \quad (45)$$

$\dot{m}_{12}$ = Flujo másico de gases de entrada al DSU, en kg/s.

$\dot{m}_{13}$ = Flujo másico de gases de salida del DSU, en kg/s.

En la parte del craqueo térmico, en el catalizador DSU, ocurre la separación de la corriente de amoníaco NH_3 , en hidrógeno H_2 y nitrógeno N_2 , todo esto provocado por la corriente de

gases de combustión que ingresan a la unidad, como se expresa en el siguiente balance de masa en estado estable para este componente:

$$\dot{m}_5 + \dot{m}_{12} = \dot{m}_6 + \dot{m}_7 + \dot{m}_{13} \quad (46)$$

Donde:

$\dot{m}_5$ = Flujo másico de NH_3 que se suministra al DSU, en kg/s.

$\dot{m}_6$ = Flujo de másico de hidrógeno producido a bordo en el DSU, en kg/s.

$\dot{m}_7$ = Flujo másico de nitrógeno que escapa a la atmosfera del DSU, en kg/s.

De la ecuación 46 se determina el flujo másico de la corriente 7.

Balance de masa de la unidad de purificación de hidrógeno (HUP).

Esta es la encargada de filtrar las impurezas y residuos de amoníaco y nitrógeno que pudieran llegar hasta a la pila PEM y dañarla, para este análisis se modelará como una válvula con su respectiva caída de presión. Se tiene el siguiente balance de masa en estado estable y flujo estacionario:

$$\dot{m}_{10} = \dot{m}_{11} \quad (47)$$

$\dot{m}_{10}$ = Flujo de másico de hidrógeno que entra al HPU, en kg/s.

$\dot{m}_{11}$ = Flujo de másico de hidrógeno que sale del HPU, en kg/s.

De la ecuación 47 se conoce el flujo másico de la corriente 11.

Hasta esta parte se han determinado las propiedades termodinámicas de algunos estados, correspondientes a las corrientes, a la primera parte del sistema, así como sus respectivos flujos, tanto másico como molares de las corrientes numeradas, que comprenden del 1 al 14 del sistema de vehículo híbrido de MCI y pila PEM con producción de hidrógeno a bordo. Pero aún faltan algunos estados, los cuales es necesario complementar con datos del análisis energético de algunos equipos auxiliares del subsistema 1, como se muestra a continuación.

Análisis del intercambiador de calor HEX_1 , método de efectividad.

La efectividad de un intercambiador de calor, se define según [42] como la relación entre la tasa de transferencia de calor real para un intercambiador de calor y la tasa de transferencia de calor máxima posible:

$$\varepsilon = \frac{q}{q_{max}} \quad (48)$$

Para definir la efectividad de un intercambiador de calor, primero debemos determinar la máxima tasa de transferencia de calor posible, q_{max} , para el intercambiador, que se puede calcular a partir de la siguiente ecuación:

$$q_{max} = C_{min} (T_{h,i} - T_{c,i}) \quad (49)$$

Donde:

$T_{h,i}$ = Temperatura de entrada de la corriente caliente, expresada en K o °C.

$T_{c,i}$ = Temperatura de entrada de la corriente fría, expresada en K o °C.

Además:

$$C_{min} = \dot{m} C_p \quad (50)$$

C_{min} = Capacidad calorífica mínima, la cual es el valor mínimo entre la capacidad calorífica del fluido frío o caliente, expresada en kJ/s·K o °C.

Por otro lado, el calor real transmitido se establece a partir de:

$$q = C_h (T_{h,i} - T_{h,o}) = C_c (T_{c,o} - T_{c,i}) \quad (51)$$

Donde:

$T_{h,o}$ = Temperatura de salida de la corriente caliente, expresada en K o °C.

$T_{c,o}$ = Temperatura de salida de la corriente fría, expresada en K o °C.

C_h = Capacidad calorífica de la corriente caliente, expresada en kJ/s·K o °C.

C_c = Capacidad calorífica de la corriente fría, expresada en kJ/s·K o °C.

Finalmente se puede expresar la eficacia de un intercambiador de calor, de la siguiente forma:

$$\varepsilon = \frac{C_h (T_{h,i} - T_{h,o})}{C_{min} (T_{h,i} - T_{c,i})} = \frac{C_c (T_{c,o} - T_{c,i})}{C_{min} (T_{h,i} - T_{c,i})} \quad (52)$$

En el sistema de vehículo híbrido, que se analiza en este trabajo se tiene tres intercambiadores de calor nombrados como HEX y su respectivo número, esto se puede apreciar en la Figura 15. Debido a la cantidad de información insuficiente y falta de un prototipo o equipos que permitan tener los datos de los respectivos valores de las propiedades de temperatura de algunos estados, se optó por suponer que el intercambiador de calor número 1, es decir HEX₁ opera con una eficacia del 80%. Esto último con la finalidad de determinar las temperaturas de las respectivas corrientes que este involucra, como se muestra en la Figura 24.

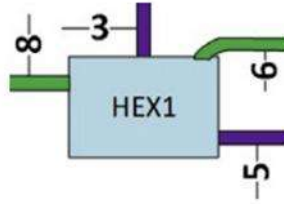


Figura 24. Intercambiador de calor HEX₁, con sus respectivas corrientes, donde el NH₃ es la corriente fría (3 a 5) y el H₂ es la corriente caliente (6 a 8).

Analizando la Figura 24, se tiene un flujo de amoníaco que incluye las corrientes 3 y 5, y un flujo de hidrógeno que incluye las corrientes 6 y 8, respectivamente, por lo tanto, se propone que la corriente caliente sea la de hidrógeno, y por lo tanto la corriente fría será la de amoníaco, que es la corriente a la cual se le desea aumentar la temperatura, previo a su entrada la unidad de disociación DSU. Aplicando las ecuaciones previamente descritas para la eficacia de un intercambiador de calor a HEX₁, se procede a definir las corrientes en función de su temperatura, como:

T_3 = Temperatura de entrada de la corriente fría, siendo este NH₃, y expresada en K.

T_5 = Temperatura de salida de la corriente fría, siendo este NH₃, y expresado en K.

T_6 = Temperatura de entrada de la corriente caliente, siendo este H₂, y expresado en K.

T_8 = Temperatura de salida de la corriente caliente, siendo este H₂, y expresado en K.

Una vez realizado el cálculo de las capacidades caloríficas, se encontró que la capacidad calorífica mínima es $C_{min} = C_h$, es decir el flujo de H₂, ya que dadas las condiciones del análisis resultó ser el menor de los valores de capacidad calórica, por lo tanto, la ecuación 52, se puede expresar como sigue:

$$\varepsilon_{HEX1} = \frac{(T_6 - T_8)}{(T_6 - T_3)} \quad (53)$$

Donde:

ε_{HEX1} = Efectividad del intercambiador de calor HEX₁, adimensional.

De donde se determina el valor de temperatura de la corriente 8, ya que si se recuerda T_6 se conoce previamente como dato de entrada de las condiciones de operación de la DSU, y T_3 se determinó del análisis de la válvula reguladora de amoníaco que proviene del tanque, por lo tanto, a este punto hay dos opciones, utilizar la ecuación 52 para el lado frío, o bien un balance de energía para el intercambiador de calor HEX₁. Esta última será la que se utilice para el análisis.

Balance de energía para HEX₁.

Aplicando la primera ley de la termodinámica y haciendo los respectivos arreglos, se tiene la siguiente ecuación:

$$C_h (T_6 - T_8) = C_c (T_5 - T_3) \quad (54)$$

De esta expresión 54, será determinado el valor de la temperatura de la corriente de amoníaco 5, y con esto se completa la parte del análisis de masa y energía del intercambiador de calor HEX₁, y se plantean las ecuaciones y suposiciones que también se podrán utilizar en los intercambiadores de calor restantes del sistema con sus respectivas precauciones.

Proceso de disociación de amoníaco NH₃, mediante la unidad DSU.

Determinación de la energía necesaria para la separación del amoníaco NH₃ en hidrógeno H₂ y nitrógeno N₂.

En [25] nos indica que el calor requerido por la reacción de separación del NH₃ en H₂ y N₂, se puede expresar basándose en el cambio de entalpía del amoníaco para provocar un aumento de su temperatura hasta el nivel seleccionado para la descomposición térmica, y la cantidad de energía requerida para la separación puede determinarse utilizando la siguiente ecuación:

$$\Delta h_{DSU}(T) = h(T) - h'(T_0) + x_d \eta_d \Delta_{hd}(T) \quad (55)$$

Donde:

$\Delta h_{DSU}(T)$ = Energía necesaria para la separación del amoníaco, en kJ/kg.

$h(T) - h'(T_0)$ = Cambio de entalpía del amoníaco, en kJ/kg.

x_d = Fracción en la que la corriente de amoníaco se disocia en H₂ y N₂ (si aplica).

η_d = Es la eficiencia de conversión del proceso de descomposición térmica, asociada a la unidad DSU, expresada en porcentaje.

$\Delta_{hd}(T)$ = Es el calor esencial para la reacción endotérmica, en el cual el amoníaco es capaz de descomponerse térmicamente a la temperatura T , expresada en kJ/kg o kmol.

T representa la temperatura a la que se usa NH₃ como combustible (ya sea en un MCI o en una celda de combustible).

En la Tabla 5 se muestran los parámetros de operación de la DSU del sistema de disociación de amoníaco utilizada en el modelo:

Tabla 5. Parámetros de operación de la unidad de disociación térmica de amoníaco DSU, tomados de las referencias [12] y [22].

Parámetro	Unidades	Reacción o valor
Ecuación de reacción química.	N/A	$NH_3 \rightarrow 1/2 N_2 + 3/2 H_2$
Entalpía estándar de reacción, Δh_{NH_3} .	(KJ/kmol)	45.90
Temperatura de operación de DSU, T_{DSU} .	(°C)	400-700
Eficiencia de descomposición térmica, η_d .	%	0.9

Cálculo de la fracción de disociación x_d .

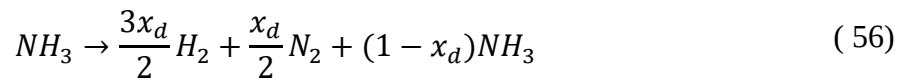
En [25] se exponen los siguientes casos para la disociación del amoníaco. El primer caso ocurre cuando $x_d = 0\%$, y representa la situación hipotética en la que el amoníaco solo se precalienta antes de la oxidación y se supone que no se produce descomposición. Este primer caso solo se ilustra como referencia, porque en realidad, a temperaturas superiores a 300 °C, algo de amoníaco se descompone espontáneamente, incluso sin la presencia de catalizadores.

El segundo caso que se presenta es en el que $x_d = 5\%$, y es aplicable en los MCI, donde una pequeña fracción de amoníaco generalmente se descompone para producir hidrógeno que impulsa el proceso de combustión.

El tercer caso es la situación extrema en la que $x_d = 100\%$, y esta es aplicable a algunos sistemas de pilas de combustible que se suministran con hidrógeno producido a partir de amoníaco.

Para este modelo se supone la tercera situación, es decir que se están separando totalmente el hidrógeno del nitrógeno, ya que el hidrógeno producido en la unidad DSU está destinado principalmente a alimentar la pila PEM, y solo una pequeña cantidad es la que se destina al MCI. Este cálculo se realiza para una molécula de amoníaco, y suponiendo que toda la molécula de amoníaco se separa, con lo cual solo tendremos al final nitrógeno e hidrógeno como productos finales en el equilibrio.

La referencia [22] indica que la descomposición térmica del amoníaco se puede expresar en base a la fracción de disociación, x_d , y que la cantidad de cada especie de gas en la mezcla se puede identificar usando la siguiente ecuación:



Para la determinación de la fracción de disociación x_d , se elabora la Tabla 6:

Tabla 6. Cálculo de la fracción molar de la reacción química del amoníaco.

1 mol	Sustancia	NH ₃	H ₂	N ₂
	Iniciales	1	-	-
	Reaccionan o se forman	- x_d	$\frac{3}{2} x_d$	$\frac{1}{2} x_d$
	Equilibrio	$(1 - x_d)$	$\frac{3}{2} x_d$	$\frac{1}{2} x_d$
	Molaridad en el equilibrio	0	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$

Como se supone que todo el amoníaco se separa no hay moles de NH₃ en el equilibrio, por lo que se tiene de la Tabla 6:

$$(1 - x_d) = 0 \quad (57)$$

Y al resolver la ecuación lineal de una incógnita se encuentra el valor de x_d .

$$x_d = 1 \quad (58)$$

La sustitución en la ecuación 58 en 56, produce que la reacción química de la separación del amoníaco NH_3 , se pueda escribir para este modelo como:



Cambio de entalpía del amoníaco, en la unidad de disociación DSU.

Hasta esta parte se han determinado los parámetros que intervienen en la ecuación 55, pero falta por definir la parte de la energía concerniente al cambio de entalpía del NH_3 , que ocurre en el proceso de disociación del mismo, según [25], se requiere que el NH_3 se caliente por lo menos a 300 °C para que ocurra la separación por craqueo térmico del mismo, y por esto último es lógico suponer que a estos valores de temperatura el amoníaco se encuentra en una fase puramente gaseosa, por lo tanto se puede modelar, como un gas ideal para calcular su cambio de entalpía, siendo este función únicamente de su temperatura por lo tanto se puede escribir la siguiente ecuación:

$$\Delta h_{NH_3} = h(T) - h'(T_0) = C_{pNH_3} (T_{DSU} - T_0) \quad (60)$$

Donde:

C_{pNH_3} = Calor específico del NH_3 , en kJ/kg·K o °C.

T_{DSU} = Temperatura de operación de la unidad DSU, en K o °C.

T_0 = Temperatura de ambiente de referencia, en K o °C.

Conocidos todos los parámetros de la ecuación 55 es posible determinar la energía necesaria para la separación del amoníaco.

Análisis energético del sistema primera parte del sistema.

Balance de energía de la unidad de disociación DSU.

Dado la cantidad de variables que intervienen en este sistema se hace la siguiente suposición, los gases de escape del MCI son la fuente de energía térmica necesaria para la separación del NH_3 en la DSU, por ende, es lógico pensar en que la energía que pierde la corriente de gases en su paso por la DSU, es la necesaria para el proceso de disociación previamente descrita en la ecuación 55.

Lo anterior se puede escribir en forma de tasa como:

$$\dot{m}_{NH_3} \Delta h_{DSU}(T) = \dot{m}_{gases} C_{p gases} (T_{12} - T_{13}) \quad (61)$$

Reescribiendo la ecuación anterior con parámetros del sistema previamente conocidos se tiene que:

$$\dot{m}_5 \Delta h_{DSU}(T) = \dot{m}_{12} C_{p\ gases} (T_{12} - T_{13}) \quad (62)$$

De esta ecuación se determina el valor de la temperatura de la corriente de salida de los gases de escape del sistema, es decir la corriente 13.

En esta primera parte de validación del modelo, ya es posible calcular el resto de propiedades termodinámicas faltantes, para completar los estados 5, 8, 9, 10 y 11, del sistema. Una vez determinadas todas las propiedades termodinámicas de los estados 1 al 14 de esta primera parte del subsistema 1, se procede a calcular algunos parámetros importantes a tener en cuenta para el funcionamiento del sistema y así dar paso a la parte correspondiente al tema del análisis de exergía correspondiente a la primera parte del subsistema 1.

Análisis energético del MCI, determinación del calor perdido $\dot{Q}_{ice}$.

Aplicando la ecuación de la energía al MCI, en estado estable, y con las consideraciones previamente mencionadas al inicio del capítulo, entre ellas que el agua de los productos sale en forma de vapor, se tiene que:

$$\dot{m}_4 HHV_{NH3} + \dot{m}_9 HHV_{H2} + \dot{m}_{14} h_{14} = \dot{m}_{12} h_{12} + \dot{W}_{ice} + \dot{Q}_{ice} \quad (63)$$

Donde:

$\dot{W}_{ice}$ = Se refiere a la potencia obtenible del MCI en kW.

$\dot{Q}_{ice}$ = Indica la cantidad de calor perdido total por el MCI en kW.

HHV_{NH3} = Poder calorífico superior de amoníaco suministrado al MCI en kJ/kg.

HHV_{H2} = Poder calorífico superior de hidrógeno suministrado al MCI en kJ/kg.

h_{14} = Entalpía de aire suministrado al MCI en kJ/kg.

h_{12} = Entalpía de los gases de combustión que escapan del MCI en kJ/kg.

De esta ecuación se determinará el calor perdido en el motor de combustión interna, que se engloba en un solo parámetro para este análisis.

Determinación de la eficiencia energética del MCI.

La eficiencia energética del MCI se define en [12], como la potencia neta de salida entre el recurso utilizado para generar esta, quedando de la siguiente manera:

$$\eta_{ICE} = \frac{\dot{W}_{ICE}}{\dot{m}_4 h_4 + \dot{m}_9 h_9} \quad (64)$$

η_{ICE} = Eficiencia energética del MCI, en decimales.

Donde h_4 y h_9 , se toman de acuerdo a la referencia [22], como los poderes caloríficos superiores del NH_3 y H_2 respectivamente, usados como combustibles.

Análisis exergético del sistema primera parte del sistema.

Tasa de exergía térmica del MCI.

Las tasas de destrucción exergía térmica asociada al motor de combustión interna, se suponen en una sola corriente de calor, y está representada mediante la siguiente ecuación:

$$\dot{E}x_{QICE} = \left(1 - \frac{T_0}{T_{PICE}}\right) \dot{Q}_{ice} \quad (65)$$

Donde:

$\dot{E}x_{QICE}$ = Tasa de destrucción de exergía térmica del MCI, en kW.

T_0 = Temperatura de ambiente de referencia, en K.

T_{PICE} = Temperatura de la pared de la cámara de combustión, en K.

Balance de exergía para el MCI.

Aplicando la ecuación 5, para balance de exergía en estado estable al MCI como volumen de control, se tiene que la destrucción de exergía del MCI, se puede conocer como se muestra a continuación:

$$\dot{m}_4 ex_4 + \dot{m}_9 ex_9 + \dot{m}_{14} ex_{14} = \dot{m}_{12} ex_{12} + \dot{W}_{ice} + \dot{E}x_{QICE} + \dot{E}x_{dICE} \quad (66)$$

Donde:

ex_4 = Exergía total de la corriente de amoníaco líquido que ingresa al MCI, en kJ/kg de NH_3 .

ex_9 = Exergía total de la corriente de hidrógeno que ingresa al MCI, en kJ/kg de H_2 .

$\dot{E}x_{dICE}$ = Se refiere a la destrucción de exergía del MCI, en kW.

Determinación de la eficiencia exergética del MCI.

La eficiencia exergética del MCI, se calcula según [43], como el producto obtenido entre el recurso energético que ingreso al sistema, para el MCI se calcula de la siguiente manera:

$$\psi_{ICE} = \frac{\dot{W}_{ICE}}{\dot{m}_4 ex_4 + \dot{m}_9 ex_9} \quad (67)$$

ψ_{ICE} = Eficiencia exergética del MCI, en decimales.

Donde los valores de la exergía ex_4 y ex_9 , se trata de los valores de exergía total de las corrientes que aportan energía al sistema, y al tratarse de un sistema reactivo se considera su poder calorífico superior más su componente de flujo para el NH_3 y el H_2 , para la determinación de la destrucción de exergía, así como para el cálculo de la eficiencia exergética del MCI.

4.1.3 Modelado del subsistema 2: Pila PEM y equipos complementarios.

En esta segunda parte del modelo, se abarcará lo que concierne al subsistema 2, es decir la pila de combustible PEM y sus equipos auxiliares como se muestra en la Figura 25.

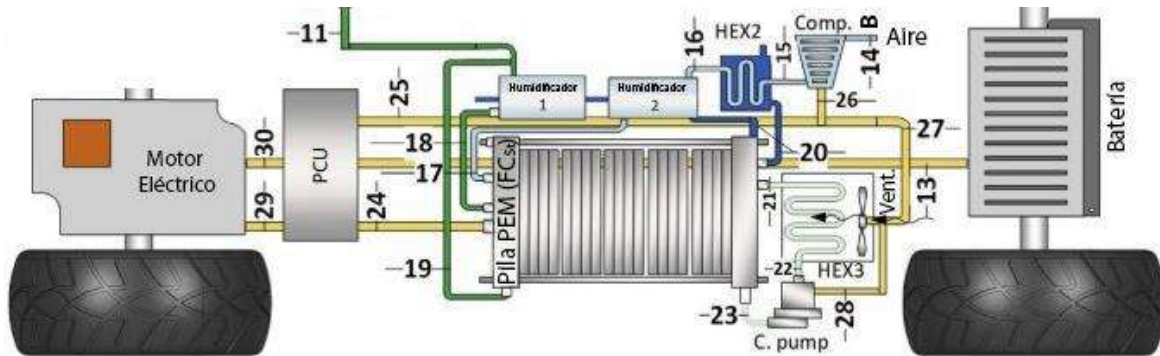


Figura 25. Segunda parte del modelo: pila PEM y componentes auxiliares.

Se tiene una pila del tipo PEM, la cual funciona con hidrógeno y oxígeno tomado del aire, el cual para este análisis es considerado seco e ideal, además de que los productos de la reacción en la pila son agua, la cual se presenta en forma líquida y abandona el sistema por el cátodo para salir a la atmósfera. Los componentes auxiliares como el compresor serán modelados con aire seco estándar y para este caso no se tomarán en cuenta los humidificadores de aire ni de hidrógeno. El hidrógeno se inyecta en el ánodo en forma gaseosa y seco. Además, se considera que la parte no utilizada se recircula con las mismas propiedades que la corriente de entrada al sistema de pila PEM. La pila se enfría mediante un sistema de refrigeración a base de un ventilador y un intercambiador de calor con refrigerante en su interior.

El análisis de este subsistema, se llevará a cabo en el siguiente orden descrito a continuación, y se implementará en EES para su posterior validación y análisis. Finalmente, para este capítulo se unirá a la primera parte del sistema con esta segunda parte, para validar el modelo completo del vehículo híbrido de MCI y pila PEM.

Suposiciones para el modelado de la segunda parte del sistema.

Se realizan las siguientes suposiciones para el modelado y la evaluación del sistema:

- Las mismas que aplique que se describen en la primera parte del modelo.
- Se supone que la eficiencia isentrópica de la bomba de enfriamiento, el compresor y el ventilador instalados dentro de la pila PEM, es del 85%. Además, se considera que estas partes funcionan adiabáticamente.
- El fluido de trabajo utilizado para enfriar la pila PEM, se selecciona para que sea etilenglicol.

- Se considera aire e hidrógeno seco que ingresan a la pila PEM, es decir los humidificadores 1 y 2 no trabajarán.
- El producto de la reacción de en la pila es agua líquida a la temperatura de operación de la pila.

Datos de entrada para el modelado del sistema (segunda parte).

Para el modelado de la parte que concierne a la pila PEM, se tienen los siguientes datos de alimentación al sistema, los cuales serán empleados en los cálculos electroquímicos de la pila, la determinación de flujos y ecuaciones de energía y exergía de la misma y de sus componentes auxiliares. En la Tabla 7 se presentan los datos de entrada, mismos que se indican en [22], algunos valores son tomados de [44] y son valores comunes en la bibliografía de este tipo de sistemas.

Tabla 7. Parámetros de entrada para el modelo y validación, de la pila PEM y sus componentes auxiliares, que componen el sistema de vehículo híbrido de MCI y pila PEM, tomados de las referencias [22], [43], [44] y [45].

Parámetro	Nomenclatura	Unidades	Rango o valor
Densidad de corriente por celda.	J	A/cm ²	1.15
Área de celda.	A _{cell}	cm ²	900
Temperatura de operación de celda.	T _{FC}	(°C)	30 - 80
Presión de operación de celda.	P	bar	2
Presión de ánodo.	P _A	bar	2
Presión de cátodo.	P _C	bar	2
Coeficiente de transferencia de electrones del ánodo.	α_{an}	/	1
Coeficiente de transferencia de electrones del cátodo.	α_{ca}	/	0.5
Electrones transferidos en el ánodo.	n _{an}	e ⁻	2
Electrones transferidos en el cátodo.	n _{ca}	e ⁻	4
Espesor de membrana.	δ_{mem}	cm	0.0183
Actividad de agua en la membrana.	a _{H2O}	/	0.8
Densidad de corriente máxima.	J _{max}	A/cm ²	2
Constante de pérdidas de difusión.	β_2	/	2
Número de celdas.	n _{FC}	/	180
Temperatura de referencia.	T ₀	(°C)	25
Presión de referencia.	P ₀	bar	1
Presión de operación del tanque de H ₂ .	/	bar	700
Almacenamiento de hidrógeno.	/	kg	5
Poder calorífico superior de H ₂ en fase gaseosa.	HHVH ₂	MJ/kgH ₂	141.6
Poder calorífico inferior de H ₂ en fase gaseosa.	LHVH ₂	MJ/kgH ₂	119.95
Temperatura aproximada de pared de la pila.	TP _{FC}	(°C)	60

Análisis electroquímico de la pila PEM.

