



**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS**

**INSTITUTO DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y APLICADAS**

**CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN INGENIERÍA Y CIENCIAS APLICADAS**

**“Optimización de celdas de combustibles de tipo  
PEM aplicando algoritmo de recocido simulado”**

**TESIS PARA OBTENER EL GRADO DE:**

**MAESTRÍA EN INGENIERÍA Y CIENCIAS APLICADAS**

**Ing. EDUMIS VIERA MARTIN**

**DIRECTOR(ES): DR. SERGIO ALONSO SERNA BARQUERA**

**DR. MARTIN GERARDO MARTÍNEZ RANGEL**

**SINODALES: DR. ARTURO MOLINA OCAMPO**

**DR. ROSENBERG JAVIER ROMERO DOMÍNGUEZ**

**DRA. ALINA MARTÍNEZ OROPEZA**

**CUERNAVACA, MORELOS**

**SEPTIEMBRE, 2018**

### RESUMEN

La pérdida de potencial es una variable crítica para tener en cuenta en el desarrollo de las celdas de combustibles de tipo PEM. Los modelos matemáticos juegan un papel importante en el diseño y desempeño de las mismas, ya que facilitan la comprensión de los diferentes parámetros involucrados en su funcionamiento, así como permiten su simulación sistemática. En este trabajo, un modelo matemático desarrollado y validado previamente es utilizado para predecir las pérdidas de potenciales de activación, óhmicas y de concentración en celdas de combustibles de tipo PEM. Además, un algoritmo de optimización combinatoria (recocido simulado) es aplicado para obtener los valores asociados a cada variable del modelo, que al ser evaluados en la función objetivo permitan maximizar el voltaje durante todo el rango de densidad de corriente evaluada con dicho algoritmo. En este caso se evaluaron: temperatura a la cual trabaja la celda, coeficiente de transferencia de carga, resistencia de los materiales, potencial teórico ideal, corriente de pérdida, corriente inicial, corriente límite, y el número de electrones que se disocian en cada molécula de hidrógeno. Como resultado, se logró maximizar el voltaje y la potencia, en comparación con las de la literatura que sirvió de referencia para el desarrollo de esta investigación. El voltaje y la potencia fueron maximizados en un 37 % y 34 % respectivamente. El algoritmo desarrollado permitió obtener una curva de polarización con valores de voltaje más altos a los reflejados en la literatura comparada, garantizando una menor pérdida de potencial, lo que conlleva a una mayor eficiencia de las celdas de combustibles de tipo PEM.

**ABSTRACT**

Potential loss is a critical variable to consider during the development of PEM fuel cells. Mathematical models play an important role in the design and performance of these cells, since they make it easier to understand the different parameters involved in their functioning, as well as allowing for their systematic simulation. In this work, a previously developed and validated model is used to predict activation, ohmic, and concentration losses in PEM fuel cells. Additionally, a combinatorial optimization algorithm, specifically, the Simulated Annealing algorithm, is used to determine the best combination for each variable in the model, in order to minimize overpotentials. Among the parameters evaluated in this case were: operating temperature of the cell, charge transfer coefficient, resistance of materials, ideal theoretical potential, loss current, and others. As a result, it was possible to maximize the voltage and power reported in the literature, by 37% and 34% respectively. The algorithm developed made it possible to adequately adjust the parameters in order to minimize the overpotentials and guarantee a better performance for PEM fuel cells.

### AGRADECIMIENTOS

Quisiera agradecer a todas las personas que me han ayudado y han contribuido de manera satisfactoria en la realización de este trabajo. Agradecer a mis sinodales por la supervisión y orientación.

Me gustaría hacer extensiva mi gratitud a todos los compañeros, amigos y familiares que me han apoyado durante estos dos años de estudio.

También, quiero dar las gracias a todos los profesores por brindarnos su conocimiento y experiencia, contribuyendo a mi formación académica y profesional.

Agradecerle al Centro de investigaciones en Ingeniería y Ciencias Aplicadas (CIICAp) y a la Universidad Autónoma del Estado de Morelos (UAEM) por permitirme realizar la maestría en Ingeniería y Ciencias aplicadas.

Quiero agradecer al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) por el apoyo económico brindado.

A todos ellos, muchas gracias.

DEDICATORIA

*“A mi familia, que me ama incondicionalmente”.*

ÍNDICE

<i>RESUMEN</i> .....	<i>ii</i>
<i>ABSTRACT</i> .....	<i>iii</i>
<i>AGRADECIMIENTOS</i> .....	<i>iv</i>
<i>DEDICATORIA</i> .....	<i>v</i>
<i>LISTA DE TABLAS</i> .....	<i>ix</i>
<i>LISTA DE FIGURAS</i> .....	<i>x</i>
<i>NOMENCLATURA</i> .....	<i>xi</i>
<i>Capítulo I. INTRODUCCIÓN</i> .....	<i>1</i>
1.1 Antecedentes.....	1
1.2 Descripción del problema.....	4
1.3 Objetivos.....	5
1.3.1 Objetivo General.....	5
1.3.2 Obejtivos Específicos.....	5
1.4 Alcance.....	6
<i>Capítulo II. MARCO TEÓRICO</i> .....	<i>7</i>
2.1 Gases de efecto invernadero.....	7
2.2 Efectos del Cambio Climático.....	7
2.3 Energías renovables.....	8
2.4 Hidrógeno como fuente de energía renovable .....	9
2.5 Celdas de combustible .....	10
2.6 Elementos que componen a una pila de combustible tipo PEM.....	12
2.6.1 Electrolito.....	13
2.6.2 Capas catalíticas .....	13
2.6.3 Capas difusoras.....	14
2.6.4 Placas monopolares, bipolares, colectores de corriente y terminales.....	14
2.7 Funcionamiento interno de una pila de combustible tipo PEM.....	15
2.8 Sobrepotenciales en FCs de tipo PEM.....	16
2.8.1 Pérdidas de activación.....	17
2.8.2 Pérdidas óhmicas .....	17

2.8.3 Pérdidas de concentración .....	18
2.9 Modelado matemático de FCs de tipo PEM .....	18
2.10 Heurísticas computacionales.....	19
<i>Capítulo III. METODOLOGÍA, DESARROLLO e IMPLEMENTACIÓN .....</i>	<i>23</i>
3.1 Termodinámica de las FCs de tipo PEM .....	23
3.1.1 Entalpía .....	24
3.1.2 Entropía .....	25
3.1.3 Energía libre de Gibbs.....	25
3.1.4 Trabajo eléctrico .....	26
3.1.5 Potencial reversible .....	27
3.1.6 Eficiencia teórica.....	29
3.2 Modelos matemáticos para determinar los sobrepotenciales en FCs de tipo PEM.....	29
3.2.1 Sobrepotencial de activación .....	29
3.2.2 Sobrepotencial óhmico .....	32
3.2.3 Sobrepotencial de concentración.....	33
3.2.4 Modelo matemático .....	36
3.3 Constantes y variables a utilizar en la evaluación del modelo.....	37
3.3.1 Constantes conocidas .....	37
3.3.2 Parámetros constantes.....	37
3.3.3 Variables de Control .....	38
3.4 Función objetivo que se desea optimizar .....	40
3.5 Características del recocido simulado.....	40
3.6 Pasos del algoritmo .....	41
3.7 Características del algoritmo de recocido simulado implementado .....	41
3.8 Diagrama de flujo del algoritmo de recocido simulado .....	42
<i>Capítulo IV. PRESENTACIÓN DE RESULTADOS.....</i>	<i>43</i>
4.1 Características del algoritmo implementado.....	43
4.2 Resultados de voltaje obtenidos (30 ejecuciones) .....	43
4.3 Análisis de resultados.....	50
4.4 Determinando la potencia.....	52
4.5 Análisis de los parámetros variables del algoritmo.....	54

<i>Capítulo V. CONCLUSIONES Y TRABAJOS FUTUROS</i> .....	59
5.1. CONCLUSIONES.....	59
5.2. TRABAJOS FUTUROS .....	60
<i>REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS</i> .....	61
<i>Apéndices</i> .....	68
<i>Anexos</i> .....	76

### LISTA DE TABLAS

Tabla 2.1 Tipos de celdas de combustible.....	11
Tabla 3.1 Relación entre la temperatura y el potencial teórico ideal.....	28
Tabla 3.2 Constantes conocidas a utilizar en el modelo.....	37
Tabla 3.3 Parámetros que se tomarán con valor constante en el modelo...37	
Tabla 3.4 Relación entre la temperatura y el potencial reversible.....	38
Tabla 3.5 Intervalos de los parámetros variables.....	39
Tabla 4.1 Resultados obtenidos para 30 ejecuciones del algoritmo implementado (parámetros).....	44
Tabla 4.2 Distribución realizada por el algoritmo implementado (30 ejecuciones).....	46
Tabla 4.3 Mejor y peor solución obtenidas para 30 ejecuciones del algoritmo implementado (parámetros) .....	48
Tabla 4.4 Presentación de las decisiones tomadas por el algoritmo, para su mejor y peor solución.....	48
Tabla 4.5 Comparación entre los parámetros de la curva modelada a partir de datos experimentales de la literatura y los parámetros del resultado obtenido con el recocido simulado implementado.....	51
Tabla 4.6 Presentación de las decisiones tomadas por el algoritmo implementado.....	51

### LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 Concentración de gases del efecto invernadero.....	7
Figura 2.2 Energías renovables (Figura modificada 2018). ....	9
Figura 2.3 Componentes de una celda de combustible de tipo PEM, figura modificada (2018). ....	12
Figura 2.4 Diagrama de funcionamiento interno de una celda de combustible de tipo PEM, figura modificada (2018). ....	16
Figura 2.5 Curva típica de polarización de celda de combustible tipo PEM. Figura modificada (2018) [25] .....	17
Figura 3.1 Diagrama de flujo del algoritmo implementado .....	42
Figura 4.1 Modelado de la mejor y peor solución obtenida con el algoritmo implementado .....	49
Figura 4.2 Comparación entre la curva modelada a partir del resultado obtenido con el recocido simulado implementado (curva azul) y la curva modelada a partir de datos experimentales de la literatura (curva roja). ....	52
Figura 4.3 Comparación entre la potencia mejorada con recocido simulado	54
Figura 4.4 Valores obtenidos con el algoritmo implementado, para el coeficiente de transferencia (alfa). Punto azul: valor de alfa que se corresponde con el mejor voltaje, y punto rojo: valor de alfa que se corresponde con el peor voltaje obtenido en las 30 ejecuciones del algoritmo. ....	56
Figura 4.5 Valores de temperatura obtenidos con el algoritmo implementado. Punto azul: valor de temperatura que se corresponde con el mejor voltaje, y punto rojo: valor de temperatura que se corresponde con el peor voltaje obtenido en las 30 ejecuciones del algoritmo. ....	57
Figura 4.6 Valores de voltaje obtenidos con el algoritmo implementado. Punto azul: mejor voltaje obtenido y punto rojo: peor voltaje obtenido en las 30 ejecuciones del algoritmo.....	58

## NOMENCLATURA

### NOMENCLATURA

<b><i>A</i></b>	Área activa del electrodo ( $cm^2$ )
<b><i>D</i></b>	Coefficiente de difusión de las especies reactantes ( $cm^2/s$ )
<b><math>\alpha</math></b>	Coefficiente de transferencia (adimensional)
<b><math>C_B</math></b>	Concentración de los reactantes ( $mol/cm^3$ )
<b><math>C_s</math></b>	Concentración de reactantes en superficie del catalizador ( $mol/cm^3$ )
<b><i>F</i></b>	Constante de Faraday ( $C/mol$ )
<b><i>R</i></b>	Constante universal de los gases ideales ( $Jmol^{-1}K^{-1}$ )
<b><math>i_{loss}</math></b>	Corriente de pérdida ( $A/cm^2$ )
<b><math>i_0</math></b>	Corriente inicial ( $A/cm^2$ )
<b><math>i_L</math></b>	Corriente límite ( $A/cm^2$ )
<b><i>i</i></b>	Densidad de corriente ( $A/cm^2$ )
<b><math>\delta</math></b>	Distancia de difusión ( $cm$ )
<b><math>\eta</math></b>	Eficiencia (%)
<b><math>\Delta G</math></b>	Energía libre de Gibbs ( $kJ/mol$ )
<b><i>H</i></b>	Entalpía ( $kJ/mol$ )
<b><i>S</i></b>	Entropía ( $\frac{kJ}{mol K}$ )
<b><i>N</i></b>	Flujo de reactantes ( $mol/s$ )

<b><i>ln</i></b>	Logaritmo natural (adimensional)
<b><i>n</i></b>	Número de electrones (adimensional)
<b><i>E<sub>r</sub></i></b>	Potencial reversible ( <i>V</i> )
<b><i>R<sub>i<sub>c</sub></sub></i></b>	Resistencia de contacto ( $\Omega cm^2$ )
<b><i>R<sub>i<sub>e</sub></sub></i></b>	Resistencia electrónica ( $\Omega cm^2$ )
<b><i>R<sub>i<sub>i</sub></sub></i></b>	Resistencia iónica ( $\Omega cm^2$ )
<b><i>R<sub>i</sub></i></b>	Resistencia total ( $\Omega cm^2$ )
<b><math>\Delta V_{act}</math></b>	Sobrepotencial de activación ( <i>V</i> )
<b><math>\Delta V_{conc}</math></b>	Sobrepotencial de concentración ( <i>V</i> )
<b><math>\Delta V_{ohm}</math></b>	Sobrepotencial óhmico ( <i>V</i> )
<b><i>T</i></b>	Temperatura ( <i>k</i> )
<b><i>W<sub>el</sub></i></b>	Trabajo eléctrico ( <i>kJ/mol</i> )
<b><math>\Delta H</math></b>	Variación de entalpía ( <i>kJ/mol</i> )
<b><i>V<sub>celda</sub></i></b>	Voltaje de la celda ( <i>V</i> )

#### SUBÍNDICES

<b>FCs</b>	Celdas de combustible
<b>PEM</b>	Membrana de intercambio de protones
<b>Temp.</b>	Temperatura
<b>MEA</b>	Membrana de intercambio protónico

### 1.1. ANTECEDENTES

La emisión descontrolada de Gases de Efecto Invernadero (GEI) ha dado lugar al cambio climático. Derivándose en gran medida de las actividades realizadas por el hombre. El uso intensivo de los combustibles fósiles (carbón, petróleo, gasolina, gas natural y los combustibles derivados del petróleo) para el transporte, procesos industriales, generación de energía, junto al cambio de uso de suelo, silvicultura, agricultura y los desechos (basura) son las principales causas de este problema [1].

El cambio climático ocurre, entre otras cosas, por el calentamiento de La Tierra, dando lugar a desastres naturales como tornados, inundaciones, huracanes y sequías. La sobrevivencia de algunas especies de animales se puede ver afectada debido a estos cambios y a la aparición de plagas de insectos. Por lo cual se hace necesario el uso de alternativas que permitan generar energía eléctrica sin emisión de GEI, tales como, las energías renovables [1].

Las energías renovables se pueden regenerar a partir de medios naturales, razón por la cual se plantea que son virtualmente inagotables. Son energías limpias (emisiones mínimas de gases contaminantes) que contribuyen al cuidado del medio ambiente. Dentro del espectro de energías renovables se encuentran: la energía solar, eólica, energía geotérmica, energía hidroeléctrica, biomasa, hidrógeno, energía de los océanos, entre otras [2].

Una de las alternativas renovables más prometedoras en la actualidad es el uso del hidrógeno, pues éste es un elemento abundante en la naturaleza y la generación de electricidad a partir de él no contamina el medio ambiente. Otra de sus ventajas es que no es tóxico para los seres humanos, y no corre peligro por el momento de acabarse, debido a que el hidrógeno se puede obtener a partir de la electrólisis del agua. Con el propósito de generar corriente eléctrica a partir del hidrógeno, surgen las celdas de combustible

(FCs). Estos dispositivos transforman la energía química en electricidad a partir de una reacción electroquímica [3].

Existen varios tipos de FCs. Entre todas ellas, las pilas de combustible con membrana de intercambio de protones (PEM), son actualmente la opción más prometedora para las aplicaciones móviles, esto se debe a que trabajan con eficiencia generalmente por encima del 75 %, baja temperatura de operación y rapidez de respuesta [4].

La eficiencia en las FCs de tipo PEM, a pesar de ser alta, se ve afectada por las pérdidas de voltaje, comúnmente conocidas con el nombre de sobrepotenciales o polarización.

Cada parámetro que interviene en las FCs de tipo PEM puede ser modelado matemáticamente. Muchos investigadores han venido desarrollando modelos matemáticos con el objetivo de evaluar el desempeño de la FCs y trabajar en su mejora [5]. A su vez, se han logrado disminuir los sobrepotenciales empleando técnicas heurísticas computacionales, las cuales resuelven problemas de optimización combinatoria teniendo en cuenta el modelo matemático que mide el potencial en las celdas de combustibles de tipo PEM.

Algunos algoritmos de optimización, tales como: Algoritmo genético (RNA), Algoritmo optimizador buscador (SOA), Algoritmo enjambre de partículas (PSO), y Algoritmo optimizador del apareamiento de aves (BMO) han sido aplicados en la identificación de parámetros de los modelos de FCs de tipo PEM [6]. Estos algoritmos han permitido minimizar los sobrepotenciales en las celdas de combustibles de tipo PEM y modelar sus curvas de polarización, mediante la optimización de modelos matemáticos que evalúan los parámetros de las celdas. Sin embargo, el algoritmo heurístico de recocido simulado no ha sido aplicado para este tipo de sistemas.

Por consecuencia, en este trabajo se pretende investigar si con el desarrollo de un algoritmo heurístico de recocido simulado se podría obtener una maximización del modelo matemático, de manera tal que se logren

minimizar los sobrepotenciales en FCs de tipo PEM. Se busca obtener un mejor resultado que los algoritmos implementados previamente, ya que en los casos anteriores no se logró alcanzar un voltaje superior a 0.6 volts para una densidad de corriente igual o superior a  $1.2 A/cm^2$ .

### 1.2. DESCRIPCIÓN DEL PROBLEMA

Las celdas de combustible de tipo PEM aún presentan problemas en su eficiencia, ésto se debe a las pérdidas irreversibles que ocurren en estos sistemas. Por lo cual, se hace necesario encontrar las condiciones de operación que permitan minimizar sus sobrepotenciales, mediante la implementación de un algoritmo heurísticos de recocido simulado, a partir de un modelo matemático.