Para una pila de combustible típica del tipo PEM (Proton Exchange Membrane Fuel Cell), que funciona con H_2 y O_2 , se tienen las siguientes reacciones químicas, donde E es la energía eléctrica generada y Q el calor de desecho de la celda, estas serán las utilizadas para el modelado de la pila PEM, y son para 1 mol de H_2 y 1 mol de O_2 respectivamente:

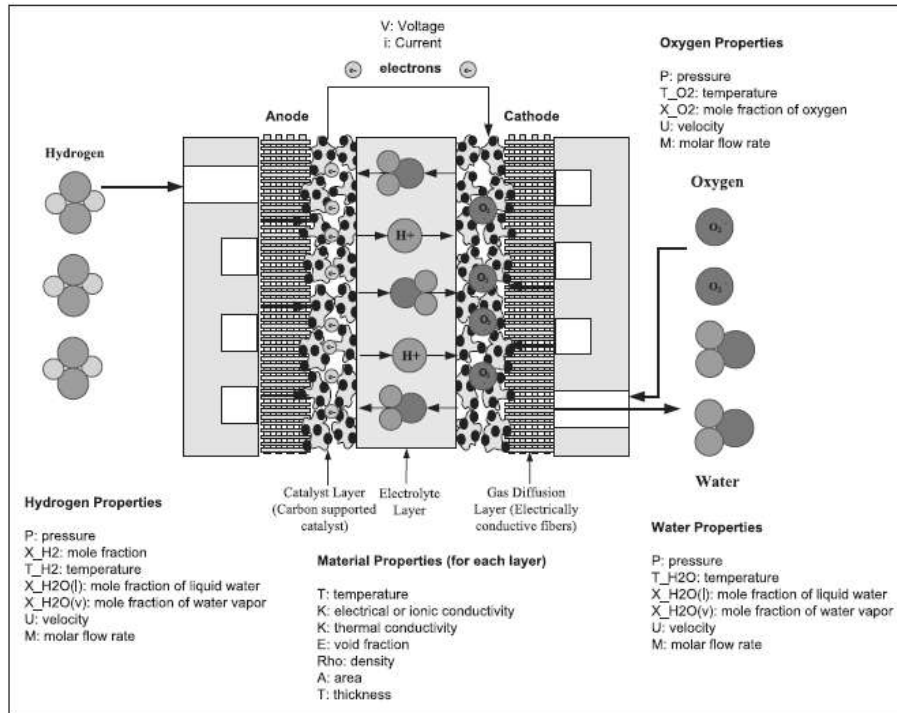
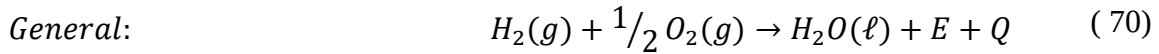
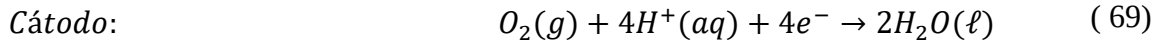
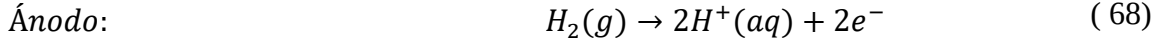


Figura 26. Parámetros para modelar una pila de combustible del tipo PEM, que consume H_2 y O_2 tomado del aire, en ella se observan los flujos que ocurren en ella [44].

En el caso de una pila de combustible de hidrógeno-oxígeno en condiciones de estado estándar, se tiene que tomar en cuenta, las presiones de entrada de los reactivos, así como sus temperaturas y fracciones másicas de las especies que interviene en las reacciones. Para el modelado se supone una pila tipo PEM sin entradas de humedad en el aire ni en el H_2 , con el fin de facilitar los cálculos y por ende siendo el agua líquida que se generara como producto a $80^\circ C$ y 1 atm la corriente única que participe en la pila, lo cual se ilustra en la Figura 26 y se describe el proceso para modelar una celda de combustible que trabaja con H_2 y O_2 .

Determinación de las presiones parciales de las especies en la pila PEM.

Para poder determinar los valores de los voltajes de la celda, es necesario conocer primero su presión de operación, del ánodo y del cátodo, respectivamente, pero además de estas al estar formado por distintas especies, estas poseen una presión parcial, y esta se determina en base a las siguientes ecuaciones, dadas en la referencia [44].

Presión parcial de H₂O.

Para la presión del agua que sale del cátodo, se tiene que corresponde a la presión de saturación a la temperatura de funcionamiento de la pila, y está dada por el siguiente polinomio:

$$\log 10 PH_2O = -2.1794 + 0.02953 T_{FC} - 9.1837 \times 10^{-5} T_{FC}^2 + 1.4454 \times 10^{-7} T_{FC}^3 \quad (71)$$

Donde:

T_{FC} = Temperatura de funcionamiento de la pila, en °C.

PH_2O = Presión parcial del H₂O en el cátodo, en atm.

Presión parcial de H₂.

Para el hidrógeno que ingresa al ánodo de la pila PEM, se tiene que su presión parcial está dada por la siguiente ecuación:

$$PH_2 = 0.5 * [P_A / \exp\{1.653 * J / (T_{FC}^{1.334})\}] - PH_2O \quad (72)$$

Donde:

PH_2 = Presión parcial de H₂ en el ánodo, en atm.

P_A = Presión del ánodo, en atm.

T_{FC} = Temperatura de funcionamiento de la pila PEM, en K.

J = Densidad de corriente de la celda, en A/cm².

Presión parcial de O₂.

Para el oxígeno que ingresa al cátodo de la pila PEM, se tiene que su presión parcial está dada por la siguiente ecuación:

$$PO_2 = [P_C / \exp\{4.192 * J / (T_{FC}^{1.334})\}] - PH_2O \quad (73)$$

Donde:

PO_2 = Presión parcial de O₂ en el cátodo, en atm.

P_C = Presión del cátodo, en atm.

Tanto en la ecuación de la presión de H_2 y de O_2 , la temperatura de la pila PEM, se expresa en grados Kelvin.

Voltaje o potencial reversible de la celda.

Si toda la entalpía de reacción de una celda de combustible de hidrógeno se convirtiera en energía eléctrica, entonces el voltaje de salida sería 1.48 V o 1.25 V, si el producto de agua estuviera en forma líquida o en forma de vapor, respectivamente [45]. A temperatura y presión estándar, este es el voltaje más alto que se puede obtener de una celda de combustible de hidrógeno-oxígeno. La mayoría de las reacciones de las pilas de combustible tienen voltajes en el rango de 0,8 a 1,5 V. Para obtener voltajes más altos, se deben conectar varias celdas en serie. Las pilas de combustible pueden funcionar a cualquier presión y, a menudo, es ventajoso hacer funcionar la pila de combustible a presiones superiores a la atmosférica [44].

El potencial reversible de la celda, asumiendo que se produce agua líquida a partir de la celda, se puede determinar para utilizar la ecuación de Nernst, dada en [12]:

$$E_r(T, P_i) = 1.482 - 0.000845 T_{FC} + 4.31 \times 10^{-5} T_{FC} \ln(P_{H_2} P_{O_2}^{0.5}) \quad (74)$$

Donde:

E_r = Voltaje reversible de la celda, en V.

Aquí T_{FC} es la temperatura a la que funciona la celda en K, las presiones parciales deben ser introducidas en atm según [46].

Perdidas de voltaje debido a la activación del ánodo y el cátodo.

La pérdida potencial debida a la resistencia de activación se determina para el ánodo y el cátodo de la siguiente ecuación dada en [47]:

$$E_{act} = E_{act,an} - E_{act,ca} \quad (75)$$

El voltaje de activación en el ánodo y cátodo respectivamente se calculan de la siguiente forma respectivamente:

$$E_{act,an} = \frac{RT_{FC}}{\alpha_{an} n_{an} F} \ln \left(\frac{J}{J_{o,an}} \right) \quad (76)$$

$$E_{act,ca} = \frac{RT_{FC}}{\alpha_{ca} n_{ca} F} \ln \left(\frac{J}{J_{o,ca}} \right) \quad (77)$$

Donde:

n = Es el número de electrones involucrados en la reacción del ánodo y cátodo respectivamente.

R = Es la constante universal de gas, en J/mol·K, equivalente a 8.314472.

F = Constante de Faraday, en C/mol, equivalente a 96485.3.

α_{an} y α_{ca} = Son el coeficiente de transferencia de electrones del ánodo y cátodo respectivamente.

La ecuación empírica, utilizada en [22], puede utilizarse para determinar los valores de densidad de corriente de intercambio J_0 a cualquier temperatura de funcionamiento:

$$J_0(T) = 1.08 \times 10^{-21} \times e^{(0.086 \times T_{FC})} \quad (78)$$

Donde:

J_0 = Es la densidad de corriente de intercambio, en A/cm².

Tanto para la parte del cálculo de la densidad de corriente de intercambio como de las pérdidas de activación, el valor de la T_{FC} se debe introducir en K.

Pérdidas de voltaje óhmicas.

La presencia de pérdidas óhmicas se debe principalmente a la resistencia de la membrana al flujo de protones. En este modelo, solo se considera la resistencia de la membrana de la pila PEM y se puede determinar de la ley de ohm de la siguiente manera:

$$E_{ohm} = J R_{ohm} \quad (79)$$

Donde:

E_{ohm} = Pérdidas de voltaje óhmicas, en V.

R_{ohm} = Resistencia interna de la celda, en $\Omega \cdot \text{cm}^2$.

Para poder determinar la resistencia interna de la pila se debe conocer de que está formada por dentro, es decir los materiales que forman la membrana, y los parámetros del electrolito, en este caso se trata de una celda de Nafion y por lo tanto se pueden utilizar las ecuaciones dadas en [22] para determinar la resistencia de la celda, como se muestra a continuación:

$$R_{ohm} = \frac{\delta_{mem}}{\sigma_{mem}} \quad (80)$$

Donde:

δ_{mem} = Espesor de la membrana, en cm.

σ_{mem} = Es la conductividad de la membrana $\left(\frac{1}{\Omega \cdot cm}\right)$.

La conductividad de la membrana de la celda de combustible se puede calcular utilizando las siguientes ecuaciones experimentales propuestas en [43]:

$$\sigma_{mem} = (0.005139 \lambda_{mem} - 0.00326) \times e^{\left[1268 \frac{1}{303} - \frac{1}{T_{FC}}\right]} \quad (81)$$

Donde:

λ_{mem} = Es el contenido de agua de la membrana, adimensional.

La temperatura de operación de la pila de combustible PEM debe ser introducida en K.

Para poder determinar el contenido de agua en la membrana, se tiene dos posibles casos, y dependen de la actividad del agua en la membrana, así como de sus presiones parciales, tanto en el cátodo, como en la parte del agua presente en la membrana, es decir si la actividad del agua es mayor que cero y menor o igual a 1, o el otro caso para cuando esta es mayor que 1 y menor que 3, para determinar esto se recurre a las siguientes ecuaciones dadas en [46]:

$$a_{H_2O} = X_{H_2O} \left(\frac{P}{P_{sat}} \right) \quad (82)$$

$$\lambda_{mem} = \{0.043 + 17.81 a_{H_2O} - 39.85 a_{H_2O}^2 + 39.85 a_{H_2O}^3 \quad 0 < a_{H_2O} \leq 1\} \quad (83)$$

$$\lambda_{mem} = 14 + 1.4 (a_{H_2O} - 1), \quad 1 < a_{H_2O} \leq 3 \quad (84)$$

Donde:

a_{H_2O} = Es la actividad del agua de la membrana, adimensional.

X_{H_2O} = Es la fracción molar del agua.

P = Presión de operación de la pila PEM, en atm.

$P_{sat} = PH_2O$ = Presión parcial del H₂O en el cátodo, en atm.

En este caso debido a que la única agua que se considera para el modelado es la que se genera en la reacción química de la pila, y a que no se conoce el valor de la fracción molar del agua en la membrana, se tomara la actividad de agua en la membrana como 0.8, que según la referencia [44], es un valor adecuado para una pila de tipo PEM como la que se modela en este trabajo.

Perdidas debidas a la concentración.

Las pérdidas de concentración tienen lugar en los electrodos de ánodo y cátodo, y estas ocurren de forma característica debido a la limitación de los fenómenos de transferencia de

masa a altas densidades de corriente, a medida que avanza la reacción, la concentración varía en la superficie de los sitios de reacción y esto creará un gradiente de concentración entre los sitios de reacción y la fase principal. A altas densidades de corriente, el gradiente de concentración será muy alto y limitará la velocidad de las reacciones. Por tanto, las pérdidas debidas al sobrepotencial de concentración se pueden determinar de la ecuación experimental propuesta en [43] como:

$$E_{conc} = J \left(\beta_1 \frac{J}{J_{max}} \right)^{\beta_2} \quad (85)$$

Donde:

E_{conc} = Pérdidas de voltaje debido a la concentración, en V.

J_{max} = Densidad de corriente máxima, en A/cm².

β_1 y β_2 = Son constantes que dependen de la temperatura de operación y la concentración del reactivo.

De [43], se propone que J_{max} y β_2 se toman como 2, y β_1 se calcula mediante la ecuación empírica de Pukrushkapan, en la cual se tiene dos casos, que dependen de los valores de presión de los parámetros de la pila PEM y de su temperatura de operación y son los siguientes:

$$Si \quad \frac{PO_2}{0.1173} + P_{sat} < 2 \quad (86)$$

Entonces β_1 se determina de la siguiente forma:

$$\beta_1 = (7.16 \times 10^{-4} T_{FC} - 0.622) \left(\frac{PO_2}{0.1173} + P_{sat} \right) + (-1.45 \times 10^{-3} T_{FC} + 1.68) \quad (87)$$

De lo contrario, para cualquier valor diferente:

$$\beta_1 = (8.66 \times 10^{-5} T_{FC} - 0.068) \left(\frac{PO_2}{0.1173} + P_{sat} \right) + (-1.6 \times 10^{-4} + 0.54) \quad (88)$$

Donde P_{sat} es la presión parcial del agua determinada anteriormente, todos los valores de presión se dan en atm, y la T_{FC} se expresa en K.

Voltaje de salida de la celda.

El voltaje de salida de la celda, es el voltaje reversible de la celda menos las caídas de tensión que tienen lugar en la celda, y se puede obtener de la siguiente manera:

(89)

$$E_T = E_r - E_{act} - E_{ohm} - E_{conc}$$

Donde:

E_T = Se refiere al potencial de celda práctico, en V.

E_r = Representa el potencial de celda reversible, en V.

E_{act} = Denota las pérdidas debidas al sobrepotencial de activación, en V.

E_{ohm} = Se refiere a las pérdidas debidas al sobrepotencial óhmico, en V.

E_{conc} = Denota las pérdidas debidas al sobrepotencial de concentración, en V.

Si no se proporciona E_T , se puede suponer que está entre 0,6 y 0,7 V; la mayoría de las pilas de combustible funcionan en esta región [45]. El valor de E_T podría calcularse siempre que se conozca la eficiencia; de lo contrario, es prudente tomar E_T como 0,65 V, y sería una buena aproximación. Sin embargo, si la pila de combustible está presurizada, entonces debería tomarse una estimación algo mayor de E_T .

Potencia generada por una celda.

Una vez que se ha determinado el voltaje de la celda, se puede calcular su potencia, esta se determina usando la siguiente ecuación:

(90)

$$\dot{W}_{cell} = E_T \times J \times A_{cell}$$

Donde:

$\dot{W}_{cell}$ = Potencia de celda unitaria de la pila PEM, en kW.

A_{cell} = Área de una celda en cm^2 .

La potencia generada por toda la pila PEM se determina, multiplicando la potencia de una celda por el número total de celdas que componen la pila, y se expresa mediante la siguiente ecuación:

(91)

$$\dot{W}_{stack} = n_{fc} \times \dot{W}_{cell}$$

Donde:

$\dot{W}_{stack}$ = Potencia de la pila de combustible, en kW.

n_{fc} = Representa el número de celdas en la pila PEM, adimensional.

Hasta esta parte se plantearon y resolvieron las ecuaciones que involucran los voltajes y caídas de tensión en la pila, así como su potencia producida, ahora con estos datos y la estequiometría de hidrógeno y oxígeno de la pila PEM, es posible calcular los consumos de

estos reactivos, así como sus productos que en este caso y bajo las condiciones planteadas al inicio del modelado de esta segunda parte será únicamente agua el producto de las reacciones en la pila.

Determinación de flujos molares y másicos del sistema de pila PEM.

A continuación, se presentan las ecuaciones para el cálculo de los flujos molares y másicos de la pila PEM y sus corrientes secundarias, estas están en base a la potencia producida por la pila y del voltaje total de salida de la misma. En la Tabla 8 se presentan los datos complementarios que se estarán usando para la determinación de dichos flujos, estos son tomados de las referencias [22] y [48].

Tabla 8. Parámetros de empleados para la determinación de los flujos molares y másicos del sistema de pila de combustible PEM del sistema de vehículo híbrido de MCI y pila PEM, tomados de las referencias [22], [25], [39] y [48].

Parámetro	Nomenclatura	Unidades	Rango o valor
Constante de Faraday.	F	C/mol	96485.3
Constante universal de los gases.	R	J/mol*K	8.3144
Estequiometría de hidrógeno.	stH ₂	/	1.2
Estequiometría de oxígeno.	stO ₂	/	2
Peso molecular del oxígeno.	PmO ₂	kg/mol	0.032
Peso molecular del aire.	PmAire	kg/mol	0.02897
Peso molecular de hidrógeno.	PmH ₂	kg/mol	0.002016
Peso molecular de agua.	PmH ₂ O	kg/mol	0.018

Oxígeno usado por la pila PEM.

En el funcionamiento básico de la pila de combustible de hidrógeno, se transfieren cuatro electrones por cada mol de oxígeno, es decir este es el oxígeno que ingresa al cátodo y que se requiere para que ocurra la reacción, por lo tanto, de referencia [44], se tiene que:

$$\dot{N}_{O_2} = stO_2 \left(\frac{1}{4F} \frac{\dot{W}_{stack}}{E_T} \right) \quad (92)$$

Donde:

$\dot{N}_{O_2}$ = Consumo de oxígeno necesario para la pila PEM, en mol/s.

stO₂ = Estequiometria del O₂, en la pila, adimensional.

Para obtener el flujo másico de esta y cualquier corriente que se conozca su flujo molar se utilizará su peso molecular de la especie en cuestión, teniendo cuidado en las unidades y conversiones necesarias para que este sea dado en las unidades deseadas, para el caso del oxígeno tenemos que:

$$\dot{m}O_2 = \dot{N}O_2 * PmO_2 \quad (93)$$

Donde:

$\dot{m}O_2$ = Flujo másico de O₂ que requiere la pila PEM, en kg/s.

PmO_2 = Peso molecular del O₂, en kg/mol.

Flujo de aire de entrada y salida de la pila PEM.

El oxígeno normalmente se suministrará en forma de aire y, por lo tanto, es necesario adaptar las ecuaciones del O₂ al uso de aire. Además, sabemos que el aire ideal está formado por una mezcla de O₂ y N₂, pero el N₂ no genera ninguna reacción en la pila, por ende, se debe tomar en cuenta el radio estequiométrico del O₂ para poder determinar el aire de entrada a la pila, y según [45] esta se determina con la siguiente ecuación:

$$rO_2 = \frac{1}{(1 + 3.76)} = 0.21008403 \quad (94)$$

Donde:

rO_2 = Radio estequiométrico de O₂, para aire ideal y seco, adimensional.

Una vez determinado el radio estequiométrico del O₂, se utiliza la siguiente ecuación propuesta por [44], para determinar el flujo molar de aire de entrada al cátodo, y este será el flujo 17 del sistema:

$$\dot{N}_{Aire,in} = \dot{N}_{17} = \frac{stO_2}{rO_2} \left(\frac{1}{4F} \frac{\dot{W}_{stack}}{E_T} \right) \quad (95)$$

Donde:

$\dot{N}_{Aire,in} = \dot{N}_{17}$ = Flujo molar de aire de entrada al cátodo, en mol/s.

Y para conocer su flujo másico, se multiplica el flujo molar 17 por su peso molecular:

$$\dot{m}_{Aire,in} = \dot{m}_{17} = \dot{N}_{Aire,in} * Pm_{Aire} \quad (96)$$

Donde:

$\dot{m}_{Aire,in} = \dot{m}_{17}$ = Flujo másico de aire de entrada al cátodo de la FC, en kg/s.

Pm_{Aire} = Peso molecular de aire, en kg/mol.

Una vez que se conoce la cantidad de aire que se suministra a la pila PEM, tomado de la atmosfera y por ende a condiciones ambiente, se pueden determinar mediante un análisis simple los flujos molares y másicos de las corrientes 14B (el subíndice B es debido a que en

la primera parte del modelo ya existe un flujo llamado 14), 15 y 16, es decir la línea de suministro de aire a la pila, que comprende desde el aire que succiona el compresor ubicado a la entrada del subsistema, hasta el aire comprimido y enfriado que se suministra al cátodo, esto es posible debido a que no se considera la humedad en aire y a que el humidificador 2 no trabajará en este modelo, ya que se considera aire seco en toda la línea, únicamente variando sus propiedades termodinámicas, por lo tanto, se tiene que:

$$\dot{N}_{17} = \dot{N}_{14B} = \dot{N}_{15} = \dot{N}_{16} \quad (97)$$

Donde:

$\dot{N}_{14B}$ = Flujo molar de aire que ingresa al compresor, en mol/s.

$\dot{N}_{15}$ = Flujo molar de aire comprimido, en mol/s.

$\dot{N}_{16}$ = Flujo molar de aire comprimido y enfriado, en mol/s.

Y análogamente para los flujos masicos se tiene que:

$$\dot{m}_{17} = \dot{m}_{14B} = \dot{m}_{15} = \dot{m}_{16} \quad (98)$$

Donde:

$\dot{m}_{14B}$ = Flujo másico de aire que ingresa al compresor, en kg/s.

$\dot{m}_{15}$ = Flujo másico de aire comprimido, en kg/s.

$\dot{m}_{16}$ = Flujo másico de aire comprimido y enfriado, en mol/s.

A veces es importante distinguir entre el caudal de entrada del aire, y el caudal de salida, esto es particularmente importante al calcular la humedad, que es un problema en ciertos tipos de pilas de combustible, especialmente las pilas de combustible de membrana de intercambio de protones (PEMFC). La diferencia se debe al consumo de oxígeno. Por lo general, habrá más vapor de agua en el aire de salida, pero en esta etapa de la discusión se está considerando el aire seco, de [45] dice que:

$$\dot{m}_{Aire,out} = \dot{m}_{Aire,in} - \dot{m}_{O_2} \quad (99)$$

Y para el flujo molar del aire de salida se tiene que:

$$\dot{N}_{Aire,out} = \frac{\dot{m}_{Aire,out}}{Pm_{Aire}} \quad (100)$$

Donde:

$\dot{m}_{Aire,out}$ = Flujo másico de aire de salida de la pila, considerando aire seco, en kg/s.

$\dot{N}_{Aire,out}$ = Flujo molar de aire de salida de la pila, en mol/s.

Hidrógeno usado por la pila PEM.

La tasa de uso del hidrógeno se deriva de una manera similar a la del oxígeno, excepto que hay dos electrones por cada mol de hidrógeno, y para este sistema es nombrado como la corriente 18, ya que se considera hidrógeno seco, y este ingresa al ánodo de la pila, de [44] se sabe que:

$$\dot{N}_{H_2} = \dot{N}_{18} = stH_2 \left(\frac{1}{2F} \frac{\dot{W}_{stack}}{E_T} \right) \quad (101)$$

Donde:

$\dot{N}_{H_2} = \dot{N}_{18}$ = Flujo molar de H₂ seco que se suministra al ánodo, en mol/s.

stH_2 = Estequiometria de H₂, en la pila, adimensional.

Y al igual que para el oxígeno, se obtiene su flujo másico, con el peso molar del hidrógeno:

$$\dot{m}_{H_2} = \dot{m}_{18} = \dot{N}_{H_2} * Pm_{H_2} \quad (102)$$

Donde:

$\dot{m}_{H_2} = \dot{m}_{18}$ = Flujo másico de H₂ de entrada al ánodo de la pila, en kg/s.

Pm_{H_2} = Peso molecular de hidrógeno, en kg/mol.

Hidrógeno no utilizado.

El hidrógeno que ingresa al ánodo de la pila, se emplea en la reacción química que tiene lugar en la celda, pero debido a distintos factores no todo el H₂ que ingresa es consumido por la pila, y por ende se tiene un flujo de salida de H₂ del ánodo, el cual no realiza ningún proceso ni reacción a su paso, este flujo se retorna a la línea de suministro de la pila, para su reaprovechamiento. En el caso de este modelo se considera que este tendrá las mismas propiedades termodinámica y químicas que el hidrógeno suministrado en la corriente 18 determinada previamente, y se denominará a la corriente de retorno como 19 de acuerdo a la Figura 25; que describe el sistema de pila PEM. En [44] se indica que este flujo de H₂ se puede determinar empleando la siguiente ecuación:

$$\dot{N}_{H_{2,ret}} = \dot{N}_{19} = (stH_2 - 1) \left(\frac{1}{2F} \frac{\dot{W}_{stack}}{E_T} \right) \quad (103)$$

Donde:

$\dot{N}_{H_{2,nu}} = \dot{N}_{19}$ = Flujo molar de H₂, no utilizado en la pila, en mol/s.

De manera análoga a las corrientes anteriores se determinará el flujo másico de esta corriente:

$$\dot{m}H_{2,nu} = \dot{m}_{19} = \dot{N}H_{2,nu} * PmH_2 \quad (104)$$

Donde:

$\dot{m}H_{2,nu} = \dot{m}_{19}$ = Flujo másico de H₂, no utilizado en el ánodo de la pila, en kg/s.

Por lo tanto el flujo total de hidrógeno que debe ser enviado a la pila PEM, se determina analizando la Figura 25, donde se observa que la línea de suministro de H₂ se compone de tres corrientes es decir el que consume la pila, el que se recircula y el que debe ser enviado desde la línea de producción del sistema de MCI, esto se puede traducir en una ecuación aplicando el principio de conservación de la masa para estado estable al punto de reunión de estas tres corrientes, quedando de la siguiente manera:

$$\dot{m}H_{2,req} = \dot{m}_{18} - \dot{m}_{19} \quad (105)$$

$\dot{m}H_{2,req}$ = Flujo másico de hidrógeno que se envía de la línea de suministro de la pila, en kg/s.

Tasa de producción de agua en la pila PEM.

En una celda de combustible alimentada con hidrógeno, el agua se produce a razón de un mol por cada dos electrones, para este sistema, este corresponde a la corriente denominada con el número 20, y se considera agua líquida a 80 °C y saliendo a presión atmosférica; se puede expresar mediante la siguiente ecuación:

$$\dot{N}H_2O = \dot{N}_{20} = \left(\frac{1}{2F} \frac{\dot{W}_{stack}}{E_T} \right) \quad (106)$$

Donde:

$\dot{N}H_2O = \dot{N}_{20}$ = Flujo molar de agua generada, en la pila, en mol/s.

Y para su flujo másico se tiene que:

$$\dot{m}H_2O = \dot{m}_{20} = \dot{N}H_2O * PmH_2O \quad (107)$$

Donde:

$\dot{m}H_2O = \dot{m}_{20}$ = Flujo másico de agua generada, en la pila, en mol/s.

PmH_2O = Peso molecular de agua, en kg/mol.

En una pila de combustible alimentada con hidrógeno, la tasa de producción de agua es aproximadamente estequiométrica. Por lo tanto, como una guía aproximada, una celda de combustible de 1 kW producirá aproximadamente 0.5 L de agua por hora [45].

En el modelo se considera que la pila es seca, es decir que ni el H_2 ni el aire que ingresan tienen humedad, y por ende el único flujo de agua es el agua que se genera en la reacción, tal como se muestra en la ecuación 70 referente a la estequiometría de la pila PEM en general, siendo este el único producto de la reacción además de la energía y el calor.

Si se analiza el sistema es evidente que a la salida del cátodo tendremos una corriente mezclada de aire húmedo y agua líquida una vez que se satura el aire, dicha mezcla estará a la temperatura de operación de la pila y a presión atmosférica. Para este caso nosotros únicamente consideraremos la corriente 20 como un flujo de agua líquida a $80\text{ }^{\circ}\text{C}$, esto para facilitar los cálculos posteriores, si se desea una vez modelada la pila PEM de manera seca se puede agregar las condiciones de humedad necesarias.

Modelado de componentes auxiliares del sistema de pila PEM.

A este punto se determinaron los valores de flujo másico y molares de la pila PEM y de sus componentes auxiliares de las líneas de aire e hidrógeno, respectivamente, es decir de los estados que van del número 14B a el número 20 del sistema, por lo tanto, se procederá a calcular sus propiedades termodinámicas. Hasta este punto es posible determinar las propiedades termodinámicas de los estados, 14B, 15, 18, 19 y 20, pero no los de los estados 16, 17 y 20S, este último referente a las propiedades del agua de salida del subsistema.

Para esto es necesario, analizar los componentes auxiliares de la pila, como lo son el compresor de aire y el intercambiador de calor HEX_2 , lo cual se realiza a continuación. En la siguiente Tabla 9 se muestran los parámetros de entrada utilizados en el modelado de los componentes auxiliares.

Tabla 9. Parámetros de entrada utilizados para el modelado de los componentes auxiliares del sistema de pila PEM, tomados de las referencias [22], [42], [39] y [48].

Parámetro	Nomenclatura	Unidades	Rango o valor
Eficiencia isotérmica del compresor.	η_c	%	85
Presión de aire de entrada.	P_{14B}	kPa	101.325
Temperatura de aire de entrada.	T_{14B}	$^{\circ}\text{C}$	25
Calor Específico de aire de entrada.	C_{pAire}	$\text{kJ/kg}\cdot\text{K}$	1.005
Relación de C_p/C_v de aire de entrada.	K_{Aire}	/	1.4
Presión de estado 15.	P_{15}	bar	2
Efectividad del intercambiador de calor 2.	ε_{HEX2}	/	0.8
Potencia consumida por ventilador.	$\dot{W}_{fan}$	kW	5
Potencia consumida bomba del refrigerante.	$\dot{W}_{cp}$	kW	5

Compresor de aire.

Este succiona aire seco a condiciones ambiente y eleva su presión a la presión de la línea de cátodo, es decir 2 bar. Para conocer la temperatura de salida de este aire comprimido, es decir T_{15} en el modelo, se hace uso de la definición de eficiencia isoentrópica para un compresor, la cual se desarrolla y presenta en [49], donde se formula la temperatura real de salida del

aire de un compresor en función de su relación de presiones y su eficiencia. Quedando de la siguiente forma:

$$T_{15} = T_{14B} \left[1 + \frac{r_C^{\gamma_a} - 1}{\eta_C} \right] \quad (108)$$

Para la relación de presiones, es decir la relación de compresión del aire, se tiene que:

$$r_C = \frac{P_{15}}{P_{14B}} \quad (109)$$

Además de la relación de presiones es conveniente, calcular un factor adimensional, que involucra el exponente adiabático K del aire, al cual se eleva la relación de presiones en la ecuación para el cálculo de la eficiencia del compresor, llamado γ_a , el cual queda definido como:

$$\gamma_a = \frac{(K_{Aire} - 1)}{K_{Aire}} = 0.2857 \quad (110)$$

Donde:

T_{15} = Temperatura de aire de salida del compresor, en K.

T_{14B} = Temperatura de aire de entrada al compresor, en K.

r_C = Relación de compresión, adimensional.

η_C = Eficiencia isoentrópica del compresor, en decimales.

γ_a = Relación del exponente adiabático del aire, adimensional.

Intercambiador de calor HEX₂.

Al igual que en la primera parte de este capítulo, en la que se analiza el intercambiador de calor HEX₁, se planteó la posibilidad de utilizar el concepto de efectividad, con el fin de conocer las temperaturas de salida de la corriente fría y caliente, respectivamente, que fluyen por el sistema de intercambiador, se supondrá una efectividad de 0.8 para este intercambiador de calor HEX₂, y se utilizarán exactamente las mismas ecuaciones, y metodologías propuestas utilizadas, en el modelado del intercambiador de calor 1.

Si se definen las corrientes en función de su temperatura, se tiene que:

T_{20} = Temperatura de entrada de la corriente fría, siendo esta H₂O, y expresada en K.

T_{20S} = Temperatura de salida de la corriente fría, siendo este H₂O, y expresada en K.

T_{15} = Temperatura de entrada de la corriente caliente, siendo este aire, y expresado en K.

T_{16} = Temperatura de salida de la corriente caliente, siendo este aire, y expresado en K.

Una vez realizado el cálculo de las capacidades caloríficas, se encontró que la capacidad calorífica mínima es $C_{min} = C_c$, es decir de la corriente de agua, ya que dadas las condiciones del análisis resultó ser el menor de los valores de capacidad calórica, por lo tanto, la ecuación 52 para la efectividad del intercambiador de calor HEX_2 , se puede expresar como:

$$\varepsilon_{HEX2} = \frac{(T_{20} - T_{20S})}{(T_{15} - T_{20})} \quad (111)$$

Donde:

ε_{HEX2} = Efectividad del intercambiador de calor HEX_2 , adimensional.

De esta parte se conoce, la temperatura T_{20S} , que corresponde al valor del agua de salida del sistema, y dicha agua se descarga al ambiente en forma líquida.

Balance de energía para el HEX_2 .

Aplicando la primera ley de la termodinámica, a HEX_2 y haciendo los respectivos arreglos, queda la siguiente ecuación:

$$C_h (T_{15} - T_{16}) = C_c (T_{20S} - T_{20}) \quad (112)$$

De esta última expresión se determina el valor de la temperatura T_{16} , que es la temperatura del aire que se enviará al cátodo de la pila, ya que los humidificadores no están funcionando para este análisis, por lo tanto, se conoce en automático el valor de la temperatura T_{17} .

Una vez determinadas estas temperaturas, se pueden calcular las propiedades de los estados faltantes es decir 16, 17 y 20S, y con esto se completa el modelo termodinámico de la pila PEM.

Potencia neta de salida del sistema de la pila de combustible PEM.

La potencia neta obtenida de la pila PEM, se puede obtener, si se restan los consumos de potencia de los equipos auxiliares del sistema de la pila, para este caso son el ventilador de circulación de aire para el sistema de enfriamiento, la bomba de circulación de refrigerante y un compresor de aire, por lo tanto, la potencia neta de salida de la pila queda determinada como:

$$\dot{W}_{FC} = \dot{W}_{stack} - \dot{W}_{comp} - \dot{W}_{cp} - \dot{W}_{fan} \quad (113)$$

Donde:

$\dot{W}_{FC}$ = Potencia neta total de salida de la pila PEM, en kW.

$\dot{W}_{comp}$ = Es la potencia consumida por el compresor, en kW.

$\dot{W}_{cp}$ = Es la potencia de la bomba de circulación del refrigerante, en kW.

$\dot{W}_{fan}$ = Potencia consumida por el ventilador, en kW.

Análisis energético del sistema de pila PEM.

Producción de calor de la pila PEM.

Cuando funciona una pila de combustible, no toda la energía se convierte en trabajo, únicamente una parte, y el resto representa la energía que se transforma en forma de calor.

En [45], se propone que se puede estimar el calor generado de una pila PEM de hidrógeno; para una pila de n celdas, de acuerdo a la siguiente ecuación, en base a su potencia eléctrica y su voltaje de salida, y está dado por:

$$\dot{Q}_{FC} = \dot{W}_{FC} \left(\frac{1.25}{E_T} - 1 \right) \quad (114)$$

$\dot{Q}_{FC}$ = Calor producido por el sistema de pila PEM, en kW.

Eficiencia energética de la pila PEM.

La eficiencia energética general del sistema de pila de combustible PEM, se puede determinar cómo se plantea en [12] y [43] y recordando la suposición que los productos de la pila son agua líquida, por lo que se tiene que:

$$\eta_{FC} = \frac{\dot{W}_{FC}}{\dot{m}_{18}LHV_{H_2} - \dot{m}_{19}LHV_{H_2}} \quad (115)$$

Donde:

η_{FC} = Eficiencia energética del sistema de pila PEM, en decimales.

LHV_{H_2} = Poder calorífico inferior de H_2 , en forma de gas, en kJ/kg de H_2 .

Análisis exergético del sistema de pila PEM.

En esta parte se calcularán las exergías de flujo de las corrientes que van de la 15 al 20s del sistema de pila PEM, para esto se empleará la ecuación 10, que se planteó al inicio de este capítulo, y una vez más al igual que en la primera parte del modelo, se tomará únicamente el aporte de la exergía física, y se depreciarán las partes que contribuyen la componente cinética, potencial y química, está última a excepción de donde sea necesario. Se tomarán los mismos valores de referencia ambiente que se utilizaron en la primera parte de este capítulo.

Destrucción de exergía térmica del sistema de pila PEM.

Para determinar la tasa de destrucción de exergía térmica en la pila, se utiliza la ecuación 12 de la primera parte de este capítulo, donde se supondrá una temperatura de pared de la pila, para el cálculo del factor de Carnot, dicha ecuación adaptada a la pila, y expresada en forma de tasa del calor de desecho de la pila, queda de la siguiente manera:

$$\dot{E}x_{QFC} = \left(1 - \frac{T_0}{T_{pFC}}\right) \dot{Q}_{FC} \quad (116)$$

Donde:

$\dot{E}x_{QFC}$ = Tasa de destrucción de exergía térmica de la pila PEM, en kW.

T_0 = Temperatura de ambiente de referencia, en K.

T_{pFC} = Temperatura de la pared de la pila de combustible, en K.

Destrucción de exergía del sistema de pila de combustible PEM.

Aplicando la ecuación 10, para balance de exergía en estado estable a la pila PEM como volumen de control, se tiene que:

$$\dot{m}_{H_2} ex_{H_2} = \dot{m}_{20} ex_{20} + \dot{W}_{FC} + \dot{E}x_{QFC} + \dot{E}x_{dFC} \quad (117)$$

Donde:

ex_{H_2} = Exergía total de la corriente de H_2 que se suministra a la pila, en kJ/kg de H_2 .

ex_{20} = Exergía de flujo de la corriente de agua que sale del sistema de pila, en kJ/kg de H_2O .

$\dot{E}x_{dFC}$ = Se refiere a la destrucción de exergía del sistema de pila PEM, en kW.

En esta ecuación, se desprecia el aporte de las corrientes de aire ya que están a las mismas condiciones que los valores de referencia ambiente, y la exergía de H_2 es la suma del poder calorífico inferior de H_2 más la componente de la exergía de flujo de la corriente de suministro de H_2 .

Determinación de la eficiencia exergética de la pila PEM.

La eficiencia exergética de la pila, se calcula según [43], como el producto obtenido entre el recurso energético que ingreso al sistema, para la pila PEM, se calcula de la siguiente manera:

$$\psi_{FC} = \frac{\dot{W}_{FC}}{\dot{m}_{18} ex_{18} - \dot{m}_{19} ex_{19}} \quad (118)$$

ψ_{FC} = Eficiencia exergética del sistema de pila PEM, en decimales.

Donde, los valores de las exergías de la ecuación 118, se consideran los valores de exergía total de las corrientes, que aportan energía al sistema, y al tratarse de un sistema reactivo se considera su poder calorífico inferior más su exergía de flujo de la corriente en cuestión, para el H_2 .

4.1.4 Modelado del sistema global de vehículo híbrido de MCI y pila PEM.

Una vez que se han modelado las dos fuentes de potencia de las que consta este vehículo, se procede a juntar la información y a calcular los parámetros que terminen de caracterizar y

validar el modelado del sistema global de propulsión general del vehículo, dichos parámetros son la destrucción de exergía del sistema general, la eficiencia energética y la eficiencia exergética del sistema global.

Destrucción de exergía del sistema global.

Para llevar a cabo este cálculo, se analiza el vehículo como un volumen de control, limitando el análisis a los flujos de masa y exergía que cruzan las fronteras de este sistema, y se aplica la ecuación 10 del balance de exergía a este volumen de control, donde se desprecian los flujos de aire debido a que sus condiciones son las mismas que el ambiente de referencia planteado al inicio del capítulo, por lo se tiene que:

$$\dot{m}_2 ex_{NH_3} = \dot{m}_7 ex_7 + \dot{m}_{13} ex_{13} + \dot{W}_{ICE} + \dot{E}x_{QICE} + \dot{m}_{20} ex_{20} + \dot{W}_{FC} + \dot{E}x_{QFC} + \dot{E}x_{dSIS} \quad (119)$$

Donde:

ex_{NH_2} = Exergía total de la corriente de NH_3 que se suministra al sistema, en kJ/kg de NH_3 .

ex_7 = Exergía de flujo de la corriente de nitrógeno que sale del sistema, en kJ/kg de N_2 .

$\dot{E}x_{dSIS}$ = Se refiere a la tasa de destrucción de exergía del sistema global, en kW.

Eficiencia energética del sistema global.

La eficiencia energética del sistema de propulsión se define como la potencia total generada del sistema, es decir la suma de la potencia neta de salida del sistema de MCI, más la parte del sistema de pila de combustible PEM, entre el recurso suministrado al sistema, en este caso el NH_3 , y según [12] se determina de la siguiente manera:

$$\eta_{SIS} = \frac{\dot{W}_{ICE} + \dot{W}_{FC}}{\dot{m}_2 HHV_{NH_3}} \quad (120)$$

Donde:

η_{SIS} = Eficiencia energética del sistema global, en decimales.

HHV_{NH_3} = Poder calorífico de NH_3 , en forma líquida, en kJ/kg de NH_3 .

Eficiencia exergética del sistema global.

La eficiencia exergética del sistema global, se calcula según [22], como el producto obtenido entre el recurso energético que ingreso al sistema, para el sistema global, se tiene que:

$$\psi_{SIS} = \frac{\dot{W}_{SIS} + \dot{W}_{FC}}{\dot{m}_2 ex_2} \quad (121)$$

Donde:

ψ_{SIS} = Eficiencia exergética del sistema global, en decimales.

Donde, los valores de la exergía en esta ecuación se tratan de los valores de exergía total de las corrientes que aportan exergía al sistema, y al tratarse de un sistema reactivo se considera su poder calorífico superior más su exergía de flujo de la corriente en cuestión, para el NH_3 .

4.2 Validación.

4.2.1 Comparación de resultados con modelo de referencia.

Según [12] se requiere una investigación más profunda del sistema para evaluar el desempeño de manera integral, para así poder determinar las condiciones óptimas de operación y los mejores parámetros de diseño. Para poder llevar a cabo la validación del modelo seleccionado para esta investigación, se valorarán los resultados obtenidos en [22] sin optimizar, es decir el caso base con los valores iniciales o de diseño, también usados en este trabajo. Como nota se añade que para poder completar la validación del modelo se tomaron distintos datos considerados como de diseño o lo más cercano posible a la operación de este sistema de otras investigaciones, cada dato extra tomado para el modelo se indica con su respectiva referencia. Esto lógicamente creó algunas discrepancias coherentes en los resultados obtenidos en la validación del modelo con el sistema original, ya que no se utilizaron los mismos datos de entrada, debido a no estar reportados tales datos. A continuación, se muestran en la Tabla 10 algunos datos del caso base utilizados en ambos modelos, para el MCI, la pila PEM, el DSU y el tanque de NH_3 .

Tabla 10. Algunos datos de operación del sistema MCI, DSU y pila PEM, los cuales fueron utilizados para la validación del modelo de referencias [12] y [22].

Parámetro	Unidades	Caso base [12]	Utilizado en la validación del modelo
Tipo de combustible del sistema.	-	NH_3	NH_3
Área total de la una celda de la pila.	cm^2	900	900
Densidad de corriente de la pila.	mA/cm^2	1150	1150
Tasa de flujo de NH_3 , tanque -válvula.	mol/min	73.3	73.3
H_2 generado a bordo, en DSU.	mol/min	6.246	6.246
Temperatura ambiente.	$^{\circ}\text{C}$	25	25
Temperatura de operación de la pila.	$^{\circ}\text{C}$	70	70
Tasa de flujo de H_2 suministrado al MCI.	mol/min	3.32	3.32
Capacidad del tanque de combustible.	L	84.5	/
Autonomía esperada con tanque lleno.	km	600	/
Relación de masa de hidrógeno a amoníaco suministrado al MCI.	%	1	1

Para validar el modelo, se comparan los datos obtenidos más relevantes reportados en el trabajo de referencia calculados con los parámetros iniciales de la Tabla 10, es decir el caso base o de partida de diseño, con los datos obtenidos en la validación del modelo con algunos parámetros diferentes debido a la problemática previamente descrita, y esto se reporta en la Tabla 11, como se muestra a continuación:

Tabla 11. Comparación de parámetros importantes para la validación del modelo de vehículo híbrido de MCI-pila PEM, tomados de [12] y [22].

Parámetro	Símbolo	Unidades	Caso base en [12]	Obtenido en la validación del modelo
Potencia desarrollada por el MCI.	$\dot{W}_{ICE}$	kW	119.02	118
Potencia total de la pila PEM.	$\dot{W}_{FC}$	kW	98.32	103
Tasa de flujo molar de NH_3 , suministrado.	$\dot{N}_2$	mol/min	73.3	73.3
H_2 generado a bordo, en DSU.	$\dot{N}_6$	mol/min	6.246	6.246
Tasa de flujo molar de H_2 suministrado al MCI.	$\dot{N}_9$	mol/min	3.32	3.32
Eficiencia energética del MCI.	η_{ICE}	%	36.9	44
Eficiencia exergética del MCI.	ψ_{ICE}	%	34.6	43
Eficiencia energética de la pila.	η_{FC}	%	42	41
Eficiencia exergética de la pila.	ψ_{FC}	%	42.2	41
Eficiencia energética del sistema general.	η_{SIS}	%	37	45
Eficiencia exergética del sistema general.	ψ_{SIS}	%	35	45
Exergía destruida en el MCI.	$\dot{E}xd_{ICE}$	kW	195	65.96
Exergía destruida en la pila PEM.	$\dot{E}xd_{FC}$	kW	127	127.5
Exergía destruida en el sistema en general.	$\dot{E}xd_{SIS}$	kW	340	190.4
Calor suministrado al DSU, NH_3 .	$Q\Delta h_{DSU}$	kW	28	26.01
N_2 generado en DSU.	$\dot{N}_7$	mol/min	18.1	20.22

Algunas de las variaciones respecto a los resultados son debidas a que en la referencia [12] no se reportan todos los datos necesarios para validar el modelo al 100%, así como las suposiciones de la potencia máxima en el MCI, se toman de diferente manera siendo 119.02 kW la potencia máxima del MCI si se suministra completamente el flujo de NH_3 , es decir N[4], cosa que en el modelo realizado en este trabajo no ocurre, para el caso base. Además de que se desconoce el sistema de referencia de la temperatura para medir las propiedades de entalpía y entropía del sistema.

4.2.2 Propiedades termodinámicas de las corrientes del sistema.

En cuanto a las propiedades termodinámicas que caracterizan las corrientes del sistema se obtuvieron los siguientes valores, que caracterizan el sistema en general, y se muestran en la Tabla 12; bajo los datos de entrada, las suposiciones y el modelado previamente descritos.

Tabla 12. Propiedades termodinámicas de las corrientes del sistema de vehículo de MCI y pila PEM obtenidas en el modelado y referenciadas a 0°C. *nr = No reportado. Entalpías y entropías calculadas a la temperatura de referencia de 0 [°C] o 273.15 [K], tanto para sustancias puras como para gases ideales del sistema (ver apéndice A).

Propiedades termodinámicas y flujos de las corrientes del sistema									
Estado	Sustancia	Fórmula	Flujo molar [mol/min]	Flujo másico [kg/s]	Presión P [Kpa]	Temperatura T[K]	Entalpía h[kJ/kg]	Entropía s[kJ/kg]	Exergía [kW]
0					101.325	298.15			
1	Amoníaco	NH ₃	73.3	0.0208	1700	293.2	294.3	1.326	320.7
2	Amoníaco	NH ₃	73.3	0.0208	250	259.5	294.3	1.371	307.4
3	Amoníaco	NH ₃	34	0.00965	250	259.5	294.3	1.371	307.4
4	Amoníaco	NH ₃	39.3	0.1116	250	259.5	294.3	1.371	307.4
5	Amoníaco	NH ₃	34	0.00965	250	294.3	1529	6.109	129.2
6	Hidrógeno	H ₂	6.246	0.0002099	250	873.15	8720	16.84	3714
7	Nitrógeno	N ₂	20.22	0.00944	101.325	873.15	646.2	1.24	277.5
8	Hidrógeno	H ₂	6.246	0.0002099	250	382.2	1569	4.83	144.3
9	Hidrógeno	H ₂	3.32	0.0001116	250	382.2	1569	4.83	144.3
10	Hidrógeno	H ₂	2.926	0.00009831	250	382.2	1569	4.83	144.3
11	Hidrógeno	H ₂	2.926	0.00009831	200	382	1569	4.83	146.8
12	Productos de combustión	Mezcla	200	0.08257	101.325	1173.15	1210	1.913	640.4
13	Productos de combustión	Mezcla	200	0.08257	101.325	840.7	715.9	1.437	288.9
14	Aire	Mezcla	147.7	0.0713	101.325	298.15	25.1	0.08793	0
15	Aire	Mezcla	275.7	0.1331	200	373.4	100.9	0.3146	8.181
16	Aire	Mezcla	275.7	0.1331	200	364.6	91.99	0.2906	6.474
17	Aire	Mezcla	275.7	0.1331	200	364.6	91.99	0.2906	6.474
18	Hidrógeno	H ₂	69.51	0.002336	200	382	1565	4.822	143.6
19	Hidrógeno	H ₂	11.59	0.0003893	200	382	1565	4.822	143.6
20	Vapor de agua	H ₂ O	57.93	0.01739	101.3	353.2	335	1.075	18.94
21	Ethylene glycol	/	*nr	*nr	*nr	*nr	*nr	*nr	*nr
22	Ethylene glycol	/	*nr	*nr	*nr	*nr	*nr	*nr	*nr
23	Ethylene glycol	/	*nr	*nr	*nr	*nr	*nr	*nr	*nr

4.2.3 Flujos energéticos de las corrientes del sistema.

En cuanto a los flujos energéticos de los componentes del sistema se obtuvieron los siguientes resultados, que caracterizan el sistema en general, y se muestran en la Tabla 13; bajo los datos de entrada, las suposiciones y el modelado previamente descritos.