### JUSTIFICACIÓN

No existe en la literatura evidencia del uso de recocido simulado para disminuir los sobrepotenciales en celdas de combustible de tipo PEM, sin embargo, se han aplicado otros métodos heurísticos con este propósito, pero no se ha logrado obtener valores de voltaje por encima de 0.6 volts para una densidad de corriente igual o superior a  $1.2 A/cm^2$ . Razón por la cual se pretende implementar un algoritmo de recocido simulado que a través de un modelo matemático que involucra parámetros que intervienen en el desempeño de las celdas de combustible de tipo PEM, tales como: (temperatura a la cual trabaja la celda, coeficiente de transferencia de carga, resistencia de los materiales, potencial teórico ideal, corriente de pérdida, corriente inicial, corriente límite, y el número de electrones que se disocian en cada molécula de hidrógeno), determine cuáles son las condiciones de operación que permitan alcanzar valores de potencial superiores a 0.6 volts para densidades de corriente por encima de  $1.2 A/cm^2$ . Mejorando, de esta manera, las curvas de polarización modeladas con otros algoritmos heurísticos. Se implementará un algoritmo de recocido simulado debido a que éste presenta una amplia versatilidad y eficiencia, dando solución a problemas específicos que involucran parámetros termodinámicos.

### **HIPÓTESIS**

Una función objetivo que involucra parámetros que intervienen en el desempeño de las celdas de combustible de tipo PEM, tales como: (temperatura a la cual trabaja la celda, coeficiente de transferencia de carga, resistencia de los materiales, potencial teórico ideal, corriente de pérdida, corriente inicial, corriente límite, y el número de electrones que se disocian en cada molécula de hidrógeno), será evaluada con un algoritmo de recocido simulado, el cual permitirá obtener las condiciones de operación que minimizan los sobrepotenciales en celdas de combustibles tipo PEM.

### **1.3. OBJETIVOS**

#### **1.3.1. Objetivo General**

Implementar un algoritmo de recocido simulado que evalúe el comportamiento de los parámetros involucrados en el modelo matemático que describe el funcionamiento de las celdas de combustibles de tipo PEM, para determinar las condiciones de operación que permitan minimizar sus sobrepotenciales.

#### **1.3.2. Objetivos Específicos**

1. Seleccionar el modelo matemático que describa los sobrepotenciales en las celdas de tipo PEM.
2. Desarrollar la programación del algoritmo heurístico de recocido simulado, evaluando el modelo matemático seleccionado, a fin de buscar la convergencia del mismo.

## CAPÍTULO I. INTRODUCCIÓN

3. Comparar los resultados alcanzados con recocido simulado con datos experimentales obtenidos de la literatura.
4. Analizar y determinar los valores de los parámetros evaluados para los cuales se podrían minimizar los sobrepotenciales.

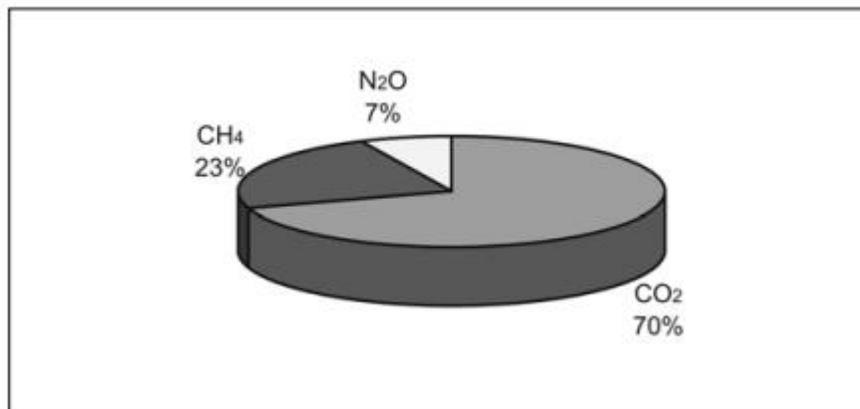
### **1.4. ALCANCE**

Se desarrolla un algoritmo de recocido simulado que propone una combinación de parámetros del modelo matemático, capaz de mejorar la curva de polarización experimental que se obtuvo a partir del mismo modelo matemático en la literatura con la cual se establece la comparación.

### Capítulo 2. MARCO TEÓRICO

#### 2.1 Gases de efecto invernadero

La composición de la atmósfera ha presentado cambios en los últimos años, esto se debe a la cantidad de gases que han sido emitidos hacia el exterior. Lo cual se debe a que se han incrementado las concentraciones de GEI, los mismos capturan el calor emitido por la tierra y lo mantienen dentro de la atmósfera, actuando como un invernadero [7].



*Figura 2.1 Concentración de gases del efecto invernadero [41].*

#### 2.2 Efectos del Cambio Climático

Experimentos realizados a lo largo de 150 años muestran el incremento de las temperaturas en la superficie de la tierra. En el último siglo, el calentamiento ha ocurrido en dos etapas: de 1910 a 1940 (0.35°C) y de 1970 a la actualidad (0.55°C) [6]. El incremento de la temperatura ha sido mayor en los últimos 25 años, donde han ocurrido 11 de los 12 años más calientes del siglo.

El aire que corre en el ártico se ha vuelto más caliente. La capa de hielo que flota sobre la superficie del mar se ha reducido en un 8 %, y ha disminuido su grosor entre 10% y 15 % [8].

En todo el planeta han disminuido las capas de hielo, contribuyendo al aumento del nivel del mar y al contenido de calor de los océanos.

Además de lo anteriormente expuesto, el consumo de combustibles fósiles se ha incrementado en los últimos años debido a la industrialización de las ciudades desarrolladas y al incremento de la población mundial. Situación que ha encaminado la disminución de las reservas de combustibles fósiles y el incremento del nivel de dióxido de carbono, resultando en un incremento al riesgo de contraer enfermedades y al cambio climático [9].

Derivado de la contaminación del medio ambiente, los problemas sociales y económicos que implica el deterioro de los suelos, aire y agua, es necesaria la búsqueda de alternativas de generación de energía sin emisión de dióxido de carbono u otros gases que afecten el bienestar del planeta [10].

### **2.3 Energías renovables**

Las energías renovables se producen a través de sistemas que no generan residuos contaminantes, las mismas se encuentran en desarrollo, debido a la preocupación por la extinción de energías agotables y al deseo aunado de muchos por preservar el medio ambiente.

Las energías renovables más comúnmente utilizadas son la energía geotérmica, la eólica, la hidroeléctrica y la energía solar [11].



*Figura 2.2 Energías renovables (Figura modificada 2018) [42].*

### **2.4 Hidrógeno como fuente de energía renovable**

El 90 % de la materia está compuesta por hidrógeno. Es el elemento más abundante del planeta. Se encuentra combinado con otros elementos en su composición, como es el caso del agua ( $H_2O$ ) y otros elementos orgánicos [12]. En su estado natural es incoloro, inodoro, e insípido. No presenta toxicidad y se puede respirar sin causar daños a la salud. Es un elemento liviano, y sube velozmente a la atmósfera. Son muchas las ventajas de su uso, pues la generación de energía eléctrica a partir de él no contamina al medio ambiente, y no corre peligro por el momento de acabarse. Los sistemas que generan energía eléctrica a partir del hidrógeno no emiten gases contaminantes, pues liberan vapor de agua. Estos dispositivos tienen el nombre de Celdas de combustible [3].

Otra ventaja del uso del hidrógeno en la generación de electricidad es que su energía química se puede convertir en energía eléctrica de manera directa, sin tener que pasar por el accionar térmico del típico ciclo de potencia. La eliminación del ciclo termodinámico intermedio permite obtener una mayor eficiencia con el uso del hidrógeno como combustible, que con el ciclo de Carnot [3].

En el sector del transporte, el hidrógeno es un apuesta promisorio, que garantiza una transportación segura y libre de gases contaminantes. Son muchas las ventajas del uso de este elemento como combustible en el desarrollo del transporte, entre las que se encuentra: la eficiencia en la producción de electricidad a partir de él, su abundancia, la fácil transportación, y la gran variedad de métodos de producción de hidrógeno a través de procesos con bajas emisiones contaminantes. [3]

### **2.5 Celdas de combustible**

Las celdas de combustible han emergido como una solución prometedora a la generación de energía y a los problemas medioambientales. En la actualidad, los gobiernos de países desarrollados, tales como EE.UU, Japón, Canadá y la Unión Europea, han desarrollado políticas que apoyan la utilización de estas tecnologías, propiciándose un aumento en la cantidad de patentes solicitadas sobre el desarrollo de las mismas. Quedando demostrado el interés y participación de la comunidad ingenieril y científica en su desarrollo [4].

Las FCs son dispositivos que presentan alta eficiencia, modularidad y generan electricidad con mínima contaminación ambiental.

Una celda de combustible es un dispositivo electroquímico con un principio de operación parecido al de una batería común. Produce energía y calor a partir de químicos, generalmente, hidrógeno y oxígeno. En este caso el hidrógeno es el elemento combustible, y el oxígeno es el oxidante. Ofrecen una alternativa innovadora con potencial para lograr altas eficiencias con el uso de combustibles renovables y con un impacto ambiental mínimo [13].

Existen varios tipos de FCs, pero se clasifican en celdas de baja temperatura y celdas de alta temperatura. Las de baja temperatura son menos eficientes

pero presentan menos complejidad en sus sistemas, mayor rapidez de respuesta y la posibilidad de ser más compactas.