Tabla 13. Flujos energéticos de los componentes del vehículo híbrido, obtenidas en el modelado del sistema de vehículo híbrido MCI y pila PEM. *nr = No reportado.

Flujos de energía y potencia del sistema y sus componentes.						
Estado	Componente	Símbolo	Potencia [kW]	Rendimiento o eficiencia energética [%]	Rendimiento o eficiencia exergética [%]	Descripción
24	Pila PEM	$\dot{W}_{FC}$	96.64	0.4139	0.4134	Línea de potencia generada en la pila que se suministra al PCU.
25	PCU	/	*nr	No aplica	No aplica	Línea de potencia que suministra energía a los componentes del sistema que lo requieren por medio de la unidad de control PCU.
26	Compresor	$\dot{W}_C$	10.6	85	*nr	Energía necesaria para el funcionamiento del compresor de la pila PEM.
27	Ventilador	$\dot{W}_{Fan}$	5	85	*nr	Línea de potencia para el funcionamiento del ventilador del sistema de enfriamiento de la pila PEM.
28	Bomba	$\dot{W}_{Cp}$	5	85	*nr	Línea de potencia que suministra energía a la bomba de circulación del refrigerante de FC.
29	Motor eléctrico	/	*nr	*nr	*nr	Potencia entregada al motor eléctrico para impulso del vehículo.
30	PCU	/	*nr	*nr	*nr	Línea de potencia que suministra energía al PCU para ser enviada a la batería.
31	Batería	/	20	90	*nr	Línea de potencia que se suministra a la batería por el motor eléctrico para ser recargada a bordo.
32	Motor de combustión interna	$\dot{W}_{ICE}$	118	0.4423	0.4367	Potencia entregada por el MCI.

5 *Análisis del sistema bajo diversos escenarios.*

Una vez que se ha modelado y validado el sistema, se procederá a realizar un análisis de los principales parámetros del sistema variando los más importantes, para poder ver su comportamiento bajo diversos casos de funcionamiento, así como conocer sus limitaciones y posibles mejoras a futuro.

5.1 Potencia del MCI (todo lo demás fijo, caso de referencia).

A continuación, se lleva a cabo una variación de la potencia del MCI, tomando en cuenta los distintos modelos de vehículo promedio convencionales del mercado, clasificados por su potencia. Para desarrollar esto se clasificarán en tres categorías que son:

Vehículos pequeños de (70 a 90 kW).

Estos por lo general son vehículos compactos de baja cilindrada, diseñados para su conducción en ciudades, y no para transportar carga, por lo general son económicos, como ejemplo se tiene:

- Chevrolet Spark 2021 98 HP (73.07 kW) [50].
- Ford Figo 2021 121HP (90.22 kW) [51].
- Nissan Versa Sense TM 2022 118 HP (87.99 kW) [52].

Por lo anterior se tomará la potencia de 90 kW para el sistema de vehículo híbrido de MCI y pila PEM, y se verá el comportamiento del mismo, variando la potencia original del modelo.

Vehículos medianos de (100 a 118 kW).

Para este caso se toman en cuenta vehículos compactos de un poco más de potencia que los pequeños, pero sin llegar a las prestaciones de un transporte de carga como una camioneta o van, como ejemplo se tiene lo siguiente:

- VW Jetta 2022 150 HP (111.85 kW) [53].
- Mazda 3 Sedán i Sport MHEV 2022 153 HP (114.9 kW) [54].
- Kia Forte FE 2022 147 HP (109.61 kW) [55].

En esta categoría se encuentra el vehículo híbrido de MCI y pila PEM modelado, por lo tanto, este será tomado con sus 118 kW del modelo original y el que se analizó aquí.

Vehículos tipo SUV (130 a 170 kW).

Los vehículos tipo SUV (Sports Utility Vehicle), son un coche similar a una miniván o una furgoneta, pero con un aspecto mucho más resistente y un diseño adecuado para la conducción fuera del camino [56], como ejemplo se tienen los siguientes:

- Nissan X-Trail 2022 169 HP (126 kW) [57].
- SUV Ford Escape Híbrida 2022 198 HP (147.64 kW) [58].
- Toyota RAV4 Hybrid 2022 219 HP (163.3 kW) [59].

En el caso del sistema de vehículo híbrido de MCI y pila PEM, modelado y desarrollado en este trabajo está diseñado para ser compacto, ya que por limitantes del modelado la potencia

máxima de salida es aproximadamente de 165 kW, misma que se variará en el sistema para observar el comportamiento del mismo bajo ciertas condiciones de flujo. Al realizar la variación de la potencia de MCI en el sistema se obtuvieron los siguientes resultados, mostrados en la Tabla 14, y se ilustran en la Figura 27.

Tabla 14. Resultados obtenidos en el sistema al variar la potencia de salida del MCI.

Parámetro	Símbolo	Unidad	Valor con $\dot{W}_{ICE} = 90$ [kW]	Valor con $\dot{W}_{ICE} = 118$ [kW]	Valor con $\dot{W}_{ICE} = 165$ [kW]
Potencia total de pila PEM.	$\dot{W}_{FC}$	kW	96.64	96.64	96.64
Eficiencia energética de MCI.	η_{ICE}	%	33.73	44.23	61.85
Eficiencia exergética de MCI.	ψ_{ICE}	%	33.30	43.67	61.06
Eficiencia energética de pila PEM.	η_{FC}	%	41.39	41.39	41.39
Eficiencia exergética de pila PEM.	ψ_{FC}	%	41.34	41.34	41.34
Eficiencia energética del sistema general.	η_{SIS}	%	39.87	45.85	55.89
Eficiencia exergética del sistema general.	ψ_{SIS}	%	39.33	45.23	55.14
Exergía destruida en el MCI.	$\dot{E}x_{d_{ICE}}$	kW	75.52	65.96	49.91
Exergía destruida en la pila PEM.	$\dot{E}x_{d_{FC}}$	kW	127.5	127.5	127.5
Exergía destruida en el sistema en general.	$\dot{E}x_{d_{SIS}}$	kW	199.9	190.4	174.3

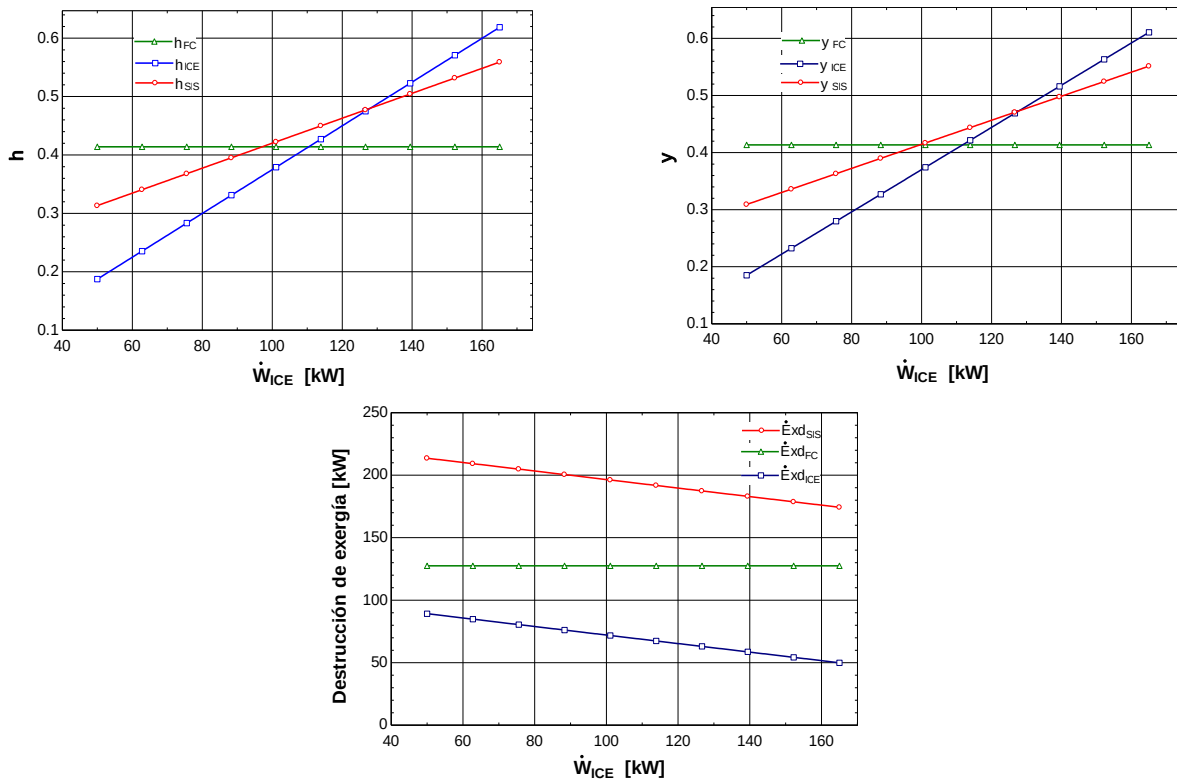


Figura 27. Variación de la eficiencia energética, exergética y destrucción de exergía del MCI y pila PEM, así como del sistema general, variando la potencia de salida del MCI.

En la Figura 27, se observa que, las eficiencias energética y exergética del MCI y del sistema global, tienden a crecer de manera lineal, a medida que la salida de la potencia del motor aumenta, esto debido a que se obtiene un mejor rendimiento del recurso utilizado en el sistema, es decir, con el mismo recurso se obtiene más potencia (flujo de NH_3 fijo). Por ende, la destrucción de exergía del MCI y del sistema global, tiende a disminuir a medida que se tiene un mayor aprovechamiento del recurso disponible. Mientras que la eficiencia y la destrucción de exergía de la Pila PEM, se mantienen constantes, como era de esperarse, debido a que, la potencia de salida del MCI no impacta en estos parámetros.

5.2 potencia de la pila PEM (todo lo demás fijo, caso de referencia).

Para observar el comportamiento de la pila PEM en el sistema, se procederá a fijar la potencia de salida del MCI, para el caso de un vehículo mediano de 118 kW, como originalmente se modeló el sistema, y se procederá a variar la potencia de la pila, considerando los diferentes dispositivos de pila PEM que hay en el mercado capaces de impulsar un vehículo, algunos de los cuales se mencionan en [45]. Se toma como punto de partida una pila de 50 kW, otra de 100 kW y por último una de 150 kW. Dicho lo anterior, se procede a analizar cómo se comporta el sistema general con esta variación.

La potencia de la pila no se da como dato de entrada al sistema, si no que se determina a partir del modelo, ésta depende de la densidad de corriente, el área de la celda, el número de celdas y el voltaje total de salida de las celdas, por lo tanto, se ha decidió variar la densidad de corriente a manera que se obtenga la potencia de salida deseada. En la Tabla 15, se reportan los resultados obtenidos y en la Figura 28, se observan cómo se comportan los principales parámetros del sistema con estos cambios ya mencionados.

Tabla 15. Resultados obtenidos en el sistema al variar la potencia de salida de la pila PEM, logrado al hacer variar la densidad de corriente y con la potencia de MCI fija a 118 kW.

Parámetro	Símbolo	Unidad	Valor con $\dot{W}_{FC}= 50$ [kW]	Valor con $\dot{W}_{FC}= 100$ [kW]	Valor con $\dot{W}_{FC}= 150$ [kW]
Potencia total de MCI.	$\dot{W}_{ICE}$	kW	118	118	118
Densidad de corriente.	J	A/cm ²	0.623	1.189	1.786
Eficiencia energética de MCI.	η_{ICE}	%	44.23	44.23	44.23
Eficiencia exergética de MCI.	ψ_{ICE}	%	43.67	43.67	43.67
Eficiencia energética de pila PEM.	η_{FC}	%	39.57	41.43	41.37
Eficiencia exergética de pila PEM.	ψ_{FC}	%	39.53	45.94	41.32
Eficiencia energética del sistema general.	η_{SIS}	%	35.90	46.57	57.25
Eficiencia exergética del sistema general.	ψ_{SIS}	%	35.42	45.94	56.48
Exergía destruida en el MCI.	$\dot{E}x_{d_{ICE}}$	kW	65.96	65.96	65.96
Exergía destruida en la pila PEM.	$\dot{E}x_{d_{FC}}$	kW	71.93	131.70	197.10
Exergía destruida en el sistema en general.	$\dot{E}x_{d_{SIS}}$	kW	242	186.60	130.80

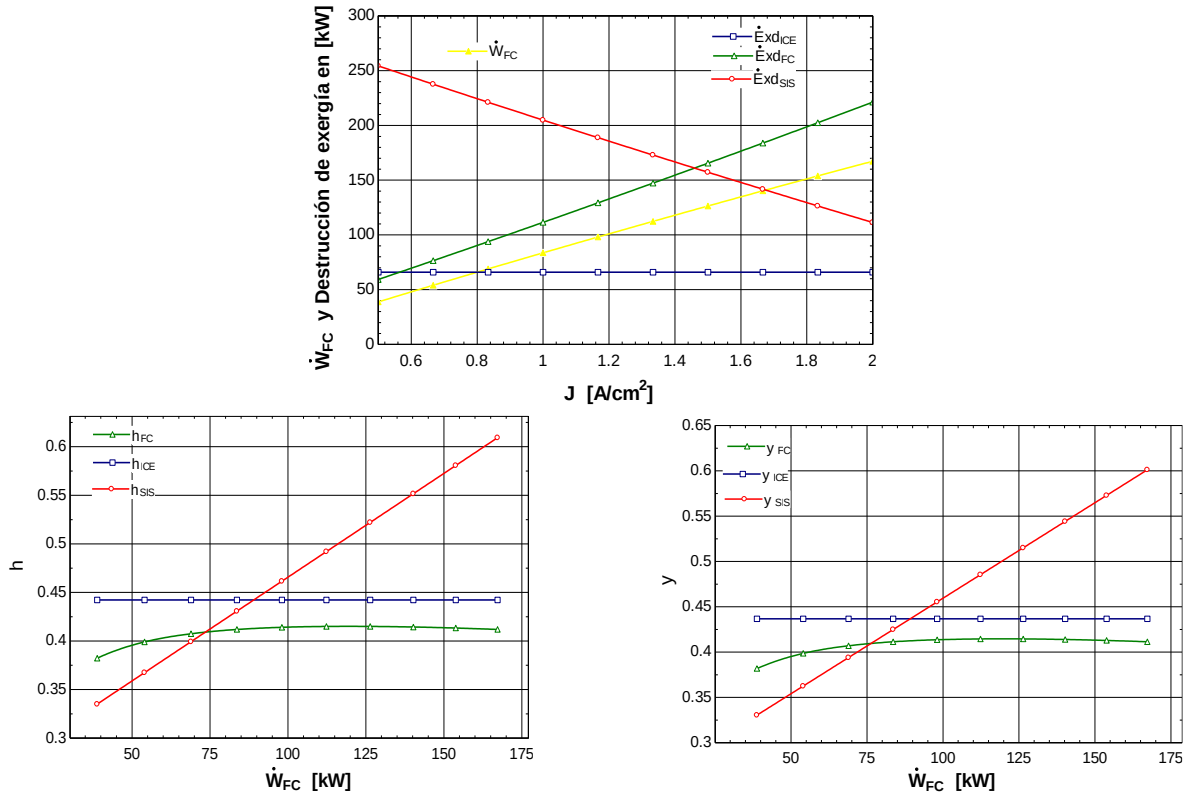


Figura 28. Potencia de salida de la pila PEM al variar la densidad de corriente. Así como la variación de la eficiencia energética, exergética, y la destrucción de exergía del MCI, de la pila PEM y del sistema general respectivamente, al variar la potencia de salida de la pila PEM.

En la Figura 28, se observa que, la salida de potencia de la pila PEM, aumenta de manera lineal, a medida que se incrementa la densidad de corriente que fluye a través de la pila. En cuanto a la destrucción de exergía de la pila PEM, se puede observar que, esta aumenta de forma lineal, conforme aumenta la potencia de la pila, esto es debido a que, si se manda más densidad de corriente, también aumenta el consumo de H_2 en la pila. En cuanto al sistema global, la destrucción de exergía disminuye, de manera lineal, a medida que aumenta la potencia de salida de la pila PEM, ya que la destrucción del sistema global se determinó mediante un balance de exergía como un volumen de control, y, por lo tanto, no se tiene en cuenta el incremento del consumo de H_2 en la pila, esto se observa en la ecuación 119.

En cuanto a la eficiencia energética y exergética de la pila PEM aumentan de manera exponencial, pero posteriormente estas tienden a disminuir, a medida que aumenta la potencia de salida de la pila, debido a que se incrementa el consumo de H_2 de la pila, esto se observa también en las ecuaciones 115 y 118, respectivamente. Más no así las eficiencias globales del sistema, las cuales aumentan de manera lineal, a medida que se incrementa la salida de potencia de la pila PEM, ya que, como se mencionó anteriormente no consideran el incremento en el consumo de H_2 . El MCI no se ve afectado al variar estos parámetros.

5.3 Caso de referencia - flujo N[1] (20% hacía arriba y hacia abajo).

Para este análisis se considera el sistema tal cual se modeló para su validación, con sus condiciones y parámetros de entrada, es decir el caso base, pero se estudiará lo que ocurre cuando se suministre un 20% más de flujo para N[1], es decir el amoníaco NH_3 que se encuentra en el tanque y que ingresa al sistema mediante la válvula Pr, así como el caso opuesto es decir cuando se disminuye en un 20% menos de flujo para N[1], para posteriormente ver cómo esto impacta en las eficiencias y parámetros exergéticos de los principales componentes del sistema. Esto último se reporta en la siguiente Tabla 16, y se ilustra en la Figura 29, que se muestran a continuación.

Tabla 16. Resultados de los principales parámetros obtenidos en el sistema al variar el flujo de NH_3 que se suministra al sistema N[1] en un 20% más, y posteriormente un 20% menos.

Parámetro	Símbolo	Unidad	Valor con $\dot{N}_1 = 73.3$ [mol/min]	Valor con $\dot{N}_1$ más 20%	Valor con $\dot{N}_1$ menos 20%
Potencia total de MCI.	$\dot{W}_{ICE}$	kW	118	118	118
Potencia total de pila PEM.	$\dot{W}_{FC}$	kW	96.64	96.64	96.64
Eficiencia energética de MCI.	η_{ICE}	%	44.23	44.23	44.23
Eficiencia exergética de MCI.	ψ_{ICE}	%	43.67	43.67	43.67
Eficiencia energética de pila.	η_{FC}	%	41.39	41.39	41.39
Eficiencia exergética de pila.	ψ_{FC}	%	41.34	41.34	41.34
Eficiencia energética del sistema general.	η_{SIS}	%	45.85	38.21	57.31
Eficiencia exergética del sistema general.	ψ_{SIS}	%	45.23	37.69	56.54
Exergía destruida en el MCI.	$\dot{E}x_{d_{ICE}}$	kW	65.96	65.96	65.96
Exergía destruida en la pila.	$\dot{E}x_{d_{FC}}$	kW	127.5	127.50	127.50
Exergía destruida en el sistema en general.	$\dot{E}x_{d_{SIS}}$	kW	190.4	295.50	84.49

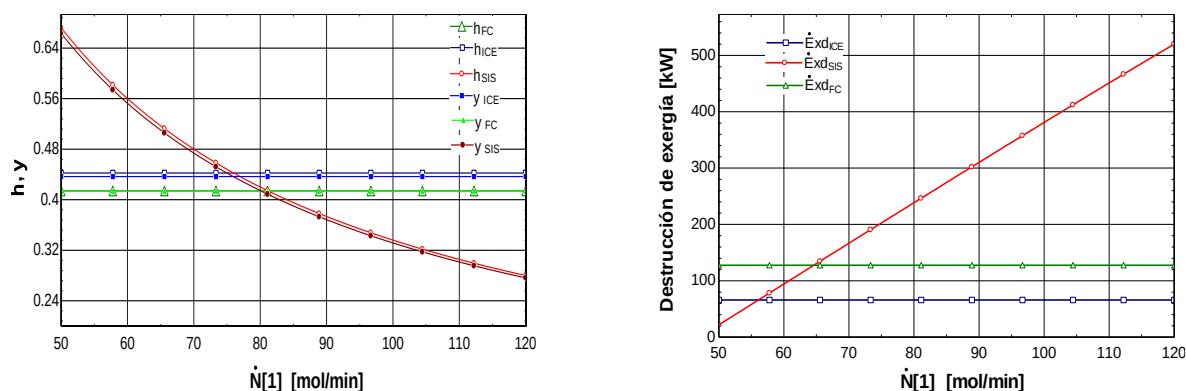


Figura 29. Variación de la eficiencia energética, exergética y destrucción de exergía del MCI y pila PEM, así como del sistema general, variando el flujo de amoníaco NH_3 suministrado al sistema.

De la Figura 29, se aprecia, que al variar el NH_3 suministrado al sistema, la eficiencia energética y exergética globales del sistema tienden a disminuir, a medida que se consume más NH_3 , y no se obtiene una mayor salida de potencia del sistema. Como los parámetros de

operación del MCI y la pila PEM son fijos (para este análisis), no se ve un impacto en las eficiencias de estos dos componentes, respectivamente. Además, se aprecia que la destrucción de exergía del sistema, aumenta de forma lineal, a causa del incremento en el consumo de NH_3 . De acuerdo a la ecuación 119, es el impacto en flujo másico 2 (corriente de NH_3), lo que hace que la destrucción de exergía aumente en el sistema global.

5.4 Caso de referencia - flujo N[6] (20% hacía arriba y hacia abajo).

Para este análisis se considera el sistema tal cual se modeló para su validación, con sus condiciones y parámetros de entrada, es decir el caso base, pero se estudiará lo que ocurre cuando se suministre un 20% más de flujo para N[6], es decir el hidrógeno producido en la unidad DSU, el cual una pequeña parte alimentará al MCI y el resto será empleado en alimentar la pila PEM. Se analizará también el caso opuesto, es decir, cuando se disminuye en un 20% menos de flujo para N[6], para posteriormente ver cómo esto impacta en las eficiencias y parámetros exergéticos de los principales componentes del sistema. Esto último se reporta en la Tabla 17, que se muestran a continuación.

Tabla 17. Resultados de los principales parámetros obtenidos en el sistema al variar el flujo de H_2 que se produce en el sistema es decir N[6] en un 20% más, y posteriormente un 20% menos.

Parámetro	Símbolo	Unidad	Valor con $\dot{N}_6 = 6.246$ [mol/min]	Valor con $\dot{N}_6$ más 20%	Valor con $\dot{N}_6$ menos 20%
Potencia total de MCI.	$\dot{W}_{ICE}$	kW	118	118	118
Potencia total de pila PEM.	$\dot{W}_{FC}$	kW	96.64	96.64	96.64
Eficiencia energética de MCI.	η_{ICE}	%	44.23	44.23	44.23
Eficiencia exergética de MCI.	ψ_{ICE}	%	43.67	43.67	43.67
Eficiencia energética de pila.	η_{FC}	%	41.39	41.39	41.39
Eficiencia exergética de pila.	ψ_{FC}	%	41.34	41.34	41.34
Eficiencia energética del sistema general.	η_{SIS}	%	45.85	45.85	45.85
Eficiencia exergética del sistema general.	ψ_{SIS}	%	45.23	45.23	45.23
Exergía destruida en el MCI.	$\dot{E}x_{d_{ICE}}$	kW	65.96	65.96	65.96
Exergía destruida en la pila.	$\dot{E}x_{d_{FC}}$	kW	127.5	127.5	127.5
Exergía destruida en el sistema en general.	$\dot{E}x_{d_{SIS}}$	kW	190.4	190.4	190.4

En este caso se observa, que este parámetro no impacta en el funcionamiento del sistema en general, ya que como se modeló y se planteó el sistema, este está diseñado para que funcionen por separado los sistemas de MCI y pila PEM. El hidrógeno producido, es depositado en un tanque para ser llenado y utilizado posteriormente por la pila PEM bajo estas condiciones de funcionamiento. Esto se podría cambiar si se realizan los ajustes al modelo.

5.5 Caso de referencia - flujo N[9] (20% hacía arriba y hacia abajo).

Para este análisis se considera el sistema tal cual se modeló para su validación, con sus condiciones y parámetros de entrada, es decir el caso base, pero se estudiará lo que ocurre cuando se suministre un 20% más de flujo para N[9], es decir el hidrógeno que se inyecta al MCI para su combustión, así como el caso opuesto es decir cuando se disminuye en un 20% menos de flujo para N[9], para posteriormente ver cómo esto impacta en las eficiencias y parámetros exergéticos de los principales componentes del sistema. Esto último se reporta en la Tabla 18, y se observa en la Figura 30, que se muestran a continuación.

Tabla 18. Resultados de los principales parámetros obtenidos en el sistema al variar el flujo de H_2 que se suministra al MCI, es decir N[9] en un 20% más, y posteriormente un 20% menos.