**Tabla 2.1** Tipos de celdas de combustible. Tabla modificada (2018) [13]

	Electrolito	Temperatura	Combustible	Ventajas	Aplicaciones
PEMFC	Membrana de polímero sólido	60-80 °C	Hidrógeno	Baja temperatura. Baja corrosión y mantenimiento	Transporte y equipos portátiles
AFC	Solución alcalina	100-120 °C	Hidrógeno	Mayor eficiencia	Espaciales
PAFC	Ácido fosfórico	200-250 °C	Hidrógeno Metano	Acepta un 1% de CO	Generación eléctrica
MCFC	Carbonatos fundidos	600-700 °C	Metano	Reformado interno	Generación eléctrica
SOFC	Material cerámico	800-1200 °C	Metano	Reformado interno	Generación eléctrica
DMFC	Membrana de polímero	50-120 °C	Metanol	No necesita reformado del combustible	Equipos portátiles

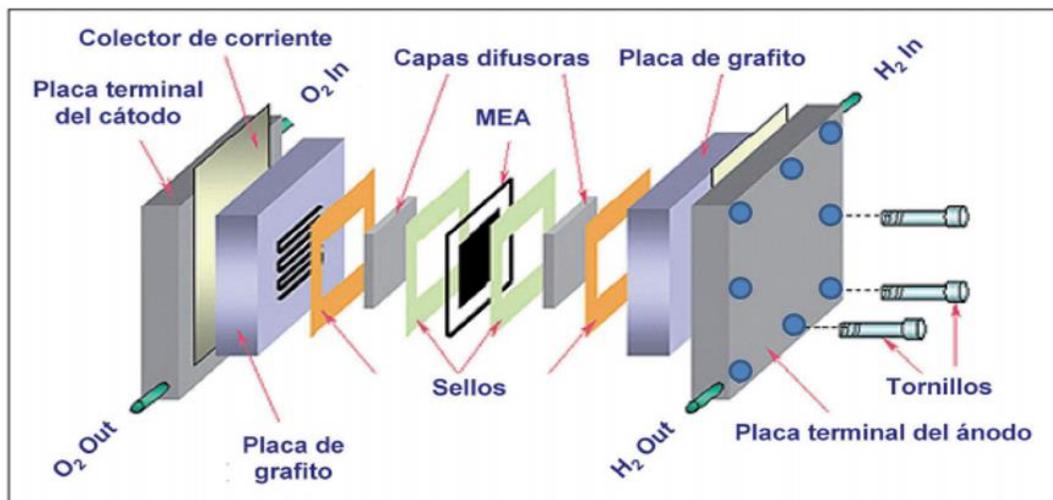
Las FCs varían de acuerdo al tipo de electrolito que utilizan. Al material del electrolito se asocian diferentes características, tales como temperatura de operación, gases reactantes, vida útil y área de aplicación. Las pilas de combustible que trabajan con bajas temperaturas utilizan catalizadores desarrollados con metales más nobles, como el platino, el cual favorece las reacciones que ocurren en los electrodos [14].

Entre todas ellas, las FCs con membrana de intercambio de protones (PEM), también conocidas como pilas poliméricas, son la opción más promisoría para aplicaciones móviles debido a su rapidez de respuesta, alta eficiencia y baja temperatura de operación [7]. Las FCs de tipo PEM en la actualidad se han desarrollado con gran éxito en dispositivos portátiles, conjuntos residenciales, y en la fabricación de automóviles eléctricos, tales como: el MIRAI desarrollado por Toyota y el Tucson ix35 desarrollado por Hyundai, entre otros [15].

### 2.6 Elementos que componen a una pila de combustible tipo PEM

En las FCs de tipo PEM, el ánodo y el cátodo se encuentran separados por el electrolito, el cual es una membrana polimérica. Esta membrana es conductora de protones, y permite el paso de iones hidronio a través de ella, a la vez que es impermeable a las otras sustancias.

Una celda de combustible de tipo PEM posee tres zonas: el cátodo (electrodo con carga negativa), el ánodo (electrodo con carga positiva), y en el centro, el electrolito, el cual separa los gases a ambos lados. En este caso, el hidrógeno funciona como combustible, la celda es alimentada de hidrógeno a través de los canales en la placa bipolar del extremo anódico, y es conducido hasta el catalizador por medio de una capa difusora carbonosa. Es en la capa catalítica donde se oxida el hidrógeno [16]. EL material de la capa difusora debe ser muy poroso, pues esta característica facilita la difusión del hidrógeno en su trayecto hacia el catalizador.



**Figura 2.3** Componentes de una celda de combustible de tipo PEM, figura modificada (2018) [43].

Como muestra la figura 2.3, los elementos de las FCs de tipo PEM deben ser diseñados y optimizados de manera que se beneficie la ocurrencia de las reacciones físicas y químicas en el sistema. En este apartado serán brevemente descritos los elementos que conforman una celda de combustible de tipo PEM: electrolito, electrodos, capas difusoras y placas bipolares.

### **2.6.1 Electrolito**

El electrolito es una membrana sólida polimérica. Estas membranas son buenas conductoras de protones, pero no conducen electrones. Estas condiciones no se cumplen totalmente, u ocurren solamente bajo condiciones específicas de operación [17].

### **2.6.2 Capas catalíticas**

El electrodo se encuentra entre la membrana y las capas difusoras, tanto en el lado del ánodo como en el lado del cátodo, y es una capa catalítica de poco grosor. Su material es carbonoso y altamente poroso, sobre él se concentran las moléculas de catalizador distribuidas de manera homogénea. En estos centros activos ocurren las reacciones electroquímicas en ánodo y cátodo. De manera general, a mayor cantidad de puntos de contacto, mayor cantidad de reacciones se podrán producir, posibilitando que el potencial efectivo sea más alto [18].

Dentro de las características del soporte carbonoso, se encuentran: la alta conductividad eléctrica, elevada porosidad y alta estabilidad mecánica y química. El catalizador debe poseer un alto número de centros activos (las partículas deben ser pequeñas y bien dispersas), así como una elevada

actividad de los puntos activos para que los sobrepotenciales de reacción anódica y catódica sean minimizados [19].

### **2.6.3 Capas difusoras**

El material de las capas difusoras debe ser poroso y debe conducir la electricidad, ya que estas capas se encargan de distribuir los gases de manera uniforme sobre las capas catalíticas. Las capas difusoras son el soporte mecánico de los electrodos, y favorecen la extracción de agua líquida en la capa catalítica del cátodo, sirviendo de conexión eléctrica entre placas y capas catalíticas.

Los materiales con los que se desarrollan las capas difusoras se caracterizan por ser porosos, permeables y buenos conductores eléctricos y térmicos. Generalmente se utilizan telas carbonosas que brindan soporte mecánico a la capa catalítica y a la membrana, evitando la acumulación de agua en su interior y el bloqueo a la circulación de los gases.

Estos tres elementos (membrana polimérica, capas catalíticas y capas difusoras) constituyen una unidad nombrada “sistema membrana-electrodo” (MEA, por sus siglas en inglés). Las capas catalíticas se pueden ensamblar a través de diferentes métodos tanto sobre las caras de la membrana o encima de las capas difusoras. En ambos casos, se emplea presión a altas y bajas temperaturas [20].

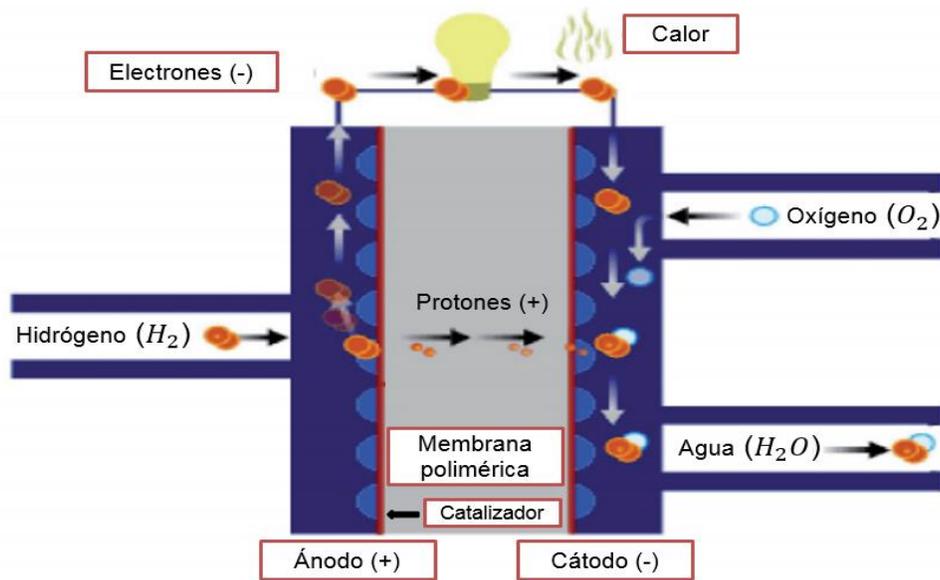
### **2.6.4 Placas monopolares, bipolares, colectores de corriente y terminales**

Una celda posee dos placas que encierran a los demás componentes. Las mismas, contienen las conexiones de entrada y salida de los gases, los canales que permiten distribuirlos en la superficie del electrodo, además del sistema de cerradura [13].