Parámetro	Símbolo	Unidad	Valor con $\dot{N}_9 = 3.32$ [mol/min]	Valor con $\dot{N}_9$ más 20%	Valor con $\dot{N}_9$ menos 20%
Potencia total de MCI.	$\dot{W}_{ICE}$	kW	118	118	118
Potencia total de pila PEM.	$\dot{W}_{FC}$	kW	96.64	96.64	96.64
Eficiencia energética de MCI.	η_{ICE}	%	44.23	36.86	55.29
Eficiencia exergética de MCI.	ψ_{ICE}	%	43.67	36.39	54.58
Eficiencia energética de pila.	η_{FC}	%	41.39	41.39	41.39
Eficiencia exergética de pila.	ψ_{FC}	%	41.34	41.34	41.34
Eficiencia energética del sistema general.	η_{SIS}	%	45.85	45.85	45.85
Eficiencia exergética del sistema general.	ψ_{SIS}	%	45.23	45.23	45.23
Exergía destruida en el MCI.	$\dot{E}x_{d_{ICE}}$	kW	65.96	87.21	44.71
Exergía destruida en la pila.	$\dot{E}x_{d_{FC}}$	kW	127.5	127.50	127.5
Exergía destruida en el sistema en general.	$\dot{E}x_{d_{SIS}}$	kW	190.4	151.90	228

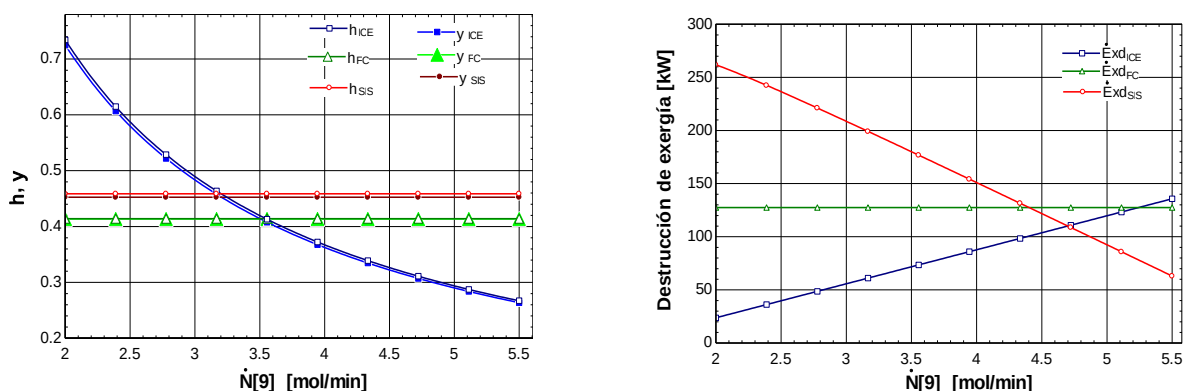


Figura 30. Variación de la eficiencia energética, exergética y destrucción de exergía del MCI y pila PEM, así como del sistema general, variando el flujo de H_2 suministrado al MCI.

En la Figura 30, se observa que, a medida que se suministra más H_2 al MCI, la eficiencia energética y exergética del MCI disminuyen, lo cual es debido a que la potencia del MCI se mantiene fija, pero aumenta el consumo de H_2 en él. Además, al existir una relación de flujos

en el MCI, provoca que, si aumenta el flujo másico 9, el flujo 4 incrementa también. La disminución en la eficiencia del MCI también es visible en las ecuaciones 64 y 67 respectivamente. En cuanto al sistema global y a la pila PEM, al no influir directamente estos parámetros, no se observa variación alguna en su comportamiento.

En cuanto a la destrucción de exergía, se observa que a mayor consumo de H_2 en el MCI, aumenta la destrucción de exergía en el MCI, lo cual resulta lógico de acuerdo a la ecuación 66. Pero, en el caso del sistema global, debido a las variaciones en los flujos de masa y energía, específicamente en el calor del MCI, se ve que, está es tendiente a disminuir, lo cual también coincide con la ecuación 119. Se observa, además, que mientras la destrucción del MCI aumenta, de forma lineal, la destrucción del sistema disminuye, de igual forma, lo cual resulta un comportamiento peculiar del modelo.

5.6 Caso de referencia - relación $m[9]/m[4]$ (20% hacia arriba y hacia abajo).

Para este análisis se considera el sistema tal cual se modeló para su validación, con sus condiciones y parámetros de entrada, es decir el caso base, pero se estudiará lo que ocurre cuando se incrementa en un 20% más la relación de flujo $m[9]/m[4]$, es decir el hidrógeno que se inyecta al MCI en relación con el amoníaco que se suministra al mismo para su combustión, así como el caso opuesto es decir cuando se disminuye en un 20% menos la relación de flujo $m[9]/m[4]$, para posteriormente ver cómo esto impacta en las eficiencias y parámetros exergéticos de los principales componentes del sistema. Esto último se reporta en la siguiente Tabla 19, y en la Figura 31, que se muestran a continuación.

Tabla 19. Resultados de los principales parámetros obtenidos en el sistema, al variar la relación de flujo de H_2 con respecto al NH_3 que se suministra al MCI es decir $m[9]/m[4]$ en un 20% más, y posteriormente un 20% menos.

Parámetro	Símbolo	Unidad	Valor con $\dot{m}_9/\dot{m}_4 = 1\%$	Valor con $\dot{m}_9/\dot{m}_4$ más 20%	Valor con $\dot{m}_9/\dot{m}_4$ menos 20%
Potencia total de MCI.	$\dot{W}_{ICE}$	kW	118	118	118
Potencia total de la pila PEM.	$\dot{W}_{FC}$	kW	96.64	96.64	96.64
Eficiencia energética de MCI.	η_{ICE}	%	44.23	52.45	35.81
Eficiencia exergética de MCI.	ψ_{ICE}	%	43.67	51.79	35.35
Eficiencia energética de la pila.	η_{FC}	%	41.39	41.39	41.39
Eficiencia exergética de la pila.	ψ_{FC}	%	41.34	41.34	41.34
Eficiencia energética del sistema general.	η_{SIS}	%	45.85	45.85	45.85
Eficiencia exergética del sistema general.	ψ_{SIS}	%	45.23	45.23	45.23
Exergía destruida en el MCI.	$\dot{E}x_{d_{ICE}}$	kW	65.96	49.25	91.03
Exergía destruida en la pila.	$\dot{E}x_{d_{FC}}$	kW	127.5	127.50	127.50
Exergía destruida en el sistema en general.	$\dot{E}x_{d_{SIS}}$	kW	190.4	220.2	144.70

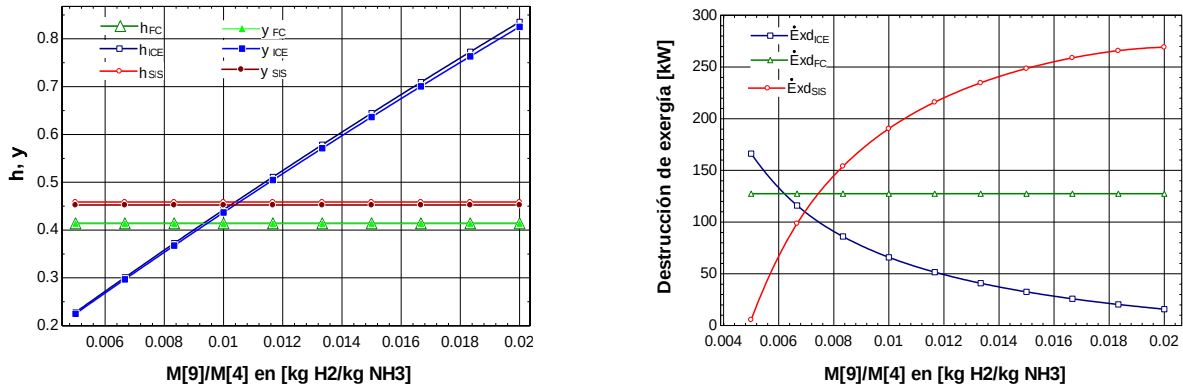


Figura 31. Variación de la eficiencia energética, exergética y destrucción de exergía del MCI y la pila PEM, así como del sistema general, variando la relación de flujo $m[9]/m[4]$ suministrado al MCI.

Finalmente, en la Figura 31, se observa que, al variar la relación de flujos másicos de NH_3/H_2 , que se suministran al MCI, la eficiencia energética y exergética del MCI aumenta de manera lineal, a medida que la relación crece, debido a que el flujo 9 se mantiene constante pero el flujo 4 disminuye, y de acuerdo a la ecuación 64 y 67, respectivamente, esto es razonable. Mientras que la pila y el sistema global no afecta la variación de este parámetro por la manera en que se modeló el sistema.

Mientras que, para la destrucción de exergía, se observa que, en el caso del MCI, la destrucción de exergía disminuye de manera exponencial a medida que crece la relación de NH_3/H_2 , esto se debe a los cambios en los flujos de las corrientes involucradas en el MCI, y como estos impactan en la ecuación 66.

Para el sistema global, la destrucción de exergía aumenta, de manera exponencial, al crecer la relación de flujos, antes mencionada, debido a la variación de flujos del sistema, en especial los flujos 7, 13 y el calor del MCI. Se observa, que, al variar los flujos másicos, que involucran al MCI, la destrucción de exergía es contraria en el MCI, a la que se tiene en el sistema global. Esto último, se ve también, en el caso de variar el flujo 9, en la Figura 30. Por lo cual, se concluye que, si en el MCI aumenta la destrucción de exergía, en el sistema global disminuye, lo cual, queda para futuras investigaciones.

Conclusiones y comentarios finales.

Se llevó a cabo el estudio de un sistema novedoso de vehículo híbrido que funciona con amoníaco como combustible, ya que éste sirve de contenedor al hidrógeno, que de acuerdo a ésta y varias investigaciones previas tiene un gran potencial para remplazar a los combustibles a base de petróleo que se utilizan al día de hoy.

Si bien el amoníaco es al día de hoy muy común como refrigerante, poco se habla de él como combustible en motores de combustión interna, ya que al día de hoy su combustión resulta complicada e ineficiente, por esta razón se debe agregar hidrógeno a su combustión para mejorar la misma.

El sistema híbrido analizado constó de dos fuentes de poder para impulsar el vehículo, las cuales son un sistema de motor de combustión interna a base de amoníaco e hidrógeno, y un sistema de pila de combustible del tipo PEM a base de hidrógeno y oxígeno, las cuales se configuran como se mostró en la Figura 15, y que están relacionadas mediante un sistema de disociación de amoníaco, el cual funciona a base craqueo térmico a base de amoníaco y activado por los gases de escape del MCI, los cuales aportan la energía térmica necesaria para la separación en H_2 y N_2 , respectivamente.

El sistema se codificó en el software EES, para su solución, obteniendo un total de 322 ecuaciones y 322 variables, compilado en un tiempo de 4.5 segundos, teniendo un total de 922 líneas de código.

Al realizar un análisis exhaustivo del sistema, se llegó a la conclusión de acuerdo a los parámetros iniciales tomados y a las suposiciones necesarias para modelar el sistema, de que las dos principales fuentes de potencia del vehículo, es decir el motor de combustión interna y la pila de combustible, no pueden trabajar simultáneamente en la propulsión del vehículo, debido a que la tasa de producción de hidrógeno es insuficiente para alimentar a ambos sistemas simultáneamente, por lo tanto, se utiliza un sistema a la vez para propulsar el vehículo. En un inicio el sistema de motor de combustión interna es el encargado de mover el vehículo y de la producción de hidrógeno. Una pequeña parte del hidrógeno producido se combustiona en el MCI y el restante se almacena en un tanque (que originalmente no se muestra en la Figura 15), hasta que se llene y es entonces cuando se puede desactivar el motor de combustión interna; operando solo con la pila de combustible.

El ciclo de funcionamiento de este sistema, debido a las condiciones de diseño no puede ser invertido, a menos que se modifique el mismo. Se podrían operar estos dos sistemas de potencia del vehículo simultáneamente para obtener una mayor potencia de salida y por ende alcanzar velocidades y aceleraciones más altas, modificando las condiciones de diseño del sistema. Pero esto último está fuera de los alcances de este trabajo e implicaría sacrificar la eficiencia del sistema, ya que al aumentar la cantidad de consumo de combustible esta tendería a ser más pequeña, esto último se muestra en la Figura 29. Sin mencionar que la pila de combustible debido a su naturaleza y tipo de construcción está limitada a ciertas salidas de potencia, y como sus condiciones de flujo están íntimamente relacionadas con su potencia de salida, se encontró que su eficiencia llega a un máximo bajo ciertas condiciones de trabajo. Una vez que se alcanzan dichas condiciones de trabajo, la eficiencia tiende a disminuir, aunque se aplique mayor cantidad de hidrógeno al ánodo, esto se aprecia en la Figura 28.

En el modelado del sistema se encontraron los siguientes resultados bajo las condiciones de operación y suposiciones previamente citadas en el trabajo, teniendo una salida de potencia neta de 118 kW para el caso de motor de combustión interna, una potencia neta de salida de la pila de combustible de 96.64 kW, suministrando como combustible amoníaco presurizado en forma líquida al sistema a una tasa de 73.3 mol/min y a una presión y temperatura de 17 bar y 20 °C, respectivamente.

En cuanto a las eficiencias energéticas y exergéticas del sistema se encontraron que para las condiciones de flujo previamente descritas y para cada sistema principal son de, 44.33 y 43.67 % para el caso del motor de combustión interna, y de 41.39 y 41.34 % para el caso de la pila de combustible, respectivamente. En cuanto al sistema global sus eficiencias energética y exergética resultaron ser de 45.85 y 45.23 % respectivamente.

El beneficio final de este sistema es la obtención de productos de combustión libres de contaminantes dañinos para el medio ambiente y el de tener finalmente un sistema autónomo de transporte que no dependa de tiempos de carga largos o de costosa infraestructura para repostar hidrógeno. Sin mencionar que, al utilizar los gases de escape provenientes de la combustión del sistema de motor de combustión interna, no se requiere otra fuente de energía externa que se aporte al sistema. Esto es de suma importancia, ya que como se estudió en este trabajo, es necesario una gran cantidad de energía para disociar la molécula de amoníaco. El poder obtener hidrógeno implica un costo alto de energía y recursos, que mediante esta configuración de sistema no se aplica, al reutilizar dichos gases de escape.

Como propuestas a mejorar este sistema se encontraron las siguientes: reutilizar la corriente de nitrógeno que sale de la unidad disociadora DSU, ya que esta última sale a una tasa de 20.22 mol/min a 600 °C bajo las condiciones de trabajo para este modelo, siendo ésta desechada del sistema. Eliminar el intercambiador de calor HEX₁ ya que este si bien aporta una parte de calor a la corriente de amoníaco a disociar, la ganancia resulta ser muy poca y se podría ahorrar peso y dinero al eliminar este último. Así mismo, como se mencionó anteriormente, modificar el sistema a manera que se pueda operar simultáneamente. Algo a tomar en cuenta, que no se considera en este estudio, es el tema del peso del sistema, ya que al tener demasiados componentes este podría tener una relación peso-potencia elevada, lo cual puede presentar un reto en el desarrollo futuro de este sistema.

Cabe mencionar que esta tecnología está aún en una fase de desarrollo experimental, es decir, no se ha desarrollado por completo y por ende todos los resultados obtenidos en esta investigación y en otras previas, deben ser analizadas con sumo cuidado; teniendo en cuenta que podrían variar, una vez que se implemente este sistema en un posible prototipo.

Finalmente se anexa el código del sistema, que se modeló en este trabajo, para futuras referencias.

Apéndice A. Referencias de los fluidos de trabajo en EES.

Debido a que los componentes del sistema operan con diferentes tipos de fluidos, tanto líquidos, como en fase gaseosa y en algunos estados como mezcla, cada uno con sus distintas propiedades termodinámicas y químicas respectivamente, resulta necesario homogenizar la referencia de la cual se parte para determinar sus propiedades termodinámicas de interés para esta investigación. En especial se tienen dos propiedades termodinámicas que requieren estar referenciadas homogéneamente, para poder realizar adecuadamente los cálculos necesarios. Esto afecta principalmente a los sistemas del motor y producción de hidrógeno. Para este caso se tienen dos clases de fluidos; el primero es el amoníaco, el cual se modela como sustancia pura en su fase líquida y de mezcla y el otro grupo de fluidos son los gases ideales (tomados así para este análisis) que hay en el sistema específicamente el hidrógeno, nitrógeno, oxígeno (en algunas partes combinado como aire ideal), además en cierta parte del modelo donde las condiciones son extremadamente altas en cuanto a temperatura y presión se refiere, se modelará el vapor de agua y el amoníaco como gases ideales. Esto último también obedece a las limitaciones que se encontraron para poder modelar estos fluidos a condiciones no tabuladas en las tablas de la bibliografía, ni capturadas en EES estando fuera del rango de operación del programa. Para los análisis y cálculos en este trabajo se hace uso del software EES para la determinación de propiedades termodinámicas de los diferentes estados del sistema general, para lo cual resulta conveniente saber las referencias de los fluidos que maneja el programa y que están involucradas en la determinación de la energía y exergía del sistema.

Referencias por defecto de EES para los fluidos del sistema de vehículo híbrido.

- Aire (Gas ideal, compuesto por oxígeno y nitrógeno): $h=0$ @ $T = 0$ [K].
- Hidrógeno H_2 (Gas Ideal): $h=0$ @ $T = 25^\circ\text{C}$ o 298.15 [K].
- Nitrógeno N_2 (Gas ideal): $h=0$ @ $T = 25^\circ\text{C}$ o 298.15 [K].
- Amoníaco NH_3 (Sustancia pura): $h=0$ @ $T = -44.4^\circ\text{C}$ o 228.7 [K] como líquido saturado.
- Vapor de Agua H_2O (Gas Ideal): $h=h_f^\circ$ @ $T = 25^\circ\text{C}$ o 298.15 [K].

Como se observa no todos los casos están referenciadas a la misma temperatura de partida para la determinación de la entalpía, por lo cual, si se tomasen tal cual como arroja el software los valores, se estaría cometiendo errores en los cálculos, obteniendo valores errados. Recordando que, para los gases ideales basta con conocer la temperatura de estos para determinar su entalpía, más no para el caso de el amoníaco como sustancia pura, pues dependemos de otra propiedad excluyente de la temperatura para su determinación.

Caso amoníaco fase líquida y mezcla (sustancia pura).

Debido a que el amoníaco actualmente se utiliza más como refrigerante que como medio de transporte de hidrógeno no se tiene datos registrados para este a altas temperaturas en EES y su referencia claramente es diferente a los gases que hay en el resto del sistema, será este la parte que determine la adecuación de la referencia que se toma para el resto de los cálculos, ya que resulta más sencillo modificar las referencias de temperatura de los gases ideales que de una sustancia pura que depende además de otra propiedad.

Se utilizará la referencia IIR de EES para amoníaco, ya que es la que resulta más conveniente en este caso, y es la siguiente:

IIR - El valor de la entalpía específica se establece en 200 kJ / kg y el valor de la entropía específica se establece en 1.0 kJ / kg-K para líquido saturado a 0 ° C (273.15 K). Este es el estado de referencia estándar para el Instituto Internacional de Refrigeración. Teniendo en cuenta que esta opción no es aplicable a fluidos para los que la temperatura crítica es inferior a 0 ° C.[60].

Siendo entonces la temperatura de referencia para todos los cálculos de 0 [°C] o 273.15 [K], tanto para sustancias puras como para gases ideales del sistema.

Para su estructura en el código se emplea la siguiente nomenclatura:

\$Reference

El comando \$REFERENCE permite cambiar el estado de referencia predeterminado para un fluido específico. El formato de este comando es:

\$REFERENCE Fluid ReferenceID

Donde: Fluid es el nombre del fluido, por ejemplo, NH₃, y ReferenceID es en este caso IIR.

Caso gases ideales (H₂, N₂, aire y vapor de agua H₂O).

Para los gases ideales que participan el sistema se procede a formular ecuaciones que permitan calcular su entalpía a la temperatura de referencia fijada por el amoníaco y la referencia IIR, previamente establecida. Dado que el hidrógeno, nitrógeno y vapor de agua están referenciados a la misma temperatura en EES es decir 25°C, se puede formular una ecuación que ayude a determinar la entalpía de estos referenciada a la temperatura de referencia deseada para estos tres gases. Lo anterior se puede ver en la siguiente Figura 32.

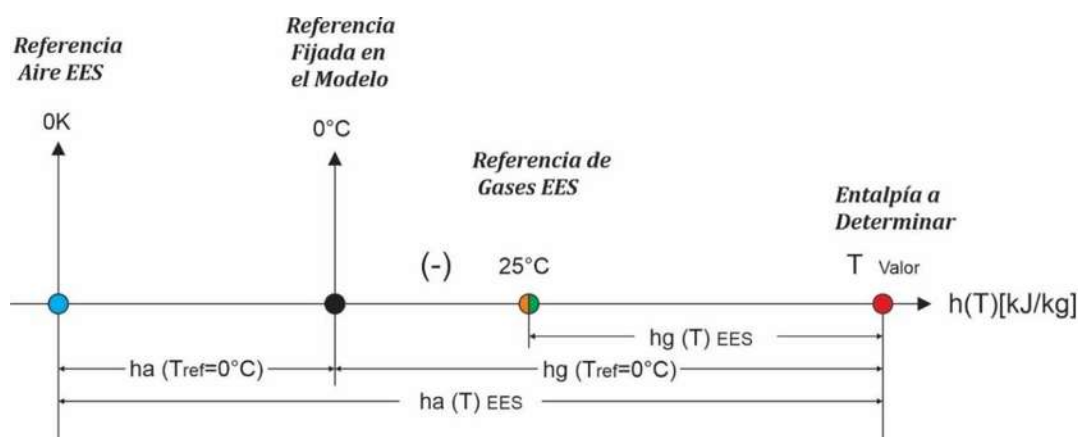


Figura 32. Escala de referencias para la determinación de las entalpías de los gases ideales en el sistema de vehículo híbrido en EES.

En la Figura 32, se observan en una recta la entalpía de gases ideales como función únicamente de su respectiva temperatura, donde se observan dos casos el primero es para el caso del aire el cual está referenciado a una temperatura de 0K, y el segundo es para el caso

de los otros tres gases modelados como ideales que intervienen en el sistema, que están referenciados a 25°C.

Por simple inspección del diagrama se pueden formular las siguientes relaciones, útiles para referenciar a 0°C los gases y el aire:

$$hg(T) = hg(T_{EES}) + hg(T_{ref}) \quad (122)$$

La relación anterior funciona para el nitrógeno, oxígeno, vapor de agua, el hidrógeno y mezcla de gases, pero si se utiliza únicamente esta relación se tendrá el problema de que el software EES dará valores negativos a partir de que se baje de 25°C, por lo cual es necesario introducir un signo menos a la ecuación anterior quedando de la siguiente forma:

$$hg(T) = hg(T_{EES}) - hg(T_{ref}) \quad (123)$$

Donde:

$hg(T)$ = Entalpía de gas a una temperatura T referenciado a 0°C.

$hg(T_{EES})$ = Entalpia de gas que el software EES arroja por defecto referenciada a 25 °C.

$hg(T_{ref})$ = Entalpia de gas referenciada a 0 °C.

Para el caso del aire se tiene de manera análoga la siguiente relación:

$$ha(T) = ha(T_{EES}) - ha(T_{ref}) \quad (124)$$

Donde:

$ha(T)$ = Entalpía de aire ideal a una temperatura T referenciado a 0°C.

$ha(T_{EES})$ = Entalpia de aire ideal que el software EES arroja por defecto referenciada a 25 °C.

$ha(T_{ref})$ = Entalpia de aire ideal referenciada a 0 °C.

Con el aire se observa en la Figura 32, que este está referenciado en EES a 0K, y por ende ambos valores de entalpía obtenidos en EES son positivos a 0°C, por lo tanto, la ecuación 124 queda tal cual se indica.

Para la entropía se tiene un caso similar a la entalpía, solo se debe recordar que esta depende de dos propiedades independientes, como la presión o alguna otra propiedad independiente de la temperatura, para este caso se supone que la presión con la cual se determinara la entropía en EES es la misma a pesar de que se esté referenciando a una temperatura diferente, ya que se trata de una diferencia y un punto de partida únicamente, como se observa en la Figura 33, para el caso de gas ideal y de aire como gas ideal.

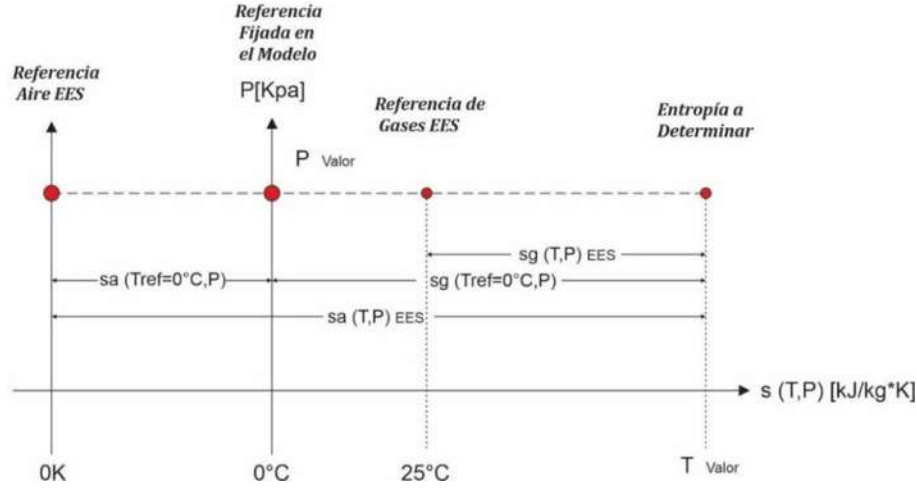


Figura 33. Escala de referencias para la determinación de las entropías de los gases ideales en el sistema de vehículo híbrido en EES.