### **2.7 Funcionamiento interno de una pila de combustible de tipo PEM**

Los protones disociados traspasan la membrana de intercambio de protones, sin embargo, los electrones no pueden atravesarla, ya que no es conductora electrónica, por esta razón, los electrones intentan salir por un circuito alternativo: conformado por las capas difusoras (que son de material carbonoso y pueden conducir la electricidad), y las placas, dando lugar a una corriente eléctrica [21]. En el otro extremo de la celda, el oxígeno es introducido en los canales del cátodo, traspasa la capa difusora, combinándose con los protones que atravesaron la membrana y con los electrones del circuito exterior, liberando agua y calor a través del cátodo [20].

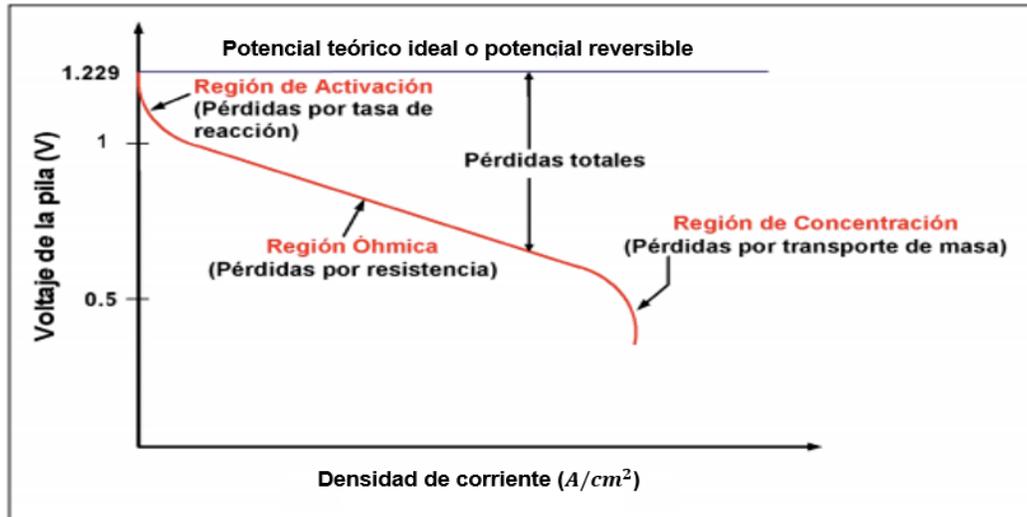
La distribución de los gases reactantes en el electrolito juega un papel importante en la densidad de corriente, la temperatura y la concentración de agua en los electrodos. Problemas como la inundación o deshidratación de la membrana pueden reducir su tiempo de vida [22]. Es en el cátodo donde ocurre la formación de agua, por tal motivo, es crucial evitar la deshidratación del ánodo y la inundación del cátodo.



**Figura 2.4** Diagrama de funcionamiento interno de una celda de combustible de tipo PEM, figura modificada (2018) [44].

## 2.8 Sobrepotenciales en FCs de tipo PEM

El funcionamiento descrito anteriormente presenta dificultades técnicas en la realidad [13]. El potencial real de una celda de combustible disminuye en comparación con su valor teórico ideal, esto se debe a las pérdidas irreversibles que se presentan en estos dispositivos [22]. Estas pérdidas, se denominan: pérdidas de voltaje, polarización o sobrepotencial, y representan la diferencia entre el potencial real del electrodo y su potencial de equilibrio. La típica curva de polarización se muestra en la figura 2.5.



**Figura 2.5** Curva típica de polarización de celda de combustible tipo PEM. Figura modificada (2018) [22].

Los sobrepotenciales en las celdas de tipo PEM ocurren debido a tres tipos de pérdidas, éstas son: Pérdidas de activación, óhmicas y de concentración.

### 2.8.1 Pérdidas de activación

Las pérdidas de activación provocan una caída de potencial que se debe a la lenta reacción en los electrodos, esencialmente en el cátodo. Emana de la energía en la activación de las reacciones electroquímicas que tienen lugar en los electrodos. Estas pérdidas dependen del material y la estructura del electrocatalizador [23].

### 2.8.2 Pérdidas óhmicas

Las pérdidas óhmicas incluye las resistencias: iónica, electrónica, y de contacto. Son producto de la resistencia iónica del electrolito y electrodos, de la resistencia electrónica en los colectores y electrodos y de la resistencia

de contacto. A medida que aumenta la densidad de corriente, la geometría de la celda y la temperatura, aumentan las pérdidas óhmicas. [14].

### **2.8.3 Pérdidas de concentración**

Las pérdidas de concentración son producto de las pérdidas de transporte de masa que se presentan cuando en los sitios de reacción no hay gas suficiente. Estas pérdidas se deben esencialmente a la inundación que ocurre en el cátodo por la creación de agua, y solamente tiene un valor considerable cuando la densidad de corriente es elevada. El efecto de todas estas pérdidas se puede apreciar en la curva de polarización de la pila [24].

### **2.9 Modelado matemático de FCs de tipo PEM**

El modelado de las FCs es útil para sus desarrolladores porque contribuye a la implementación de diseños más económicos y eficientes. Permite calcular los parámetros que intervienen en su desempeño, ayudando así a la implementación de mejoras en el funcionamiento de las mismas [25].

El modelado matemático de las pilas poliméricas se basa en complejos modelos fundamentados en el conocimiento del fenómeno físico-mecánico del sistema, éstos requieren comprender detalladamente los parámetros del proceso [25]. El mismo debe ser robusto y capaz de proveer rápidas soluciones a cualquier problema. Un buen modelo debe predecir el funcionamiento de la celda bajo un intervalo de condiciones operacionales.

Se han definido hasta la actualidad diversos modelos matemáticos, que permiten calcular cada uno de los parámetros de las celdas de combustibles tipo PEM, determinar las reacciones que tienen lugar dentro de la celda y evaluar su rendimiento.

Para la identificación y evaluación de parámetros de los modelos matemáticos de FCs de tipo PEM se han empleado exitosamente algoritmos heurísticos.

Las heurísticas han permitido el acercamiento a las soluciones óptimas conocidas hasta la fecha, facilitando la evaluación de los modelos matemáticos definidos y ayudando a optimizar el funcionamiento de estos dispositivos electroquímicos [26].

### **2.10 Heurísticas computacionales**

Un algoritmo computacional es heurístico cuando no se puede determinar su solución de manera inmediata, sino desarrollando ensayos y pruebas [27].

Muchos problemas que requieren ser optimizados no se pueden solucionar a través de técnicas exactas, ya sea, por su elevado número de combinaciones o por la dificultad de establecer un modelo matemático que represente debidamente una situación real. Para encontrar solución a estos problemas complejos se han venido generando métodos heurísticos, capaces de encontrar soluciones de aceptable calidad, en diversos casos aproximada a la solución óptima [28].

Algunos investigadores han venido desarrollando algoritmos heurísticos con el objetivo de minimizar los sobrepotenciales en FCs de tipo PEM. Ejemplo de estos algoritmos son:

- Algoritmo genético (RNA)
- Algoritmo optimizador buscador (SOA )
- Algoritmo enjambre de partículas (PSO)
- Algoritmo optimizador del apareamiento de aves (BMO)

En este trabajo se propone la implementación del algoritmo de recocido simulado para disminuir los sobrepotenciales en las FCs de tipo PEM, debido a que no se encontró en la literatura ninguna referencia a trabajos en

los que se haya desarrollado recocido simulado para resolver este tipo de problema. Otra razón por la que se propone optimizar FCs de tipo PEM con recocido simulado es debido a que se han desarrollado simulaciones a problemas específicos, con este algoritmo, mostrando versatilidad y eficiencia amplia [29].

El algoritmo de recocido simulado se inspira en el proceso de enfriamiento de metales y cerámicas. Esta técnica envuelve parámetros como calor y el enfriamiento gradual del material, lo cual hace cambiar sus propiedades físicas. El recocido simulado es una adaptación al algoritmo de Metropolis-Hastings [30].

En este trabajo se pretende implementar un algoritmo de recocido simulado que establezca cuáles son las condiciones de operación que permiten minimizar los sobrepotenciales en FCs de tipo PEM. Se desea utilizar recocido simulado porque este algoritmo utiliza la optimización combinatoria para obtener una aproximación a la solución óptima y se ha empleado satisfactoriamente para resolver otros problemas termodinámicos. Siendo una de las heurísticas más utilizadas en diversos campos de la ciencia e ingeniería en la solución de problemas reales de optimización combinatoria. En el recocido simulado, el código se puede adaptar a diferentes problemas y tiene la habilidad de acercarse al óptimo global.

Entre sus características principales se debe resaltar que es un algoritmo que implementa el procedimiento de búsqueda local para mejorar progresivamente las soluciones. Para ello examina la vecindad y toma el primer movimiento que produce una mejora en la solución actual.

En cuanto a la cantidad de soluciones que utiliza el recocido simulado para realizar la búsqueda se puede decir que pertenece al grupo de las metaheurísticas trayectoriales, es decir que el algoritmo parte de una única solución inicial y es capaz de generar un camino o trayectoria en el espacio de búsqueda. La función objetivo es estática ya que no presenta cambios

durante el proceso de la búsqueda y el algoritmo no presenta inconvenientes a la hora de maximizar una función. La estructura de vecindad es estática para limitar el campo de soluciones vecinas, esto garantiza la potencia del algoritmo y permite buscar en vecindades de diferentes tamaños [31].

Cuando se desea maximizar un modelo matemático, el término: “peor solución” se utiliza para describir una evaluación de los parámetros del modelo matemático en la que se obtuvo como resultado: un valor numérico más pequeño que el valor numérico asociado al resultado inmediato anterior obtenido en la evaluación de dicho modelo.

Recocido simulado utiliza una función de probabilidad para disminuir los movimientos hacia soluciones peores, consiguiendo un acercamiento al óptimo global a medida que va avanzando la búsqueda. Su funcionamiento consiste en partir de una solución inicial y seleccionar una solución vecina, si ésta es mejor que la anterior, se mantiene como nueva solución. Si no lo es, se acepta igual, pero con una probabilidad que decrece a la vez que vaya avanzando el algoritmo. Se emplean las probabilidades y la aceptación de soluciones de menor calidad con el objetivo de no quedarse estancado en óptimos locales.

Para el diseño de este tipo de heurísticas se deben tener en cuenta decisiones genéricas y decisiones específicas del problema. Las decisiones genéricas están relacionadas los factores que intervienen en el problema, incluyendo las condiciones de frontera. Mientras que las decisiones específicas se refieren a la definición del espacio de soluciones y la estructura de los entornos.

EL recocido simulado utiliza la cadena de Markov. La cual permite analizar la conducta de diversos procesos que evolucionan de manera no determinística a través del tiempo con respecto a un conjunto de estados.

La cadena de Markov, simboliza un sistema que varía su estado con el tiempo. Dichos cambios no están anticipados, pero sí es conocida la

## CAPÍTULO II. MARCO TEÓRICO

probabilidad del estado siguiente, mismo que depende de los estados previos, probabilidad que es constante en el tiempo. En algunas ocasiones, en una transición el nuevo estado puede ser igual al estado previo, y se puede influir en las probabilidades actuando debidamente sobre el sistema [31].

### 3.1 Termodinámica de las FCs de tipo PEM

El corazón de una celda de combustible tipo PEM es una membrana de polímero que cuenta con algunas características únicas como la impermeabilidad a los gases y la transportación de protones [32]. La membrana que actúa como electrolito se aprieta entre los dos electrodos porosos conductores de electricidad. Estos electrodos son generalmente hechos de tela de carbón o fibra de carbono. En la interfaz entre el electrodo poroso y la membrana de polímero existe una capa con un catalizador, que comúnmente es platino soportado en carbono [7].

El hidrógeno se alimenta a un lado de la membrana y se divide en sus componentes primarios. Cada átomo de hidrógeno está compuesto por un electrón y un protón.

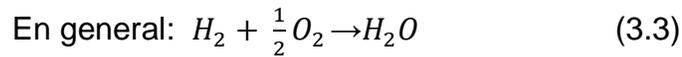
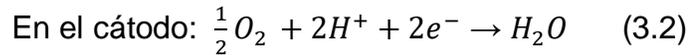
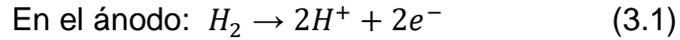
Los protones atraviesan la membrana, y los electrones viajan a través de los electrodos que conducen la electricidad por medio de los colectores de corriente y el circuito exterior, lugar donde desarrollan un trabajo útil. Volviendo seguidamente a la otra cara de la membrana. En los sitios del catalizador entre la membrana y el otro electrodo se encuentra con los iones hidronio que atravesaron la membrana, y el oxígeno del que se alimenta ese lado.

De la reacción electroquímica se genera agua y esta es expulsada de la celda con un flujo de oxígeno [33]. Por lo que la resultante neta de las reacciones simultánea es una corriente de electrones que circula a través de un circuito externo [7].

El lado del hidrógeno es negativo, el cual se llama ánodo, mientras que el lado del oxígeno de la celda de combustibles es positivo y se llama cátodo.

### CAPÍTULO III. METODOLOGÍA, DESARROLLO e IMPLEMENTACIÓN

Las reacciones electroquímicas en la celda de combustible ocurren simultáneamente en ambos sitios del ensamble membrana electrodos. Por lo tanto, las reacciones básicas de una celda de combustible son [24]:



Todo sistema termodinámico cuenta con la presencia de 3 fenómenos conocidos, los cuales son: entalpía, entropía y energía libre de Gibbs.

#### 3.1.1 Entalpía

La entalpía es la cantidad de energía contenida en una sustancia. Es una magnitud termodinámica conocida por la letra "H" como su símbolo. Su variación enuncia la cantidad de energía que es absorbida o cedida por un sistema termodinámico, y se puede calcular como se expresa en la ecuación 3.4.

$$\Delta H = (h_f)_{H_2O} - (h_f)_{H_2} - \frac{1}{2}(h_f)_{O_2} \quad [kj/mol] \quad (3.4)$$

La entalpía de los reactantes entrando al sistema debe ser igual a la suma de las entalpías de los productos que salen del sistema, el calor neto generado dentro del sistema.

## CAPÍTULO III. METODOLOGÍA, DESARROLLO e IMPLEMENTACIÓN

El análisis del balance de energía es hecho determinando la temperatura de la celda en la salida, teniendo información de la composición de los reactantes, las temperaturas, la pérdida de calor y el poder producido [34].

### 3.1.2 Entropía

Por otro lado, la entropía es la energía que resulta desechable en el proceso termodinámico, la pérdida irreversible que no puede ser convertida en electricidad. Su símbolo es la letra “S”. Las reacciones en las FCs que tienen entropía negativa generan calor, mientras que las reacciones con entropía positiva pueden extraer calor de sus alrededores. Se puede calcular la entropía, tal como se expresa en la ecuación 3.5.

$$\Delta S = (S_f)_{H_2O} - (S_f)_{H_2} - \frac{1}{2}(S_f)_{O_2} \quad \left[ \frac{kJ}{mol \cdot K} \right] \quad (3.5)$$

### 3.1.3 Energía libre de Gibbs

Las reacciones electroquímicas involucran transferencia de carga eléctrica un cambio en energía libre de Gibbs. La velocidad de una reacción está determinada por una barrera de energía de activación a la cual la carga debe sobreponerse en el movimiento desde el electrolito. La velocidad a la cual la reacción electroquímica procede en la superficie del electrodo es la velocidad a la cual los electrones son entregados o consumidos, fenómeno que es conocido por el nombre de corriente eléctrica [34].

La energía libre de Gibbs es la energía disponible que posee un sistema para desarrollar un trabajo, es la porción de la reacción de entalpía que puede ser convertida en electricidad. En otras palabras, es la energía útil, máxima cantidad de energía eléctrica disponible, y ésta se incrementa a medida que

### CAPÍTULO III. METODOLOGÍA, DESARROLLO e IMPLEMENTACIÓN

la temperatura de la celda se decrementa. El símbolo que la identifica es la letra “G”, y puede ser calculada de dos maneras diferentes [12]:

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S \quad [kj/mol] \quad (3.6)$$

$$\Delta G = -nFEr \quad [kj/mol] \quad (3.7)$$

Donde  $T$  es la temperatura,  $n$  es el número de electrones presente en cada molécula de hidrógeno, en este caso serán dos electrones.  $F$  es la constante de Faraday, que se determina calculando el producto del número de Avogadro y la carga del electrón, y  $Er$  va a ser el potencial reversible.

#### 3.1.4 Trabajo eléctrico

Debido a que el cambio en Gibbs se incrementa a medida que la temperatura de la celda se decrementa, es posible calcular el trabajo eléctrico, cuyo símbolo es  $W_{el}$ . El término de trabajo eléctrico se refiere al movimiento del electrón a través de un circuito externo. El máximo trabajo de salida obtenido de la reacción general (ecuación 3.3) está relacionado a la energía libre de cambio de la reacción. La reacción es espontánea y termodinámicamente favorecedora, porque la energía libre de los productos es menor que la de los reactantes. El máximo trabajo eléctrico alcanzado en una celda de tipo PEM a temperatura y presión constante es dado por la energía libre Gibbs de la reacción electroquímica, tal como se expresa en la ecuación 3.8 [35]:

$$W_{el} = -\Delta G = nFEr \quad [kj/mol] \quad (3.8)$$

## CAPÍTULO III. METODOLOGÍA, DESARROLLO e IMPLEMENTACIÓN

### 3.1.5 Potencial reversible

Es posible calcular el potencial teórico de la celda de combustible, también conocido como potencial de equilibrio o potencial reversible, cuyo símbolo es: “ $E_r$ ” y se refiere al voltaje teórico que se espera que sea obtenido en la celda de combustible en el caso de que no existieran pérdidas de voltaje. El voltaje presenta la diferencia de potencial eléctrico existente entre dos puntos. Otro concepto dice que es el trabajo por unidad de carga desarrollado por el campo eléctrico sobre una partícula cargada, para moverla. Es la capacidad física que tiene un circuito eléctrico, debido a que induce al movimiento de electrones a lo largo de un conductor.