Para el caso de los gases antes mencionados, en base a la Figura 33, y aplicando el mismo criterio de la entalpía, se tiene que:

$$sg(T, P) = sg(T_{EES}, P) - sg(T_{ref}, P) \quad (125)$$

Donde:

$sg(T, P)$ = Entropía de gas a una temperatura T referenciado a 0°C y a una presión P.

$sg(T_{EES}, P)$ = Entropía de gas que el software EES arroja por defecto referenciada a 25 °C, y a una presión P.

$sg(T_{ref}, P)$ = Entropía de gas referenciada a 0 °C y a una presión P.

Para el aire de manera análoga a la entalpía de gases, se tiene que:

$$sa(T, P) = sa(T_{EES}, P) - sa(T_{ref}, P) \quad (126)$$

Donde:

$sa(T, P)$ = Entropía de aire ideal a una temperatura T referenciado a 0°C y a una presión P.

$sa(T_{EES}, P)$ = Entropía de aire ideal que el software EES arroja por defecto referenciada a 25 °C, y a una presión P.

$sa(T_{ref}, P)$ = Entropía de aire ideal referenciada a 0 °C y a una presión P.

Nota: Para el agua como sustancia pura no hay problema en utilizarla en EES, ya que esta está referenciada a 0°C, lo mismo ocurre con la rutina de EES de la mezcla aire-agua, por ende, si se trabaja con una referencia de 0 °C no se requiere ninguna modificación para los cálculos.

Apéndice B. Cálculo de propiedades del amoníaco en fase gaseosa (altas temperaturas).

Como es bien sabido de antemano el amoníaco tiene un uso más enfocado a sistemas de refrigeración, por ende, sus propiedades registradas en libros y softwares de ingeniería suelen ser de temperatura y presiones bajas, llegando como máximo alrededor de los 50°C por poner un ejemplo. Sin embargo, la molécula de amoníaco (por lo general en su fase líquida) se puede utilizar para transportar de manera más segura el hidrógeno necesario para algunos sistemas de potencia como el analizado en este trabajo.

Dado que este sistema de vehículo híbrido se modelará en el software EES por conveniencia y aprovechamiento de sus librerías, sin embargo, al realizar el análisis específicamente de una corriente de amoníaco en su fase de gaseosa como vapor sobrecalentado y referenciado a una temperatura de 0°C mediante el comando IIR, resulta lo siguiente:

La temperatura está fuera del rango para el amoníaco. El rango permitido es 195,5 < T (K) < 700.

Lo cual claramente es una limitante para el modelado de sistemas de potencia como este donde no se precisa del amoníaco como un refrigerante si no como un combustible y un medio de transporte del hidrógeno, y por lo general en este tipo de sistemas las temperaturas que se alcanzan en la separación del amoníaco con craqueo térmico son muy superiores a estos rangos de temperatura. Por ende, con el modelo propuesto en este trabajo resulta necesario modelar el amoníaco en su fase gaseosa con las siguientes relaciones, mediante la ecuación de Shomate, propuesta en [41], en la que se proporcionan los siguientes datos y relaciones para poder modelar el amoníaco a altas temperaturas en su fase gaseosa.

Capacidad calorífica de fase gaseosa de amoníaco, ecuación de Shomate.

$$C_p^\circ = A + B * t + C * t^2 + D * t^3 + E/t^2 \quad (127)$$

Entalpía de amoníaco en fase gaseosa referenciada a 25°C.

$$H^\circ - H_{298.15}^\circ = A * t + B * t^2/2 + C * t^3/3 + D * t^4/4 - E/t + F - H \quad (128)$$

Entropía de amoníaco en fase gaseosa referenciada a 25°C y una Presión P.

$$S^\circ = A \ln(t) + B * t + C * t^2/2 + D * t^3/3 - E/(2 * t^2) + G \quad (129)$$

Donde:

C_p° = Calor específico a presión constante en J/mol*K.

H° = Entalpía estándar de amoníaco en kJ/mol.

S° = Entropía estándar de amoníaco en J/mol*K.

t = temperatura del amoníaco en (K)/1000.

Cabe mencionar que al utilizar estas ecuaciones se está tomando como referencia del gas la temperatura de 25 °C o 298.15 K por lo que en el caso de trabajar con programas o tablas de propiedades se deberá tener en cuenta un ajuste como el mencionado en el apéndice A de este trabajo.

Mientras que las diferentes letras que aparecen en las anteriores ecuaciones obedecen a constantes, que dependen del valor de la temperatura a la cual exista el amoníaco al que se le deseen calcular sus propiedades, tales valores de las constantes están dados en la siguiente tabla para dos rangos diferentes de temperatura.

Temperatura en (K)	298 - 1400	1400 - 6000
A	19.99563	52.02427
B	49.77119	18.48801
C	-15.37599	-3.765128
D	1.921168	0.248541
E	0.189174	0.248541
F	-53.30667	-85.53895
G	203.8591	223.8022
H	-45.89806	-45.89806

Tabla 20. Valores de las constantes de la ecuación de Shomate, para el cálculo de propiedades del amoníaco en fase gas, datos tomados de la referencia [41].

En el caso de esta investigación estas ecuaciones fueron necesarias para el análisis de la unidad disociadora de amoníaco DSU, la cual según la referencia [25], puede operar en un rango de temperaturas de 300 a 700 °C, las cuales resultan ser una temperatura mayor a los 700 K (426.85 °C), con lo cual EES arrojará un error al momento de los cálculos, el valor utilizado para la validación y modelado del sistema se supuso de 600 °C, la cual está por encima de los valores del amoníaco modelado como sustancia pura.

Apéndice C. Código EES del sistema de vehículo híbrido de pila PEM y MCI.

"DATOS DE ENTRADA PARA CÁLCULOS PARTE 1: ICE Y DSU" Pm_NH3=MolarMass(Ammonia) "MASA MOLAR DE AMONÍACO" Pm_H2=MolarMass(H2) "MASA MOLAR DEL HIDRÓGENO" Pm_aire=MolarMass(Air) "MASA MOLAR DEL AIRE" Pm_H2O=MolarMass(H2O) "MASA MOLAR DE VAPOR DE AGUA" Pm_N2=MolarMass(N2) "MASA MOLAR DEL NITRÓGENO" N[1]=73.3[mol/min] "FLUJO DE NH3 QUE SALE DEL TANQUE" N[6]=6.246[mol/min] "FLUJO DE HIDRÓGENO H2 QUE SE PRODUCE A BORDO" N[9]=3.32[mol/min] "FLUJO DE HIDRÓGENO QUE SE INYECTA AL MOTOR" M[1]=N[1]*CONVERT(mol/min,kmol/s)*Pm_NH3 M[6]=N[6]*CONVERT(mol/min,kmol/s)*Pm_H2 M[9]=N[9]*CONVERT(mol/min,kmol/s)*Pm_H2 WICE_DOT=118[kW] "POTENCIA DE SALIDA DE MOTOR" "VALORES DE REFERENCIA PARA LOS GASES IDEALES" T=CONVERTTEMP(C,K,0) "DATOS DE ENTRADA PARA CÁLCULOS DE PROPIEDADES:" P[0]=101.325[kPa] "PRESIÓN DE REFERENCIA ATMOSFÉRICA" T[0]=298.15[K] "TEMPERATURA DE REFERENCIA AMBIENTE" P[1]=17*CONVERT(bar,kPa) "PRESIÓN DEL TANQUE DE ALMACENAMIENTO DE NH3" T[1]=CONVERTTEMP(C,K,20) "TEMPERATURA DEL TANQUE DE ALMACENAMIENTO DE NH3" P[4]=2.5*CONVERT(bar,kPa) "PRESIÓN A LA CUAL SE SUMINISTRA EL NH3 AL ICE" T[6]=CONVERTTEMP(C,K,600) "TEMPERATURA DE OPERACIÓN DEL DSU Y A LA CUAL SE SEPARAN EL H2 DEL N2" T[12]=CONVERTTEMP(C,K,900) "TEMPERATURA DE LOS GASES DE SALIDA DEL ICE" "DATOS DE ENTRADA DEL PODER CALORÍFICO DE LOS COMBUSTIBLES" LHV_NH3=18.61*CONVERT(MJ/kg,kJ/kg) "PODER CALORÍFICO INFERIOR DE NH3" HHV_NH3=22.5*CONVERT(MJ/kg,kJ/kg) "PODER CALORÍFICO SUPERIOR DE NH3" LHV_H2=119.95*CONVERT(MJ/kg,kJ/kg) "PODER CALORÍFICO INFERIOR DE H2" HHV_H2=141.6*CONVERT(MJ/kg,kJ/kg) "PODER CALORÍFICO SUPERIOR DE H2" "DATOS PARA CALCULAR LA DESTRUCCIÓN DE EXERGÍA DEI ICE" T_P=CONVERTTEMP(C,K,600) "TEMPERATURA DE PARED DEL ICE" "CÁLCULO DE PROPIEDADES DE ALGUNOS ESTADOS TERMODINÁMICOS PARTE 1" "ESTADO 1" "FLUJO AMONIACO" \$REFERENCE Ammonia IIR Psat@T1=Pressure(Ammonia,P=P[1],x=1) Tsat@P1=Temperature(Ammonia,P=P[1],x=1) "IYA QUE P[1] > Psat@T1; Y T[1] < Tsat@P1, ES POR TANTO UN LÍQUIDO COMPRIMIDO COMO SE ESPERABA" h[1]=Enthalpy(Ammonia,T=T[1],P=P[1]) s[1]=Entropy(Ammonia,T=T[1],P=P[1]) "ESTADO 2" "FLUJO AMONIACO" P[2]=P[4] "BALANCE DE ENERGÍA DE VÁLVULA P" h[2]=h[1] "DE ESTA PARTE CONOCEREMOS EL VALOR DE h[2]" h[6]=P2-Enthalpy(Ammonia,P=P[2],x=0) hg@P2=Enthalpy(Ammonia,P=P[2],x=1) "I YA QUE h[6]=P2<h[2]<hg@P2 ES UNA MEZCLA" x2=(h[2]-h[6]/P2)/(hg@P2-h[6]/P2) "ICALIDAD DEL ESTADO 2" T[2]=Temperature(Ammonia,P=P[2],x=1) \$REFERENCE Ammonia IIR s[6]=P2-Entropy(Ammonia,P=P[2],x=0) sg@P2=Entropy(Ammonia,P=P[2],x=1) s[2]=s[6]+P2*x2*(sg@P2-s[6]/P2) "ESTADO 3" "FLUJO AMONIACO" P[3]=P[2] T[3]=T[2] h[3]=h[2] s[3]=s[2] "ESTADO 4" "FLUJO AMONIACO" T[4]=T[2] h[4]=h[2] s[4]=s[2] "ESTADO 5" "FLUJO AMONIACO" P[5]=P[3] "ESTADO 6" "FLUJO HIDRÓGENO" P[6]=P[4]	h[6]=Enthalpy(H2,T=T[6])-Enthalpy(H2,T=T) "ENTALPIA DE H2 COMO GAS IDEAL REFERENCIADO A T=0 °C" "ESTADO 7" "FLUJO NITRÓGENO" P[7]=P[0] T[7]=T[6] "SUPONEMOS QUE EL DSU OPERA A ESTA TEMPERATURA Y QUE AL SEPARARSE EL N2 Y H2 SALEN A LA MISMA TEMPERATURA" h[7]=Enthalpy(N2,T=T[7])-Enthalpy(N2,T=T) "ENTALPIA DE N2 COMO GAS IDEAL REFERENCIADO A T=0 °C" "ESTADO 12" "FLUJO MEZCLA DE GASES DE COMBUSTIÓN" P[12]=P[0] "DE LA ESTEQUIOMETRÍA DE LA COMBUSTIÓN PARA AMBOS COMBUSTIBLES TENEMOS LOS SIGUIENTES PRODUCTOS:" n_H2O=2.5[kmol] "MOLES DE VAPOR DE AGUA" n_N2=5.2[kmol] "MOLES DE NITRÓGENO" n_gases=n_H2O+n_N2 "MOLES TOTALES DE LOS PRODUCTOS DE COMBUSTIÓN DE AMBOS COMBUSTIBLES" "CÁLCULO DE FRACCIONES MOLARES" y_H2O=n_H2O/n_gases "FRACCIÓN MOLAR DE H2O" y_N2=n_N2/n_gases "FRACCIÓN MOLAR DE NITRÓGENO" m_H2O=n_H2O*Pm_H2O "MASA TOTAL DE AGUA EN GASES DE COMBUSTIÓN" m_N2=n_N2*Pm_N2 "MASA TOTAL DE NITRÓGENO EN GASES DE COMBUSTIÓN" m_gases=m_H2O+m_N2 "MASA DE LA MEZCLA DE GASES" "CÁLCULO DE FRACCIONES MÁSICAS" fm_H2O=m_H2O/m_gases fm_N2=m_N2/m_gases "MASA MOLAR APARENTE O PROMEDIO DE LOS GASES DE COMBUSTIÓN" Pm_gases=y_H2O*Pm_H2O+y_N2*Pm_N2 "CÁLCULO DE ENTALPIA DE GASES REFERENCIADA A 0 °C" h_H2O=Enthalpy(H2O,T=T[12])-Enthalpy(H2O,T=T) "ENTALPIA DE H2O COMO GAS IDEAL REFERENCIADO A 0 °C" h_N2=Enthalpy(N2,T=T[12])-Enthalpy(N2,T=T) "ENTALPIA DE N2 COMO GAS IDEAL REFERENCIADO A 0 °C" h[12]=fm_H2O*h_H2O+fm_N2*h_N2 "ENTALPIA DE GASES DE COMBUSTIÓN REFERENCIADOS A T=0[C]" "CÁLCULO DE CP DE GASES A TEMPERATURA DE ENTRADA AL DSU" Cpg_H2O=SpecHeat(H2O,T=T[12]) Cpg_N2=SpecHeat(N2,T=T[12]) Cp_gases=fm_H2O*Cpg_H2O+fm_N2*Cpg_N2 "CP DE GASES APROXIMADO A LA TEMPERATURA DE ENTRADA AL DSU" "ESTADO 13" "FLUJO MEZCLA DE GASES DE COMBUSTIÓN" P[13]=P[12] "ESTADO 14" "FLUJO DE AIRE ESTÁNDAR MODELADO COMO GAS IDEAL" P[14]=P[0] T[14]=T[0] h[14]=Enthalpy(Air,T=T[14])-Enthalpy(Air,T=T) "ENTALPIA DE AIRE REFERENCIADA A 0 °C" "BALANCES DE MASA MOLAR Y MASA PARA LOS EQUIPOS Y TUBERÍAS PARTE 1" "BALANCE DE MASA PARA LA VÁLVULA P" "CORRIENTE DE AMONIACO NH3" M[1]=M[2] "FLUJO MÁSCO DE NH3" N[2]=N[1] "BALANCE DE MASA Y ESTEQUIOMETRÍA DEL MOTOR ICE" raA=6.05 "RELACIÓN AIRE-AMONIACO [kg aire/kg NH3]" raH=34.2 "RELACIÓN AIRE-HIDRÓGENO [kg aire/kg H2]" "ADEMÁS DE LA ESTEQUIOMETRÍA DEL ICE SE DEBE CUMPLIR LA SIGUIENTE RELACIÓN DE FLUJOS QUE SE INYECTAN AL MOTOR" M[9]/M[4]=0.01 "RELACIÓN DE FLUJO DE HIDRÓGENO AMONIACO QUE SE INYECTAN AL MOTOR LA CUAL ES DE 1%" N[4]=(M[4]/Pm_NH3)*CONVERT(kmol/s,mol/min) "DE LAS RELACIONES ESTEQUIOMÉTRICAS DE LA COMBUSTIÓN DEL NH3 Y H2, ENCONTRAREMOS EL FLUJO DE AIRE PARA LLEVAR A CABO LA COMBUSTIÓN Y EL FLUJO DE GASES" raA=Mcomb_NH3/M[4] "DE AQUÍ SE OBTIENE EL FLUJO DE AIRE PARA LA COMBUSTIÓN DEL NH3"	raH=Mcomb_H2/M[9] "DE AQUÍ SE OBTIENE EL FLUJO DE AIRE PARA LA COMBUSTIÓN DEL H2" M[14]=Mcomb_NH3+Mcomb_H2 "FLUJO MÁSCO DE AIRE TOTAL QUE INGRESA AL ICE" N[14]=(M[14]/Pm_aire)*CONVERT(kmol/s,mol/min) M[4]=M[9]+M[14]=M[12] "BALANCE DE MASA DEL ICE SE OBTIENE FLUJO DE GASES M[12]" "DEL NODO A DE LA TUBERÍA DE AMONIACO" M[2]=M[3]+M[4] "DE AQUÍ SE OBTIENE M[3]" N[3]=(M[3]/Pm_NH3)*CONVERT(kmol/s,mol/min) "FLUJO MOLAR DE NH3" "BALANCE DE MASA DEL INTERCAMBIADOR DE CALOR HEX 1" M[5]=M[3] "FLUJO MÁSCO DE NH3" N[5]=N[3] M[8]=M[6] "FLUJO MÁSCO DE HIDRÓGENO PRODUCIDO QUE ATRAVESÓ HEX 1" N[8]=N[6] "DEL NODO B DE LA TUBERÍA DE HIDRÓGENO" M[8]=M[9]+M[10] "DE AQUÍ SE OBTIENE M[10]" N[10]=(M[10]/Pm_H2)*CONVERT(kmol/s,mol/min) "FLUJO MOLAR DE H2 QUE VA AL FILTRO HPU" "BALANCE DE MASA DEL DSU" "LADO GASES" M[13]=M[12] "GASES DE ESCAPE DEL DSU" "PARA CONOCER N[12], UTILIZAREMOS EL PESO MOLECULAR APARENTE DE LOS GASES DE COMBUSTIÓN" N[12]=(M[12]/Pm_gases)*CONVERT(kmol/s,mol/min) "FLUJO MOLAR DE GASES DE LA COMBUSTIÓN DEL ICE" N[13]=N[12] "BALANCE DE MASA GENERAL DE DSU" M[5]+M[12]=M[6]+M[7]+M[13] "DE AQUÍ SE CONOCERÁ EL FLUJO MÁSCO DE NITRÓGENO M[7]" N[7]=(M[7]/Pm_N2)*CONVERT(kmol/s,mol/min) "FLUJO MOLAR DE N2 QUE SALE DEL DSU" "BALANCE DE MASA DEL HPU" M[11]=M[10] "FLUJO DE H2 YA LIBRE DE CUALQUIER POSIBLE RESIDUO DE NH3 O N2" N[11]=N[10] "DEBIDO A QUE NO CONOCEMOS LOS VALORES DE LAS TEMPERATURAS DE SALIDA DE HEX1, PROPONDREMOS UNA EFICACIA DE 0.8, Y DETERMINAREMOS LOS CALORES ESPECÍFICOS A PRESIÓN CONSTANTE ÚNICAMENTE CON LOS VALORES DE TEMPERATURA QUE CONOCEMOS" epsilon_HEX1=0.8 "VALOR DE EFECTIVIDAD SUPUESTA PARA EL HEX1, SIENDO ESTE UN VALOR COMÚN EN INTERCAMBIADORES DE CALOR" Cp_3=SpecHeat(Ammonia,T=T[3],x=0) "MEZCLA DE AMONIACO LÍQUIDO-VAPOR, NO SE PUEDE USAR CP DIRECTO DEL PROGRAMA, YA QUE ES UNA MEZCLA Y EES NOS DA UN ERROR, POR LO TANTO CONSIDERAREMOS SOLO LA PARTE LÍQUIDA QUE PREDOMINA" Cp_6=Cp(H2,T=T[6]) "CALOR ESPECÍFICO DEL H2 DE LA CORRIENTE 6" C_3=Cp_3*M[3] "CAPACIDAD CALORÍFICA DE LA CORRIENTE DE AMONIACO" C_6=Cp_6*M[6] "CAPACIDAD CALORÍFICA DE LA CORRIENTE DE HIDRÓGENO" CCold_HEX1=C_3 "CAPACIDAD CALORÍFICA DEL AMONIACO, FLUIDO FRÍO" CHot_HEX1=C_6 "CAPACIDAD CALORÍFICA DEL HIDRÓGENO, FLUIDO CALIENTE" "DEL RESULTADO DE LAS CAPACIDADES CALORÍFICAS TENEMOS QUE CHot_HEX1 ES EL VALOR MÁS PEQUEÑO, POR ENDE, LE CORRESPONDE SER C_min" CHEX1_MIN=C_6 "CAPACIDAD CALORÍFICA MÍNIMA PARA HEX1" "UTILIZANDO LA DEFINICIÓN DE EFICACIA DE UN INTERCAMBIADOR DE CALOR, EXPRESADO EN VALOR DE LAS TEMPERATURAS DE LAS CORRIENTES Y LA CAPACIDAD CALORÍFICA TENEMOS QUE:" epsilon_HEX1=(T[6]-T[8])/(T[6]-T[3]) "AQUÍ SE CONOCE EL VALOR DE T[8]" "BALANCE DE ENERGÍA DE HEX1" C_6*(T[6]-T[8])=C_3*(T[5]-T[3]) "DE ESTA PARTE SE CONOCERÁ T[5]" "ANÁLISIS DE LA UNIDAD DSU" "ENERGÍA NECESARIA PARA LA REACCIÓN DE DSU, SEPARACIÓN DE AMONIACO" DELTAh_dmolar=45.90*CONVERT(kJ/mol,kJ/kmol) "CALOR ESENCIAL PARA LA REACCIÓN ENDOTÉRMICA" DELTAh_d=DELTAh_dmolar/Pm_NH3
--	--	---

T0=CONVERTTEMP(C,K/25)			s[6]=Entropy(H2,T=T[8],P=P[6])-Entropy(H2,T=T,P=P[6])	QICE_DOT=M[4]*HHV_NH3+M[9]*HHV_H2+M[14]*h[14]-M[12]*h[12]-WICE_DOT	
"CÁLCULO DE CALOR ESPECÍFICO DE NH3 COMO EN FASE GASEOSA (ECUACIÓN DE SHOMATE)"			s[8]=Entropy(H2,T=T[8],P=P[8])-Entropy(H2,T=T,P=P[8])	"....."	
T_DSU=T[6] "SE SUPONDRÁ QUE LAS CORRIENTES DE SALIDA DEL DSU, ESTARÁN AL MISMO VALOR QUE LA TEMPERATURA DE OPERACIÓN DE ESTE"			s[9]=s[8]	"EFICIENCIA ENERGÉTICA DE ICE"	
TDSU_r=T_DSU/1000 "ITEMPERATURA CONVERTIDA DE ACUERDO A LAS ESPECIFICACIONES DEL POLINOMIO"			s[10]=s[9]	ETA_ICE=WICE_DOT/(M[4]*HHV_NH3+M[9]*HHV_H2)	
A=19.99563			s[11]=Entropy(H2,T=T[11],P=P[11])-Entropy(H2,T=T,P=P[11])	"....."	
B=-49.77119			"NITRÓGENO"	"....."	
C=-15.37599			s[7]=Entropy(N2,T=T[7],P=P[7])-Entropy(N2,T=T,P=P[7])	"DESTRUCCIÓN DE EXERGÍA TÉRMICA EN EL ICE"	
D=1.921168			"IAIRE"	ExQICE_DOT=(1-(T[0]/T_P))*QICE_DOT	
E=0.189174			s[14]=Entropy(Air,T=T[14],P=P[14])-Entropy(Air,T=T,P=P[14])	"....."	
Cpmolar_NH3=A+B*TDSU_r+C*(TDSU_r)^2+D*(TDSU_r)^3+E/(TDSU_r)^2 "POLINOMIO PARA DETERMINAR EL CP DEL NH3 EN J/mol*K, EN FASE GASEOSA, NECESARIO DEBIDO A LAS LIMITANTES DE EES EN NH3 EN RANGO DE TEMPERATURAS DISPONIBLES HASTA 700 K"			"CÁLCULO DE ENTROPIA DE GASES REFERENCIADA A 0 °C"	"....."	
Cpm_NH3=Cpmolar_NH3*CONVERT(J/mol*K,kJ/kmol*K)			s_H2O12=Entropy(H2O,T=T[12],P=P[12])-Entropy(H2O,T=T,P=P[12]) "ENTROPIA DE H2O COMO GAS IDEAL REFERENCIADO A 0 °C"	"DESTRUCCIÓN DE EXERGÍA EN EL ICE"	
"CONVERSIÓN A kJ/kmol*K"			s_N212=Entropy(N2,T=T[12],P=P[12])-Entropy(N2,T=T,P=P[12]) "ENTROPIA DE N2 COMO GAS IDEAL REFERENCIADO A 0 °C"	ex4_NH3=HHV_NH3+ex[4]	
Cp_NH3=Cpm_NH3/1000 "CALOR ESPECÍFICO DE NH3 COMO GAS EN kJ/kg*K"			s[13]=fm_H2O*s_H2O12+fm_N2*s_N212 "ENTROPIA DE GASES DE COMBUSTIÓN REFERENCIADOS A T=0[C]"	ex9_H2=HHV_H2+ex[9]	
DELTAh_NH3=Cp_NH3*(T_DSU-T0) "CAMBIO EN LA ENERGÍA DE LA CORRIENTE DE NH3 QUE SE DISOCIA"			s_H2O13=Entropy(H2O,T=T[13],P=P[13])-Entropy(H2O,T=T,P=P[13]) "ENTROPIA DE H2O COMO GAS IDEAL REFERENCIADO A 0 °C"	M[4]*ex4_NH3+M[9]*ex9_H2+M[14]*ex[14]=M[12]*ex[12]+WICE_DOT+ExQICE_DOT	
x_d=1 "IFRACCIÓN DE DISOCIACIÓN, EN EL SUPUESTO DE QUE TODO SE SEPARA"			s_N213=Entropy(N2,T=T[13],P=P[13])-Entropy(N2,T=T,P=P[13]) "ENTROPIA DE N2 COMO GAS IDEAL REFERENCIADO A 0 °C"	"....."	
ETA_d=0.9 "EFICIENCIA DE CONVERSIÓN DEL PROCESO DE DESCOMPOSICIÓN TÉRMICA"			s[13]=fm_H2O*s_H2O13+fm_N2*s_N213 "ENTROPIA DE GASES DE COMBUSTIÓN REFERENCIADOS A T=0[C]"	"EFICIENCIA EXERGÉTICA DE ICE"	
DELTAh_DSU=DELTAh_NH3*x_d+ETA_d*DELTAh_d "CALOR ESPECÍFICO NECESARIO PARA DESCOMPONER PARCIAL O TOTALMENTE EL NH3"			"....."	psl_ICE=WICE_DOT/(M[4]*ex4_NH3+M[9]*ex9_H2)	
"BALANCE DE ENERGÍA DE DSU"			"ANÁLISIS EXERGÉTICO DE LA PRIMERA PARTE DEL SISTEMA"	"....."	
M[5]*DELTAh_DSU=M[12]*Cp_gases*(T[12]-T[13]) "TASA DE CALOR QUE RECIBE EL NH3 DE LOS GASES DE COMBUSTIÓN PARA DISOCIARSE, ANÁLISIS LADO GASES PARA CONOCER T[13]"			"DETERMINACIÓN DE LA EXERGÍA ESPECÍFICA DE FLUJO DE CADA ESTADO"	"....."	
M[5]*DELTAh_DSU=M[12]*(h[12]-h[13]) "CÁLCULO DE h[13]"			"PARA EL AMONIACO"	"....."	
"CALOR SUMINISTRADO AL DSU"			"DETERMINACIÓN DE LAS CONDICIONES DE REFERENCIA PARA EL AMONIACO"	"....."	
QDELTAh_DSU=M[5]*DELTAh_d "CALOR REQUERIDO PARA LA REACCIÓN EN FORMA DE TASA"			"ESTADO 0"	"ANÁLISIS ELECTROQUÍMICO DE CELDA DE COMBUSTIBLE FC, PILA STACK"	
"....."			"FLUJO AMONIACO"	"DATOS DE ENTRADA PARA LOS CÁLCULOS DE VOLTAJE Y POTENCIA DE LA PILA."	
"....."			\$REFERENCE Ammonia IIR	J=1.15[A/cm^2] "DENSIDAD DE CORRIENTE DE UNA CELDA"	
"CÁLCULO DE PROPIEDADES DE ESTADOS FALTANTES"			Psat@T0=Pressure(Ammonia,T=T[0],x=1)	A_cell=900[cm^2] "ÁREA DE UNA CELDA"	
"IPARA ESTA PARTE ES NECESARIO SABER EN QUÉ FASE SE ENCUENTRA EL AMONIACO DE LA CORRIENTE 5, PARA ASÍ PODER LLAMAR A SUS RESPECTIVAS PROPIEDADES TERMODINÁMICAS, PROCEDEREMOS A VER SI EXISTE CALIDAD EN ESTE ESTADO"			Tsat@P0=Temperature(Ammonia,P=P[0],x=1)	T_FC=CONVERTTEMP(C,K,80) "TEMPERATURA DE OPERACIÓN FC"	
			"IYA QUE P[5] < Psat@T5; Y T[5] < Tsat@P5, ES POR TANTO UN VAPOR SOBRECALENTADO COMO SE ESPERABA"	TC=80["C"] "TEMPERATURA DE OPERACIÓN DE LA FC EN GRADOS CENTÍGRADOS"	
			\$REFERENCE Ammonia IIR	PA=2*CONVERT(bar,atm) "PRESIÓN DE OPERACIÓN FC, SE TOMA COMO PRESIÓN DE ENTRADA AL ÁNODO"	
"ESTADO 5"			h0_NH3=Enthalpy(Ammonia,T=T[0],P=P[0])	PC=PA "PRESIÓN DE OPERACIÓN DEL CÁTODO, SE CONSIDERA IGUAL A LA DEL ÁNODO"	
			s0_NH3=Entropy(Ammonia,T=T[0],P=P[0])	alpha_an=1 "COEFICIENTE DE TRANSFERENCIA DE ELECTRONES DEL ÁNODO, SE TOMA DE 0 A 1"	
			ex[1]=(h[1]-h0_NH3)-T[0]*(s[1]-s0_NH3)	alpha_ca=0.5 "COEFICIENTE DE TRANSFERENCIA DE ELECTRONES DEL CÁTODO, SE TOMA DE 0 A 1"	
"FLUJO AMONIACO"			ex[2]=(h[2]-h0_NH3)-T[0]*(s[2]-s0_NH3)	n_an=2 "NÚMERO DE ELECTRONES INVOLUCRADOS EN LA REACCIÓN DEL ÁNODO"	
			ex[3]=ex[2]	n_ca=4 "NÚMERO DE ELECTRONES INVOLUCRADOS EN LA REACCIÓN DEL CÁTODO"	
			ex[4]=ex[3]	delta_mem=0.0183[cm] "ESPESOR DE MEMBRANA DE LA FC"	
"ESTADO 0"			ex[5]=(h[5]-h0_NH3)-T[0]*(s[5]-s0_NH3)	J_max=2 [A/cm^2] "DENSIDAD DE CORRIENTE MÁXIMA"	
			"PARA EL HIDRÓGENO"	beta_2=2 "CONSTANTE PARA LA DETERMINACIÓN DE LAS PERDIDAS DE DIFUSIÓN DE LA FC"	
			"DETERMINACIÓN DE LAS CONDICIONES DE REFERENCIA PARA EL NITRÓGENO"	n_fc=180 "NÚMERO DE CELDAS"	
"FLUJO HIDRÓGENO"			"ESTADO 0"	Wfan_DOT=5[kW] "POTENCIA CONSUMIDA POR EL VENTILADOR DE LA FC"	
			h0_H2=Enthalpy(H2,T=T[0])-Enthalpy(H2,T=T)	Wcp_DOT=5[kW] "POTENCIA CONSUMIDA POR LA BOMBA DE CIRCULACIÓN DEL REFRIGERANTE DE LA FC"	
			s0_H2=Entropy(H2,T=T[0],P=P[0])-Entropy(H2,T=T,P=P[0])	"CONSTANTES"	
"FLUJO NITRÓGENO"			ex[6]=(h[6]-h0_H2)-T[0]*(s[6]-s0_H2)	F=96485.3[C/mol] "CONSTANTE DE FARADAY"	
			ex[7]=(h[7]-h0_H2)-T[0]*(s[7]-s0_H2)	R=8.314472[J/mol*K] "CONSTANTE UNIVERSAL DE LOS GASES"	
			ex[8]=(h[8]-h0_H2)-T[0]*(s[8]-s0_H2)	"DATOS DE ENTRADA PARA LOS CÁLCULOS DE FLUJOS EN LA PILA."	
"PARA LA MEZCLA DE GASES"			ex[9]=ex[8]	st_H2=1.2 "IESTEQUIOMETRÍA DEL HIDRÓGENO EN LA FC"	
			ex[10]=ex[9]	st_O2=2 "IESTEQUIOMETRÍA DE OXÍGENO EN LA FC"	
			ex[11]=(h[11]-h0_H2)-T[0]*(s[11]-s0_H2)	Pm_O2=MolarMass(O2) "MASA MOLAR DEL OXÍGENO"	
"DETERMINACIÓN DE LAS CONDICIONES DE REFERENCIA PARA EL NITRÓGENO"			"PARA EL NITRÓGENO"	"TEMPERATURA APROXIMADA DE PARED DE FC"	
			"DETERMINACIÓN DE LAS CONDICIONES DE REFERENCIA PARA EL NITRÓGENO"	T_PFC=CONVERTTEMP(C,K,60)	
			"ESTADO 0"	"....."	
"FLUJO GASES DE COMBUSTIÓN"			"FLUJO NITRÓGENO"	"....."	
			h0_N2=Enthalpy(N2,T=T[0])-Enthalpy(N2,T=T)	"DETERMINACIÓN DEL VOLTAJE REAL DE SALIDA EN LA CELDA"	
			s0_N2=Entropy(N2,T=T[0],P=P[0])-Entropy(N2,T=T,P=P[0])	"CÁLCULO DE VOLTAJE REVERSIBLE Y RESTA DE LAS DIVERSAS CAÍDAS EN LA CELDA"	
"ESTADO 0"			ex[7]=(h[7]-h0_N2)-T[0]*(s[7]-s0_N2)	"PRESIÓN DE SATURACIÓN DEL AGUA QUE SALE DE LA FC, A LA TEMPERATURA DE OPERACIÓN DE LA FC"	
			"PARA LA MEZCLA DE GASES"	P_sat=Pressure(Steam,T=T_FC,x=1)*CONVERT(kPa,atm)	
			"DETERMINACIÓN DE LAS CONDICIONES DE REFERENCIA PARA LA MEZCLA DE GASES"	"PRESIÓN PARCIAL DE HIDRÓGENO"	
"FLUJO GASES DE COMBUSTIÓN"			"ESTADO 0"	P_H2=0.5*(PA/EXP(1.653*J/(T_FC*1.334)))-P_sat "PRESIÓN PARCIAL DE H2 DE ÁNODO"	
			h0_H2O=Enthalpy(H2O,T=T[0],P=P[0])-Entropy(H2O,T=T,P=P[0])	"PRESIÓN PARCIAL DE OXÍGENO"	
			s_H2O0=Entropy(H2O,T=T[0],P=P[0])-Entropy(H2O,T=T,P=P[0]) "ENTROPIA DE H2O COMO GAS IDEAL REFERENCIADO A 0 °C"	P_O2=PC/EXP(4.192*J/(T_FC*1.334))-P_sat "PRESIÓN PARCIAL DE O2 DE CÁTODO"	
"ESTADO 0"			s_N2O=Entropy(N2,T=T[0],P=P[0])-Entropy(N2,T=T,P=P[0])	"VOLTAJE REVERSIBLE DE LA CELDA." "APLICANDO LA ECUACIÓN DE NERST, CON CONDICIONES ESTÁNDAR DE REFERENCIA, SE DETERMINARÁ EL VOLTAJE IDEAL"	
			"ENTROPIA DE H2O COMO GAS IDEAL REFERENCIADO A 0 °C"	E_r=1.482-0.000845*T_FC+4.31*10^(-31)*T_FC*lnP_H2/(P_O2*0.5)) "VOLTAJE IDEAL DE LA CELDA, QUE CONSIDERA LA VARIACIÓN DE TEMPERATURA"	
			"ENTROPIA DE N2 COMO GAS IDEAL REFERENCIADO A 0 °C"	"....."	
"ESTADO 0"			s0_GASES=fm_H2O*s_H2O0+fm_N2O*s_N2O "ENTROPIA DE GASES DE COMBUSTIÓN REFERENCIADOS A T=0[C]"	"....."	
			ex[12]=(h[12]-h0_GASES)-T[0]*(s[12]-s0_GASES)	"PERDIDAS DE VOLTAJE DEBIDO A LA ACTIVACIÓN DEL ÁNODO Y CÁTODO"	
			ex[13]=(h[13]-h0_GASES)-T[0]*(s[13]-s0_GASES)	"....."	
"PARA EL AIRE"			"PARA EL AIRE"	"....."	
			"DETERMINACIÓN DE LAS CONDICIONES DE REFERENCIA PARA EL AIRE"	"....."	
			"ESTADO 0"	"....."	
"FLUJO DE AIRE"			"FLUJO DE AIRE"	"....."	
			h0_AIRE=Enthalpy(Air,T=T[0])-Enthalpy(Air,T=T)	"....."	
			s0_AIRE=Entropy(Air,T=T[0],P=P[0])-Entropy(Air,T=T,P=P[0])	"....."	
"ESTADO 0"			ex[14]=(h[14]-h0_AIRE)-T[0]*(s[14]-s0_AIRE)	"....."	
			"BALANCE DE ENERGÍA DEL ICE"	"....."	
			"DETERMINACIÓN DE CALOR PERDIDO"	"....."	
"HIDRÓGENO"			"....."	"....."	
			"....."	"....."	
			"....."	"....."	
"DETERMINACIÓN DE LAS ENTROPIAS ABSOLUTAS PARA GASES IDEALES Y MEZCLAS QUE INTERVIENEN EN EL SISTEMA"			"....."	"....."	
"HIDRÓGENO"			"....."	"....."	

$J0=1.08*10^{(-21)}*EXP(0.086*T_FC)$ "DENSIDAD DE CORRIENTE DE INTERCAMBIO, SE ASUME IGUAL PARA EL ÁNODO Y EL CÁTODO"

$E_actan=(R*T_FC)/(alpha_an*n_an*F)*ln(J/J0)$ "PÉRDIDA DE VOLTAJE DEBIDO A LA ACTIVACIÓN DEL ÁNODO"
 $E_actca=(R*T_FC)/(alpha_ca*n_ca*F)*ln(J/J0)$ "PÉRDIDA DE VOLTAJE DEBIDO A LA ACTIVACIÓN DEL CÁTODO"

$E_act=E_actan+E_actca$ "PÉRDIDAS DE ACTIVACIÓN TOTALES EN LA CELDA, EN V"
"
"

"PÉRDIDAS DE VOLTAJE ÓHMICAS"

"IPARA PODER CALCULAR LAS PÉRDIDAS ÓHMICAS DE LA CELDA SE DEBE CONOCER SU RESISTENCIA INTERNA, LO CUAL SE REALIZA A CONTINUACIÓN"

"IPARA DETERMINAR LA RESISTENCIA INTERNA DE LA CELDA DE NAFIÓN 117 SE UTILIZARAN LAS SIGUIENTES ECUACIONES EMPÍRICAS"
 $a_H2O=0.8$

"ICOMO $0 < a_H2O < 1$, SE UTILIZA LA SIGUIENTE ECUACIÓN PARA CALCULAR EL CONTENIDO DE AGUA EN LA MEMBRANA"
 $lambda_mem=0.043+(17.81*a_H2O)-39.85*(a_H2O^2)+39.85*(a_H2O^3)$

"CONDUCTIVIDAD DE LA MEMBRANA"

$sigma_mem=(0.005139/lambda_mem-0.00326)*exp(1268/303-(1/T_FC))$

"RESISTENCIA ELÉCTRICA DE LA MEMBRANA"

$R_ohm=delta_mem/sigma_mem$ "RESISTENCIA ELÉCTRICA DE LA MEMBRANA DE LA FC, EN OHM-CM2"

$E_ohm=J*R_ohm$ "PÉRDIDAS DE VOLTAJE ÓHMICAS EN V"

"
"
"
"

"PÉRDIDAS DE VOLTAJE POR CONCENTRACIÓN"

$VALOR=(P_O2/0.1173)+P_sat$

"ICOMO VALOR > 2 SE UTILIZA LA SIGUIENTE ECUACIÓN EMPÍRICA"

$beta_1=(8.66*10^{(-5)}*T_FC-0.068)*((P_O2/0.1173)+P_sat)+(-1.6*10^{(-4)}+0.54)$

$E_conc=3*(beta_1*(J/J_max))^2$ "PÉRDIDAS DE CONCENTRACIÓN DE LA FC, EN V"

"VOLTAJE TOTAL DE SALIDA DE FC"

$E_T=E_r-E_act-E_ohm-E_conc$

"
"
"
"

"POTENCIA DE UNA CELDA"

$Wcell_DOT=(E_T)*A_cell$

"POTENCIA PRODUCIDA POR LA PILA"

$Wstack_DOT=(n_fc*Wcell_dot)*CONVERT(W,kW)$

"
"
"
"

"DETERMINACIÓN DE FLUJOS MÁSCOS SEGUNDA PARTE DEL SISTEMA"

"CORRIENTE 17"
"AIRE USADO POR LA FC, EN EL CÁTODO, AIRE ESTÁNDAR CONSIDERADO COMO SECO"

"OXÍGENO USADO POR LA FC EN CÁTODO"

$N_O2in=st_O2*(Wstack_dot*CONVERT(kW,W)/(4*E_T*F))*CONVER$
 $T(mol/s,mol/min)$
 $M_O2in=(N_O2in*CONVERT(mol/min,kmol/s))*Pm_O2$

"AIRE SECO SUMINISTRADO A LA FC, CONSIDERANDO LA ESTEQUIOMETRÍA DEL O2"

$r_O2=1/(1+3.76)$ "RADIO ESTEQUIOMÉTRICO DEL O2"

$N_AIREin=st_O2*(Wstack_dot*CONVERT(kW,W)/(4*E_T*F*r_O2))*CONVERT(mol/s,mol/min)$
 $N[17]=N_AIREin$
 $M_AIREin=(N_AIREin*CONVERT(mol/min,kmol/s))*Pm_Aire$
 $M[17]=M_AIREin$

"CORRIENTE 148 FLUJO DE AIRE QUE ENTRA AL COMPRESOR"
"AIRE SECO ESTÁNDAR QUE SALE DEL COMPRESOR"
 $N14_B=N[17]$
 $M14_B=M[17]$

"CORRIENTE 15"
"AIRE SECO ESTÁNDAR QUE SALE DEL COMPRESOR"
 $N[15]=N14_B$
 $M[15]=M14_B$

"CORRIENTE 16"
"AIRE SECO COMPRIMIDO Y ENFRIADO EN HEX 2"
 $N[16]=N[15]$
 $M[16]=M[15]$

"AIRE SECO QUE SALE DEL CÁTODO"
 $M_AIREout=M_AIREin-M_O2in$

"CORRIENTE 18"
"HIDRÓGENO USADO POR LA FC, EN EL ÁNODO, SE CONSIDERA SECO"

$N[18]=st_H2*(Wstack_dot*CONVERT(kW,W)/(2*E_T*F))*CONVERT(mol/s,mol/min)$
 $M[18]=(N[18]*CONVERT(mol/min,kmol/s))*Pm_H2$

"CORRIENTE 19"
"HIDRÓGENO NO USADO POR LA FC, SE CONSIDERA SECO"
 $N[19]=(st_H2-1)*(Wstack_dot*CONVERT(kW,W)/(2*E_T*F))*CONVERT(mol/s,mol/min)$

$M[19]=(N[19]*CONVERT(mol/min,kmol/s))*Pm_H2$

"FLUJO MÁSCO DE HIDRÓGENO QUE REQUIERE PARA FUNCIONAR LA FC, SE SUMINISTRA DE UN TANQUE DE HIDRÓGENO UTILIZANDO ESTAS CONDICIONES DE FUNCIONAMIENTO"
 $M_H2=M[18]-M[19]$ "HIDRÓGENO QUE SE SUMINISTRA DEL TANQUE UNA VEZ GENERADO EN DSU"

"CORRIENTE 20"
"AGUA LÍQUIDA A TEMPERATURA DE OPERACIÓN DE FC Y PRESIÓN ATMOSFÉRICA"

"TASA DE PRODUCCIÓN DE AGUA EN LA MEMBRANA, SE CONSIDERA QUE SALE DEL LADO DEL CÁTODO Y SERÁ REUTILIZADA PARA HUMIDIFICAR EL AIRE DE ENTRADA"
 $N_H2Ogen=(Wstack_dot*CONVERT(kW,W)/(2*E_T*F))*CONVERT(mol/s,mol/min)$
 $M_H2Ogen=(N_H2Ogen*CONVERT(mol/min,kmol/s))*Pm_H2O$
 $N[20]=N_H2Ogen$
 $M[20]=M_H2Ogen$

"
"
"
"

"CÁLCULOS DE COMPONENTES AUXILIARES DE LA FC"

"COMPRESOR DE AIRE"

$eta_comp=0.85$ "EFICIENCIA ISOENTRÓPICA DEL COMPRESOR"

"SUPONEMOS AIRE ESTÁNDAR MODELADO COMO GAS IDEAL Y CALORES ESPECÍFICOS CONSTANTES"

"ESTADO 14B"

$P14_B=101.325(kPa)$
 $T14_B=CONVERT(TEMP(C,K,25))$
 $Cp_Airecom=Cp(Air,T=T14_B)$
 $K_Aire=IsentropicExponent(Air,T=T14_B)$
 $gamma_Aire=(K_aire-1)/K_aire$

"ESTADO 15"
"SUPONEMOS QUE EL AIRE QUE ENTRA AL HEX 2 TIENE LA PRESIÓN DE OPERACIÓN DE LA FC DEL LADO DEL CÁTODO, TODA LA LÍNEA TENDRÁ LA MISMA PRESIÓN"

$P[15]=2*CONVERT(bar,kPa)$
 $rc=P[15]/P14_B$

"SIGUE SIENDO AIRE SECO"

"TEMPERATURA DE SALIDA DEL AIRE DEL COMPRESOR VALOR REAL"

$T[15]=T14_B*(1+((rc*gamma_Aire-1)*eta_comp))$

"TRABAJO POR UNIDAD DE MASA DEL COMPRESOR"

$w_comp=Cp_Airecom*(T[15]-T14_B)$

"POTENCIA DE COMPRESOR DE AIRE DE ENTRADA"
 $WC_DOT=w_comp*M[15]$

"
"
"
"

"CÁLCULO DE PROPIEDADES TERMODINÁMICAS DE LOS ESTADOS FALTANTES"

"ESTADO 15"
"FLUJO AIRE SECO"
 $N[15]=Enthalpy(Air,T=T[15])-Enthalpy(Air,T=T)$ "ENTALPÍA DE AIRE REFERENCIADA A 0°C"
 $s[15]=Entropy(Air,T=T[15],P=P[15])-Entropy(Air,T=T,P=P[15])$

"ESTADO 18"
"FLUJO HIDRÓGENO SECO QUE ENGRESA AL ÁNODO"
 $P[18]=PA*CONVERT(atm,kPa)$
 $T[18]=T[11]$ "TEMPERATURA A LA CUAL SE SUMINISTRA EL H2, DEL SISTEMA DE DISOCIACIÓN"
 $N[18]=Enthalpy(H2,T=T[18])-Enthalpy(H2,T=T)$ "ENTALPÍA DE H2 COMO GAS IDEAL REFERENCIADO A T=0 °C"
 $s[18]=Entropy(H2,T=T[18],P=P[18])-Entropy(H2,T=T,P=P[18])$

"ESTADO 19"
"FLUJO HIDRÓGENO SECO QUE RETORNA AL TANQUE PARA SER REUTILIZADO"
 $P[19]=P[18]$
 $T[19]=T[11]$
 $N[19]=Enthalpy(H2,T=T[19])-Enthalpy(H2,T=T)$ "ENTALPÍA DE H2 COMO GAS IDEAL REFERENCIADO A T=0 °C"
 $s[19]=Entropy(H2,T=T[19],P=P[19])-Entropy(H2,T=T,P=P[19])$

"ESTADO 20"
"FLUJO AGUA LÍQUIDA A TEMPERATURA DE LA FC Y PRESIÓN ATMOSFÉRICA"
 $P[20]=P[0]$
 $T[20]=T_FC$
 $h[20]=Enthalpy(Steam,T=T[20],P=P[20])$
 $s[20]=Entropy(Steam,T=T[20],P=P[20])$

"
"
"
"

"INTERCAMBIADOR DE CALOR HEX 2"

"SI SE OBSERVA LA TABLA DE PROPIEDADES TERMODINÁMICAS, SE OBSERVA QUE LA TEMPERATURA DEL AIRE DE ENTRADA ES MAYOR QUE LA DE AGUA, POR LO TANTO, LA CORRIENTE FRÍA SERÁ LA DE AGUA, Y LA CORRIENTE CALIENTE LA DE AIRE."