El potencial eléctrico en un punto, es el trabajo que debe realizar un campo electrostático para mover una carga positiva desde dicho punto hasta el punto de referencia. El potencial ideal puede ser expresado como un cambio en la energía libre de Gibbs para la reacción de hidrógeno/oxígeno, y son directamente proporcionales. El potencial teórico, en el cual se asume que no ocurrirán pérdidas de potencial, puede determinarse a través de las siguientes ecuaciones:

$$E_r = \frac{-\Delta G}{nF} \quad [V] \quad (3.9)$$

$$E_r = -\left(\frac{\Delta H}{nF} - \frac{T\Delta S}{nF}\right) \quad [V] \quad (3.10)$$

### CAPÍTULO III. METODOLOGÍA, DESARROLLO e IMPLEMENTACIÓN

Existe una relación entre la temperatura y el potencial reversible, ya que un incremento en la temperatura de la celda resulta en un potencial teórico más bajo. Como se muestra en la tabla 3.1:

**Tabla 3.1** Relación entre la temperatura y el potencial teórico ideal [23].

<b>T(K)</b>	<b><math>\Delta H</math></b>	<b><math>\Delta G</math></b>	<b><math>\Delta S</math></b>	<b>Er(V)</b>
298.15	-286.02	-237.34	-0.16328	1.230
333.15	-284.85	-231.63	-0.15975	1.200
353.15	-284.18	-228.42	-0.15791	1.184
373.15	-283.52	-225.24	-0.15617	1.167

El potencial real de la celda está por debajo de su potencial de equilibrio, debido a las pérdidas irreversibles.

### 3.1.6 Eficiencia teórica

La eficiencia térmica de un dispositivo de conversión de energía, se define como la energía útil obtenida, relacionada al cambio en energía química almacenada que es liberada cuando un combustible reacciona con un oxidante. Esta eficiencia teórica puede ser determinada y su símbolo es la letra “ $\eta$ ”, ésta se expresa en porcentaje, y se determina como se muestra en las ecuaciones 3.11 y 3.12 [35].

$$\eta = \frac{\text{Energía útil de salida}}{\Delta H} \quad [\%] \quad (3.11)$$

$$\eta = \frac{\Delta G}{\Delta H} \quad [\%] \quad (3.12)$$

## 3.2 Modelos matemáticos para determinar los sobrepotenciales en FCs de tipo PEM

### 3.2.1 Sobrepotencial de activación

Las pérdidas de activación tienen lugar en la región de baja corriente, donde las barreras electrónicas deben ser sobrepasadas antes de aventurarse al flujo de corriente e iónico. La pérdida de activación es directamente proporcional al incremento del flujo de corriente. Estas pérdidas ocurren debido a las lentas reacciones electroquímicas en la superficie del electrodo, donde las especies son oxidadas o reducidas [35]. Pueden ser determinadas a través de la ecuación de Tafel, la cual relaciona la velocidad de una reacción electroquímica con el sobrepotencial. La reducción del oxígeno es una reacción mucho más lenta que la oxidación del hidrógeno. Razón por lo cual, la polarización de activación de la oxidación del hidrógeno es mucho

### CAPÍTULO III. METODOLOGÍA, DESARROLLO e IMPLEMENTACIÓN

más pequeña que la polarización de activación en la reacción de reducción del oxígeno. Por tal motivo, no se tendrá en cuenta la polarización del ánodo [23].

Una manera simplificada de mostrar las pérdidas de activación es utilizando la ecuación de Tafel. La cual se presenta de la siguiente manera en su forma original:

$$\text{Ecuación de Tafel: } \Delta V_{act} = a + b \cdot \log(i) \quad (3.13)$$

#### **Corrientes internas y pérdidas crossover:**

Aunque la membrana no es eléctricamente conductora y es prácticamente impermeable a gases reactantes, la corriente perdida en FCs de tipo PEM tiene un valor aproximado de  $0.002 \text{ (Acm}^{-2}\text{)}$ . Esta pérdida se debe a la difusión de combustible de ánodo a cátodo (corrientes internas) y a los electrones que atraviesan la membrana (pérdidas crossover). La permeabilidad del hidrógeno ocurre antes de la reacción, y el crossover de electrones ocurre después de la reacción. El oxígeno podría permear a través de la membrana, pero no se toma en cuenta debido a que la velocidad de su permeación es mucho más lenta que la velocidad de permeación del hidrógeno. Estas pérdidas pueden parecer insignificantes en la operación de FCs de tipo PEM, debido a que la velocidad de la permeación del hidrógeno o el crossover de electrones es algunos órdenes de magnitud menor que la velocidad del consumo del hidrógeno o la corriente eléctrica total generada. Pero cuando la celda de combustible opera a circuito abierto o a muy bajas densidades de corriente, estas pérdidas pueden tener un efecto dramático en el potencial de la celda [36].

### CAPÍTULO III. METODOLOGÍA, DESARROLLO e IMPLEMENTACIÓN

La corriente eléctrica total ( $I$ ) es la suma de la corriente externa (útil) y las pérdidas de corriente debido al crossover de combustible y las corrientes internas. Lo cual se representa en la ecuación 3.14 [23].

$$I = i_{ext} + i_{loss} \quad (3.14)$$

La densidad de corriente es la corriente (electrones o iones) por unidad de área de la superficie [15]. De la ley de Faraday se obtiene que la densidad de corriente es proporcional a la carga transferida y al consumo de reactantes por unidad de área, tal como se expresa en la ecuación 3.15.

$$I = n * F * J \quad (3.15)$$

Donde,  $n * F$  es la carga transferida y  $J$  es el flujo de reactante por unidad de área.

La densidad de corriente puede ser determinada utilizando la ecuación 3.16:

$$\text{Densidad de corriente: } i = \frac{I}{A} \quad (3.16)$$

Donde  $i$  es la densidad de corriente, y  $A$  es el área activa del electrodo. Si esta densidad de corriente total es usada en la ecuación que aproxima el potencial de la celda, se obtiene la ecuación que permite determinar el sobrepotencial de activación en FCs de tipo PEM, quedando la ecuación de Tafel como se presenta en la ecuación 3.17 [23]:

$$\text{Sobrepotencial de activación: } \Delta V_{act} = E_r - \frac{RT}{\alpha F} \ln \left( \frac{i - i_{loss}}{i_0} \right) \quad (3.17)$$

## CAPÍTULO III. METODOLOGÍA, DESARROLLO e IMPLEMENTACIÓN

Donde  $R$  es la constante de los gases ideales,  $T$  es la temperatura,  $\alpha$  es el coeficiente de transferencia,  $F$  es la constante de Faraday,  $i$  es la densidad de corriente,  $i_{loss}$  es la corriente de pérdida, e  $i_0$  es la densidad de corriente de intercambio.

Al ser dos electrones, la velocidad de todos debe ser igual, y es determinada por el más lento. Para describir este proceso es usado el coeficiente de transferencia ( $\alpha$ ), que es un parámetro que ha sido determinado experimentalmente.

El intercambio de densidad de corriente ( $i_0$ ) es la constante de velocidad en las reacciones químicas. Desafortunadamente, las constantes de velocidad son dependientes de la concentración. En este caso,  $i_0$  es una medida de la preparación del electrodo a proceder o iniciar la reacción electroquímica. Si  $i_0$  tiene un valor alto, la superficie del electrodo es más activa. En el ánodo  $i_0$  es mucho más grande que en el cátodo. A mayor  $i_0$ , mayor corriente es generada a cualquier sobrepotencial.

$$i_0(\text{ánodo}) = 10^{-4} = 0.0001$$

$$i_0(\text{cátodo}) = 10^{-9} = 0.000000001$$

Debido a que  $i_0$  es mucho mayor en el ánodo que en el cátodo, el sobrepotencial en el cátodo es mucho mayor que en el ánodo [23].

### 3.2.2 Sobrepotencial óhmico

Las pérdidas óhmicas varían proporcionalmente con el incremento en corriente, debido a la constante natural de resistencia de las FCs. El origen de la polarización viene dado por la resistencia al flujo de iones en el

### CAPÍTULO III. METODOLOGÍA, DESARROLLO e IMPLEMENTACIÓN

electrolito y al flujo de electrones a través de los electrodos y el circuito eléctrico externo. La resistencia eléctrica es la oposición al flujo de electrones al moverse a través de un conductor. Las pérdidas óhmicas dominantes ocurren en el electrolito, y ésta es reducida decreciendo la separación entre el electrolito y el electrodo, mejorando de esta manera la conductividad iónica del electrolito y modificando sus propiedades [35]. En este caso, se requieren membranas menos gruesas, que no ofrezcan mucha resistencia al paso de protones a través de ella [37]. En el caso de las FCs de tipo PEM, están presentes tres tipos de resistencia, las cuales son: resistencia electrónica ( $Ri_e$ ), resistencia iónica ( $Ri_i$ ) y resistencia de contacto ( $Ri_c$ ). Se puede calcular la resistencia total de la siguiente manera [23]:

$$\text{Resistencia total } (Ri): Ri = Ri_e + Ri_i + Ri_c \text{ } [\Omega cm^2] \quad (3.18)$$

La resistencia electrónica es casi despreciable, y las resistencias iónica y de contacto son aproximadamente del mismo orden de magnitud.

El sobrepotencial óhmico se mide a través de la ley de Ohm, la misma define que a mayor diferencia de potencial en los extremos de un conductor, mayor intensidad de corriente circula por el mismo. Quedando el modelo matemático para medir el sobrepotencial óhmico como se expresa en la ecuación 3.19:

$$\text{Sobrepotencial óhmico (Ley de Ohm): } \Delta V_{ohm} = i (Ri) \quad (3.19)$$

#### 3.2.3 Sobrepotencial de concentración

Estas pérdidas ocurren cuando un reactante es rápidamente consumido en el electrodo por la reacción electroquímica. Las pérdidas de concentración ocurren en todo el intervalo de densidad de corriente, pero se vuelven más

### CAPÍTULO III. METODOLOGÍA, DESARROLLO e IMPLEMENTACIÓN

prominentes a altos límites de corriente, donde se vuelve difícil para el gas reactante fluir hasta alcanzar los sitios de reacción de la celda. Debido a que el gas reactante es consumido en el electrodo a través de la reacción electroquímica, habrá una caída de potencial debido a la caída en la concentración inicial. Algunos procesos responsables de la pérdida de concentración son:

- Baja difusión de gas en los poros del electrodo.
- Solución de reactantes en el electrolito.
- Disolución de productos fuera del sistema.
- Bajo transporte de reactantes hacia la reacción electroquímica.
- Bajo movimiento de productos desde los sitios de reacción [35].