$epsilon_HEX2=0.8$ "EFECTIVIDAD DEL INTERCAMBIADOR DE CALOR 2"
 $Cp_20=Cp(Steam,T=T[20],P=P[20])$ "CALOR ESPECÍFICO DE AGUA DE SALIDA DE LA FC"
 $Cp_15=Cp_19*(M[15])$ "CAPACIDAD CALORÍFICA DEL AIRE COMPRIMIDO, QUE SE DESEA ENFRIAR"

$C_20=Cp_20*M[20]$ "CAPACIDAD CALORÍFICA DE LA CORRIENTE DE AGUA"
 $C_15=Cp_15*M[15]$ "CAPACIDAD CALORÍFICA DE LA CORRIENTE DE AIRE"

$Chd_HEX2=C_15$ "CAPACIDAD CALORÍFICA DE LA CORRIENTE CALIENTE"
 $Cold_HEX2=C_20$ "CAPACIDAD CALORÍFICA DE LA CORRIENTE FRÍA"

$CHEX2_MIN=C_20$ "CAPACIDAD CALORÍFICA MÍNIMA PARA HEX2"
 $epsilon_HEX2=(T205-T[20])/(T[15]-T[20])$ "DE ESTA PARTE SE DETERMINA LA T205"

$C_20*(T205-T[20])=C_15*(T[15]-T[16])$ "DE ESTA PARTE SE DETERMINA LA T16"

"
"
"
"

"ESTADO 16"
"AIRE SECO COMPRIMIDO Y ENFRIADO"
 $P[16]=P[15]$
 $h[16]=Enthalpy(Air,T=T[16])-Enthalpy(Air,T=T)$ "ENTALPÍA DE AIRE REFERENCIADA A 0°C"
 $s[16]=Entropy(Air,T=T[16],P=P[16])-Entropy(Air,T=T,P=P[15])$

"ESTADO 17"
"FLUJO DE AIRE SECO QUE INGRESA AL CÁTODO"
 $P[17]=P[16]$
 $T[17]=T[16]$
 $h[17]=h[16]$
 $s[17]=s[16]$

"
"
"
"

"POTENCIA NETA DE SALIDA DEL SISTEMA DE FC"

$WFC_DOT=Wstack_DOT-WC_DOT-WFAN_DOT-Wcp_DOT$

"
"
"
"

"TASA DE CALOR PRODUCIDO POR LA FC"

$QFC_DOT=WFC_DOT*((1.2/E_T)-1)$

"
"
"
"

"EFICIENCIA ENERGÉTICA DE LA FC"

$ETA_FC=WFC_DOT/(M[18]*LHV_H2-M[19]*LHV_H2)$

"
"
"
"

"DETERMINACIÓN DE EXERGÍA DE FLUJO POR TIPO DE CORRIENTE"

"PARA EL HIDRÓGENO"
"DETERMINACIÓN DE LAS CONDICIONES DE REFERENCIA PARA EL NITRÓGENO"

$ex[18]=(h[18]-h0_H2)-T[0]*(s[18]-s0_H2)$
 $ex[19]=(h[19]-h0_H2)-T[0]*(s[19]-s0_H2)$

"PARA EL AIRE SECO"
"DETERMINACIÓN DE LAS CONDICIONES DE REFERENCIA PARA EL AIRE"

$ex[15]=(h[15]-h0_AIRE)-T[0]*(s[15]-s0_AIRE)$
 $ex[16]=(h[16]-h0_AIRE)-T[0]*(s[16]-s0_AIRE)$
 $ex[17]=(h[17]-h0_AIRE)-T[0]*(s[17]-s0_AIRE)$

"PARA EL AGUA"
"DETERMINACIÓN DE LAS CONDICIONES DE REFERENCIA PARA EL AGUA"
"ESTADO 0"
"FLUJO DE AGUA LÍQUIDA, A CONDICIONES AMBIENTE ES UN LÍQUIDO COMPRIMIDO"

$h_H2Oliq=Enthalpy(Steam,T=T[0],P=P[0])$
 $s_H2Oliq=Entropy(Steam,T=T[0],P=P[0])$

$ex[20]=(h[20]-h_H2Oliq)-T[0]*(s[20]-s_H2Oliq)$

"
"
"
"

"TASA DE EXERGÍA TÉRMICA DE FC"

$EXQFC_DOT=((T[0]/T_PFC))*QFC_DOT$

"BALANCE DE EXERGÍA PARA LA FC, COMO VOLUMEN DE CONTROL, DESPRECIANDO EL AIRE"

$ex18_H2=LHV_H2+ex[18]$
 $ex19_H2=ex18_H2$

$M_H2*ex18_H2=M[20]*ex[20]+WFC_DOT+EXQFC_DOT+Exd_FC$

"EFICIENCIA EXERGÉTICA DE FC"

$psi_FC=WFC_DOT/(M[18]*ex18_H2-M[19]*ex19_H2)$

"
"
"
"

"ANÁLISIS DEL SISTEMA DE VEHÍCULO GENERAL"

$ex2_NH3=HHV_NH3+ex[2]$

"DESTRUCCIÓN DE EXERGÍA DEL SISTEMA GENERAL DE VEHÍCULO"
"BALANCE DE EXERGÍA PARA EL SISTEMA GENERAL, COMO VOLUMEN DE CONTROL, DESPRECIANDO EL AIRE"

$M[2]*ex2_NH3+M[7]*ex[7]+M[13]*ex[13]+WICE_DOT+EXQICE_DOT+WFC_DOT+EXQFC_DOT+M[20]*ex[20]+Exd_SIS$

"EFICIENCIA ENERGÉTICA DEL SISTEMA EN GENERAL"

$ETA_SIS=(WICE_DOT+WFC_DOT)/(M[2]*HHV_NH3)$

"EFICIENCIA EXERGÉTICA DEL SISTEMA EN GENERAL"

$psi_SIS=(WICE_DOT+WFC_DOT)/(M[2]*ex2_NH3)$

Nomenclatura y términos empleados en los sistemas.

C.pump	Bomba de circulación de refrigerante, (Circulation pump).
CFR	Motores de investigación cooperativa de combustibles, (Cooperative fuel research).
CI	Motor de encendido por compresión, (Compression-ignition engine).
DSU	Unidad de separación por disociación de amoníaco, (Dissociation separation unit).
EV	Vehículos eléctricos, (Electric vehicle).
FCEV	Vehículos eléctricos de celda de combustible, (Fuel cell electric vehicles).
HEV	Vehículo eléctrico híbrido, (Hybrid electric vehicle).
HEX	Intercambiador de calor, (Heat exchanger).
HUP	Unidad de purificación de hidrógeno, (Hydrogen purification unit).
MCI, ICE	Motor de combustión interna, (Internal combustion engine).
PCU	Unidad de control de potencia, (Power control unit).
PHEV	Vehículo eléctrico híbrido enchufable, (Plug-in hybrid vehicle).
Pila PEM, PEMFC	Pila de combustible de membrana de intercambio de protones, (Proton exchange membrane fuel cell).
Pr	Regulador de presión, (Pressure regulator).
SI	Motor de encendido por chispa, (Spark-ignition engine).
Vent., fan	Ventilador de la pila.

Nomenclatura de parámetros.

A, a	Área de pila, actividad de agua en la pila.	[cm ²]; [adim]
C	Capacidad calorífica.	[kJ/s·K]
Cp	Calor específico a presión constante.	[kJ/kg·K]
Cv	Calor específico a volumen constante.	[kJ/kg·K]
E	Diferencia de potencial o voltaje.	[V]
ex	Exergía específica de cada corriente.	[kJ/kg]
Ė_{x,d}	Tasa de destrucción de exergía.	[kW]
Ė_{x,q}	Tasa de destrucción de exergía térmica.	[kW]
f	Fracción de masa.	[adim]
h	Entalpía.	[kJ/kg]
HHV	Poder calorífico superior.	[kJ/kg]
J	Densidad de corriente.	[A/cm ²]
K	Exponente adiabático.	[adim]
LVH	Poder calorífico inferior.	[kJ/kg]
m	Masa.	[kg]
ṁ	Flujo másico.	[kg/s]
n	Número de electrones; número de moles.	[e-], [kmol]
Ṅ	Flujo molar.	[mol/min]
n_{fc}	Número de celdas de la pila.	[adim]
P	Presión.	[atm, kPa]
Pm	Peso molecular	[kmol/kg]
Q, q	Tasa de calor.	[kW]
R, r	Resistencia; radio estequiométrico.	[Ω], [adim]
r_c	Relación de compresión.	[adim]
s	Entropía.	[kJ/kg·K]
st	Estequiometría	[adim]
T	Temperatura	[°C, K]
W	Potencia.	[kW]
x	Fracción de agua; calidad de vapor.	[%]
x_d	Fracción de disociación.	[%]
y	Fracción molar.	[adim]

Subíndices.

0, ref	Condiciones de referencia.
Aa	Relación amoníaco/aire.
act	Perdida de activación.
Aire, a	Referente a las corrientes de aire.
an	Ánodo.
c	Corriente fría, (cold)
ca	Cátodo.
cell	Referente a una sola celda de la pila.
con	Perdida de concentración.
FC	Referente a la pila de combustible, (Fuel Cell).
gases, g	Referente a las corrientes de mezcla de gases.
h	Corriente caliente, (hot).
ha	Relación hidrógeno/aire.
i	Especie.
in	Entrada.
m	Mezcla.
máx	Valor máximo.
mín	Valor mínimo.
ohm	Perdida óhmica; resistencia.
out	Salida.
p	Referente a pared del sistema.
r	Reversible.
sat	Valor de saturación.
sis	Sistema global.
Stack, st	Pila de combustible.
T	Valores totales.

Constantes.

F	Constante de Faraday = 96485.3	[C/mol]
R	Constante universal de los gases = 8.314472	[J/mol·K]

Letras griegas.

α	Coefficiente de transferencia de electrones.	[adim]
β	Constante de pérdidas de difusión.	[adim]
γ_a	Relación del exponente adiabático del aire.	[adim]
δ_{mem}	Espesor de membrana.	[cm]
Δh	Cambio de entalpía.	[kJ/kg]
ε	Efectividad de intercambiador de calor.	[adim]
η_c	Eficiencia isotérmica del compresor.	[%]
η_d	Eficiencia de descomposición térmica.	[%]
η_{FC}	Eficiencia energética del sistema de pila.	[%]
η_{ICE}	Eficiencia energética del motor.	[%]
η_{SIS}	Eficiencia energética del sistema global.	[%]
λ_{mem}	Contenido de agua de la membrana.	[adim]
σ_{mem}	Conductividad de la membrana.	[(Ω·cm) ⁻¹]
ψ_{FC}	Eficiencia exergética del sistema de pila.	[%]
ψ_{ICE}	Eficiencia exergética del motor.	[%]
ψ_{SIS}	Eficiencia exergética del sistema global.	[%]

Referencias y bibliografía.

- [1] A. E. Ehsani, Mehrdad, Yimin Gao, *Modern Electric, Hybrid Electric, and Fuel Cell Vehicles. Fundamentals, Theory, and Design.*, Second Edi., no. 1. 2010. doi: 10.16309/j.cnki.issn.1007-1776.2003.03.004.
- [2] NASA/GISS, “Global Temperature | Vital Signs – Climate Change: Vital Signs of the Planet,” NASA, 2019. <https://climate.nasa.gov/vital-signs/global-temperature/> (accessed Aug. 01, 2020).
- [3] NOAA, “Carbon Dioxide | Vital Signs – Climate Change: Vital Signs of the Planet,” NASA, 2019. <https://climate.nasa.gov/vital-signs/carbon-dioxide/> (accessed Aug. 01, 2020).
- [4] Comisión Nacional de Hidrocarburos., “Reservas de Hidrocarburos y Recursos,” *Cent. Nac. Inf. Hidrocarburos (CNIH).*, pp. 5–6, 2019.
- [5] Scott Carpenter, “Oil And Gas Discoveries Reach Four-Year High In 2019, As Exploration Spending Set To Grow,” *Forbes Magazine*, 2019. <https://www.forbes.com/sites/scottcarpenter/2020/01/11/oil-and-gas-discoveries-hit-four-year-high-in-2019-as-capital-spending-set-to-pick-up/#6324e1bc8749> (accessed Aug. 02, 2020).
- [6] bp (British Petroleum), “Oil | Energy economics | Home,” *bp plc*, 2020. <https://www.bp.com/en/global/corporate/energy-economics/statistical-review-of-world-energy/oil.html> (accessed Aug. 02, 2020).
- [7] C. Osornio-Correa, R. C. Villarreal-Calva, J. Estavillo-Galsworthy, A. Molina-Cristóbal, and S. D. Santillán-Gutiérrez, “Optimization of Power Train and Control Strategy of a Hybrid Electric Vehicle for Maximum Energy Economy,” *Ing. Investig. y Tecnol.*, vol. 14, no. 1, pp. 65–80, 2013, doi: 10.1016/s1405-7743(13)72226-1.
- [8] A. B. Negoro and A. Purwadi, “Performance Analysis on Power Train Drive System of the 2012 Toyota Camry Hybrid,” *Procedia Technol.*, vol. 11, no. Iceei, pp. 1054–1064, 2013, doi: 10.1016/j.protcy.2013.12.294.
- [9] L. Li, X. Wang, and J. Song, “Fuel consumption optimization for smart hybrid electric vehicle during a car-following process,” *Mech. Syst. Signal Process.*, vol. 87, pp. 17–29, 2017, doi: 10.1016/j.ymssp.2016.03.002.
- [10] S. Changizian, P. Ahmadi, M. Raeesi, and N. Javani, “Performance optimization of hybrid hydrogen fuel cell-electric vehicles in real driving cycles,” *Int. J. Hydrogen Energy*, no. xxxx, pp. 1–18, 2020, doi: 10.1016/j.ijhydene.2020.01.015.
- [11] N. Javani, I. Dincer, G. F. Naterer, and B. S. Yilbas, “Exergy analysis and optimization of a thermal management system with phase change material for hybrid electric vehicles,” *Appl. Therm. Eng.*, vol. 64, no. 1–2, pp. 471–482, 2014, doi: 10.1016/j.applthermaleng.2013.11.053.
- [12] M. Ezzat and I. Dincer, “Exergoeconomic analysis and optimization of a new hybrid

-
- fuel cell vehicle,” *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 45, no. 9, pp. 5734–5744, 2020, doi: 10.1016/j.ijhydene.2019.07.104.
- [13] Allen E. Funhs, *Hybrid vehicles and the future of personal transportation*, vol. 47, no. 01, 2009. doi: 10.5860/choice.47-0300.
- [14] E. Paoletti, “Terminología de vehículos híbridos,” *Language Update*, vol. 8, núm. 2, 2011. https://www.btb.termiumpius.gc.ca/tpv2guides/guides/caleid/index-fra.html?lang=fra&lettr=indx_autr8fq9MkNqa2sc&page=9BJJzhg60vHI.html (accessed Aug. 03, 2020).
- [15] U.S. Department of Energy, “Alternative Fuels Data Center: How Do Gasoline Cars Work?,” *Department of Energy*, 2020. <https://afdc.energy.gov/vehicles/how-do-gasoline-cars-work> (accessed Aug. 03, 2020).
- [16] U.S. Department of Energy, “Alternative Fuels Data Center: How Do All-Electric Cars Work?,” *Department of Energy*, 2020. <https://afdc.energy.gov/vehicles/how-do-all-electric-cars-work> (accessed Aug. 03, 2020).
- [17] M. Cortijo, “Diferencias entre coche híbrido, híbrido enchufable, eléctrico y de hidrógeno,” *auto10*, 2020.
- [18] U.S. Department of Energy, “Alternative Fuels Data Center: How Do Hybrid Electric Cars Work?,” *Department of Energy*, 2020. <https://afdc.energy.gov/vehicles/how-do-hybrid-electric-cars-work> (accessed Aug. 03, 2020).
- [19] U.S. Department of Energy, “Alternative Fuels Data Center: How Do Plug-In Hybrid Electric Cars Work?,” *Department of Energy*, 2020. <https://afdc.energy.gov/vehicles/how-do-plug-in-hybrid-electric-cars-work> (accessed Aug. 03, 2020).
- [20] U.S. Department of Energy, “Alternative Fuels Data Center: How Do Fuel Cell Electric Vehicles Work Using Hydrogen?,” *Department of Energy*, 2020. <https://afdc.energy.gov/vehicles/how-do-fuel-cell-electric-cars-work> (accessed Aug. 03, 2020).
- [21] A. Otero, “Coches de hidrógeno: así funciona esta tecnología de cero emisiones,” *Motorpasion*, 2018. <https://www.motorpasion.com/tecnologia/coches-de-hidrogeno-asi-funciona-esta-tecnologia-de-cero-emisiones> (accessed Jul. 27, 2020).
- [22] M. Ezzat, “Conceptual development and analysis of sustainable powering options for hybrid vehicles,” no. February, 2018, [Online]. Available: <http://ir.library.dcu.ie/handle/10155/910>
- [23] Chemical Safety Facts, “Usos y beneficios del amoníaco | Información sobre la seguridad química,” *ChemicalSafetyFacts.org*, 2021. <https://www.chemicalsafetyfacts.org/es/amoniac/> (accessed Jan. 10, 2021).
- [24] E. Ministerio para la Transición Ecológica y el Reto Demográfico, Plaza San Juan de la Cruz, “NH₃ (Amoníaco),” 7^a *Jornada de información y participación pública PRTR-España 2020*, 2020. <http://www.prtr-es.es/NH3-amoniac,15593,11,2007.html>
-

(accessed Jan. 10, 2021).

- [25] İ. Dinçer and C. Zamfirescu, *Sustainable Energy Systems and Applications*, 1st ed., vol. 53, no. 9. Boston, MA: Springer US, 2012. doi: 10.1007/978-0-387-95861-3.
- [26] E. A. Brohi, “Ammonia as fuel for internal combustion engines?,” *MASTER’S THESIS Sustain. ENERGY Syst. CHALMERS Univ. Technol.*, pp. 01–31, 2014.
- [27] CNH2, “Hidrógeno - Centro Nacional de Hidrógeno,” *pagina web centro nacional de hidrógeno UE*, 2019. <https://www.cnh2.es/el-hidrogeno/#tab-id-1> (accessed Jan. 10, 2021).
- [28] M. E. Raffino, “Aire: Concepto, Composición y Propiedades,” *concepto de aire*, 2019. <https://concepto.de/aire/#ixzz6ip56FpXs> (accessed Jan. 10, 2021).
- [29] INFRA GASES, “Nitrogeno,” *Infra del Salvador S.A. de C.V.*, 2020. <https://www.infrasal.com/gases/nitrogeno> (accessed Jan. 10, 2021).
- [30] Raffino Estela, “Agua - Concepto, composición, funciones e importancia,” *Concepto de Agua*, 2020. <https://concepto.de/agua/> (accessed Jan. 10, 2021).
- [31] O. Comisión Europea, OIT, “ICSC 0270 - ETILENGLICOL,” *España, Gobierno de, ministerio de trabajo y economía*, 2017. https://www.ilo.org/dyn/icsc/showcard.display?p_lang=es&p_card_id=0270&p_version=2 (accessed Jan. 10, 2021).
- [32] C. S. Mørch, A. Bjerre, M. P. Gøttrup, S. C. Sorenson, and J. Schramm, “Ammonia/hydrogen mixtures in an SI-engine: Engine performance and analysis of a proposed fuel system,” *Fuel*, vol. 90, no. 2, pp. 854–864, 2011, doi: 10.1016/j.fuel.2010.09.042.
- [33] S. Frigo and R. Gentili, “Analysis of the behaviour of a 4-stroke Si engine fuelled with ammonia and hydrogen,” *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 38, no. 3, pp. 1607–1615, 2013, doi: 10.1016/j.ijhydene.2012.10.114.
- [34] K. Ryu, G. E. Zacharakis-Jutz, and S. C. Kong, “Effects of gaseous ammonia direct injection on performance characteristics of a spark-ignition engine,” *Appl. Energy*, vol. 116, pp. 206–215, 2014, doi: 10.1016/j.apenergy.2013.11.067.
- [35] Revista RD Energía, “Amoniac como vector energético portador de hidrógeno: Proyecto Hidroam – Bienvenido a Revista RD Energía,” 2021. <https://revistardenergia.com/amoniaco-como-vector-energetico-portador-de-hidrogeno-proyecto-hidroam/> (accessed Jan. 13, 2021).
- [36] A. Alaswad, A. Palumbo, M. Dassisti, and A. G. Olabi, *Fuel Cell Technologies, Applications, and State of the Art. A Reference Guide*. Elsevier Ltd., 2016. doi: 10.1016/b978-0-12-803581-8.04009-1.
- [37] F. Barreras and A. Lozano, “Hidrógeno. Pilas de combustibles de tipo PEM,” *Año Int. la energía Sosten. para todos*, p. 19, 2012, [Online]. Available: www.energia2012.es
- [38] D. G. Website, “Power Control Unit | Products & Services | What we do | DENSO

-
- Global Website,” 2021. <https://www.denso.com/global/en/business/products-and-services/mobility/pick-up/pcu/> (accessed Mar. 23, 2022).
- [39] M. A. Boles, Y. A. Çengel, and V. Granados, *Termodinámica*. 2019.
- [40] M. F. Ezzat and I. Dincer, “Comparative assessments of two integrated systems with/without fuel cells utilizing liquefied ammonia as a fuel for vehicular applications,” *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 43, no. 9, pp. 4597–4608, 2018, doi: 10.1016/j.ijhydene.2017.07.203.
- [41] U.S. Secretary of Commerce on behalf of the United States of America. All rights reserved, “Libro del Web de Química del NIST Ammonia,” *Base Datos Ref. Estándar del NIST Número* 69, p. 1, 2017, [Online]. Available: <https://webbook.nist.gov/chemistry/#Search%0Ahttps://webbook.nist.gov/chemistry/>
- [42] T. L. Bergman, A. S. Lavine, F. P. Incropera, and D. Dewitt P., *Introduction to Heat Transfer*, Sixth Edit. John Wiley & Sons, Inc., 2011.
- [43] S. O. Mert, I. Dincer, and Z. Ozcelik, “Exergoeconomic analysis of a vehicular PEM fuel cell system,” *J. Power Sources*, vol. 165, no. 1, pp. 244–252, 2007, doi: 10.1016/j.jpowsour.2006.12.002.
- [44] C. Spiegel, *PEM Fuel Cell Modeling and Simulation Using Matlab*. 2008. doi: 10.1016/B978-0-12-374259-9.X5001-0.
- [45] A. L. Dicks and D. A.J. Rand, *Fuel Cell Systems Explained*, Third Edit. Wiley, 2018.
- [46] A. Rowe and X. Li, “Mathematical modeling of proton exchange membrane fuel cells,” *J. Power Sources*, vol. 102, no. 1–2, pp. 82–96, 2001, doi: 10.1016/S0378-7753(01)00798-4.
- [47] E. Delgado Ferrer, “Estudio y Modelización de una Pila de Combustible SOFC,” 2017.
- [48] J. M. Moran, N. H. Shapiro, D. D. Boettner, and B. M. Bailey, *Fundamentals of Engineering Thermodynamics*. Wiley, 2018. doi: 10.4324/9781315119717.
- [49] C. Rubio-Maya, J. J. Pacheco-Ibarra, H. C. Gutiérrez Sanchez, C. Mendoza-Covarrubias, J. Martínez Patiño, and M. Picón Nuñez, “Aproximaciones de la diferencia media logarítmica de temperatura (DMLT) en problemas de optimización matemática, aplicación al problema CGAM. 1,” *Memorias del XV Congr. Int. Anu. la SOMIM*, pp. 1024–1030, 2009.
- [50] Chevrolet México, “Spark 2021 | Especificaciones de auto compacto | Chevrolet Mex,” 2022. https://www.chevrolet.com.mx/bypass/master_tools/content/chevrolet/lat-am/mexico-quantum-tools/nscwebsite/es/index/vehicles-n02/cars/spark-2021/especificaciones/specs.html (accessed Mar. 02, 2022).
- [51] Ford México, “Figo 2021 | Poderoso Auto Sedán | Ford México,” 2021. <https://www.ford.mx/autos/figo/2021/> (accessed Mar. 02, 2022).
- [52] N. México, “Nissan VERSA | México.”
-

-
- <https://www.nissan.com.mx/vehiculos/todos/versa.html> (accessed Mar. 02, 2022).
- [53] M. Pasion, “Volkswagen Jetta 2022: Características, fotos e información,” 2022. <https://www.motorpasion.com.mx/industria/volkswagen-jetta-2022> (accessed Mar. 02, 2022).
- [54] Mazda, “Mazda3 Sedán 2021 | Versiones y Precios | Mazda México,” 2022. <https://www.mazda.mx/vehiculos/mazda-3-sedan/versiones?version=22M3SISPMHEV&type=all&search=> (accessed Mar. 02, 2022).
- [55] K. México, “Kia Forte 2022 | Sedán compacto - Especificaciones, características y versiones | Kia,” 2022. <https://www.kia.com/us/es/forte/specs> (accessed Mar. 02, 2022).
- [56] K. México, “¿Qué significa SUV? | Kia México,” 2022. <https://www.kia.com/mx/discover-kia/ask/what-does-suv-stand-for.html> (accessed Mar. 02, 2022).
- [57] N. México, “Descubre al Nuevo Nissan X-Trail 2022 | Nissan México,” 2022. https://www.nissan.com.mx/vehiculos/todos/x-trail.html?dcp=sem-aon_sch-xtrl-goo-txt_na-aon-demogr_inmkt_nal_mar22_CPC_na_amplia&gclid=EAIaIQobChMIn8y-85yo9gIVhgqtBh1BNwWbEAAYAiAAEgKyg_D_BwE&gclsrc=aw.ds (accessed Mar. 02, 2022).
- [58] Ford México, “Escape Híbrida 2022 | Potente Camioneta SUV | Ford México,” 2022. <https://www.ford.mx/suv/escape-hibrida/2022/> (accessed Mar. 02, 2022).
- [59] Toyota, “Toyota RAV4 Hybrid 2022 | Detalles,” 2022. <https://www.toyota.com/espanol/rav4hybrid/rav4hybrid-features/> (accessed Mar. 02, 2022).
- [60] F. Software, “EES - Engineering Equation Solver.”
-