Para determinar el sobrepotencial de concentración se deben tener en cuenta la ecuación de Nernst y la ley de Fick. La primera se utiliza para calcular el potencial de reducción de un electrodo fuera del ambiente estándar. La ley de Fick establece ecuaciones que describen de manera matemática la difusión de materia en un ambiente en el cual en un inicio no existía un equilibrio químico o térmico. Esta ley puede ser utilizada para resolver el coeficiente de difusión. La ecuación de Nernst se presenta de la siguiente forma:

$$\text{Ecuación de Nernst: } \Delta V = \frac{RT}{nF} \ln\left(\frac{C_B}{C_S}\right) \quad (3.20)$$

Siendo  $C_B$  y  $C_S$ , la concentración de los reactantes y la concentración de los reactantes en la superficie del catalizador, respectivamente, la unidad de medida de ambos es  $[mol/cm^3]$ .

### CAPÍTULO III. METODOLOGÍA, DESARROLLO e IMPLEMENTACIÓN

De acuerdo a las leyes de Fick, el flujo de reactantes es proporcional al gradiente de concentración. En este caso, intervienen las siguientes dos ecuaciones:

$$\text{Ley de Fick: } N = \frac{D \cdot (C_B - C_S)}{\delta} A \quad (3.21)$$

$$N = \frac{I}{nF} \quad (3.22)$$

Donde  $N$  es el flujo de los reactantes [ $mol/s$ ],  $D$  es el coeficiente de difusión de las especies reactantes [ $cm^2/s$ ],  $A$  es el área activa del electrodo [ $cm^2$ ], y  $\delta$  es la distancia de difusión [ $cm$ ].

En estado estable, la vecindad a la cual las especies reactantes son consumidas en la reacción electroquímica es igual al flujo de difusión. Uniendo las dos ecuaciones de la Ley de Fick mostradas anteriormente, se obtiene la siguiente ecuación [12]:

$$i = \frac{nF \cdot D \cdot (C_B - C_S)}{\delta} \quad (3.23)$$

Se alcanza la corriente límite cuando no hay reactantes en la superficie del catalizador, por lo tanto, la concentración de la superficie  $C_S = 0$  cuando  $i = i_L$ . A partir de aquí, se obtiene que corriente límite se puede calcular de la siguiente manera [12]:

$$i_L = \frac{nFDC_B}{\delta} \quad (3.24)$$

### CAPÍTULO III. METODOLOGÍA, DESARROLLO e IMPLEMENTACIÓN

Combinando la ecuación de Nernst, con la ecuación combinada obtenida a partir de las leyes de Fick, y la ecuación de corriente límite, una relación para determinar la pérdida de voltaje debido a la polarización de concentración es obtenida, y se puede apreciar en la ecuación 3.22 [24]:

$$\text{Sobrepotencial de concentración: } \Delta V_{conc} = \left(\frac{RT}{nF}\right) \ln\left(\frac{i_L}{i_L-i}\right) \quad (3.25)$$

#### 3.2.4 Modelo matemático

Combinando los tres sobrepotenciales se obtiene el modelo matemático que mide las pérdidas totales de voltaje que están presentes en las FCs de tipo PEM y a su vez se puede determinar el potencial real de la misma [38]. En este caso se debe obtener la diferencia entre el potencial teórico ideal y la polarización. Como se muestra en la siguiente ecuación:

$$V_{celda} = E_r - \Delta V_{act} - \Delta V_{ohm} - \Delta V_{conc} \quad (3.26)$$

Realizando la sustitución correspondiente a los tres sobrepotenciales, de acuerdo con las ecuaciones que fueron mostradas previamente, el modelo matemático queda de la siguiente forma [23]:

$$V_{celda} = E_r - \frac{RT}{\alpha F} \ln\left(\frac{i-i_{loss}}{i_0}\right) - i(Ri) - \frac{RT}{nF} \ln\left(\frac{i_L}{i_L-i}\right) \quad (3.27)$$

## CAPÍTULO III. METODOLOGÍA, DESARROLLO e IMPLEMENTACIÓN

### 3.3 Constantes y variables a utilizar en la evaluación del modelo

#### 3.3.1 Constantes conocidas

**Tabla 3.2** Constantes conocidas a utilizar en el modelo

Constantes	Valor (Unidad de medida)
Constante de Faraday (F)	96485 ( <i>c/mol</i> )
Constante universal de los gases ideales (R)	8.314 ( <i>Jmol<sup>-1</sup> k<sup>-1</sup></i> )

#### 3.3.2 Parámetros constantes

Los parámetros que se muestran en la tabla 3.3, se determinó mantenerlos constantes en la evaluación del modelo matemático. Debido a que en el libro de Frano Barbir, titulado “PEM fuel cells”, se describen detalladamente y se especifica que se pueden utilizar con los valores constantes que ellos definen, los cuales fueron obtenidos a partir de datos experimentales.

**Tabla 3.3** Parámetros que se tomaron con valor constante en el modelo [39]

Constantes	Valor (unidad de medida)	Fuente bibliográfica
Corriente inicial ( $i_0$ )	0.000003 ( $Acm^{-2}$ )	Frano Barbir, PEM fuel cells, (libro) [2005]
Corriente de pérdida ( $i_{loss}$ )	0.002 ( $Acm^{-2}$ )	Frano Barbir, PEM fuel cells, (libro) [2005]

### CAPÍTULO III. METODOLOGÍA, DESARROLLO e IMPLEMENTACIÓN

Resistencia ( $R_i$ )	0.15 ( $\Omega cm^2$ )	Frano Barbir, PEM fuel cells, (libro) [2005]
Densidad de corriente límite ( $i_L$ )	1.6 ( $A cm^{-2}$ )	Frano Barbir, PEM fuel cells, (libro) [2005]
Número de electrones ( $n$ )	2	James Larminie, Andrew Dicks, Fuel cell Systems explained, Second ed, (libro) [2003]

#### 3.3.3 Variables de Control

En este caso, el potencial reversible es un parámetro variable que depende de la temperatura. Son inversamente proporcionales, de manera que a mayor temperatura, menor será el potencial reversible, tal como se muestra en la tabla 3.4:

**Tabla 3.4** Relación entre la temperatura y el potencial reversible [40]

Temperatura (T)	Potencial reversible ( $E_r$ )
298.15 K – 25°C	1.230 (V)
333.15 K – 60°C	1.200 (V)
353.15 K – 80°C	1.184 (V)
373.15 K – 100°C	1.167 (V)

Para la evaluación del modelo matemático definido, se determinó variar el valor de la densidad de corriente, con el objetivo de ir analizando el sistema a medida que la misma fue aumentando y poder graficar el comportamiento

### CAPÍTULO III. METODOLOGÍA, DESARROLLO e IMPLEMENTACIÓN

obtenido. Esta densidad de corriente se varió en un intervalo que llegó hasta el valor de corriente límite.

Una variable crítica es aquella que al variar su valor, el desempeño del sistema se ve afectado en mayor medida que cuando varía el valor de una variable que no es crítica para el sistema. La variable crítica de este modelo es el coeficiente de transferencia “alfa”. Pues, el modelo matemático evaluado con todos los parámetros constantes, excepto el coeficiente de transferencia, presenta una curva de polarización con grandes diferencias de voltaje. Para una densidad de corriente de  $1 A/cm^2$ , evaluando el coeficiente de transferencia en los valores de: (0.5, 1, 1.5) se corresponde con valores de voltaje de: 0.16 volts, 0.6 volts, y 0.74 volts, respectivamente.

Debido a que el coeficiente de transferencia de una variable crítica del sistema, en este trabajo, se decidió hacer una variación en esta variable, moviendo sus valores en el intervalo definido por Frano Barbir en su libro “PEM fuel cells”. Lo anteriormente expuesto se puede apreciar en la tabla 3.5.

**Tabla 3.5** Intervalos de los parámetros variables

<b>VARIABLES</b>	<b>Intervalo (unidad de medida)</b>	<b>Fuente bibliográfica</b>
Densidad de corriente ( $i$ )	[0.01 – 1.6] ( $Acm^{-2}$ )	Frano Barbir, PEM fuelcells, (libro) [2005]
Coeficiente de transferencia de carga ( $\alpha$ )	[0.5 – 1.5]	Frano Barbir, PEM fuel cells, (libro) [2005]

### 3.4 Función objetivo que se desea optimizar

Se desea maximizar la función objetivo asociada al modelo matemático mostrado en la ecuación (3.27), la función objetivo se presenta a continuación:

Maximizar:

$$F(E_r, T, i, \alpha) = E_r - \frac{8.314 * T}{\alpha * 96485} \ln\left(\frac{i - 0.002}{0.000003}\right) - i(0.15) - \frac{8.314 * T}{2 * 96485} \ln\left(\frac{1.6}{1.6 - i}\right) \quad (3.28)$$

Sujeto a las siguientes restricciones:

$$1.167 \leq E_r \leq 1.230 \text{ V}$$

$$298.15 \leq T \leq 373.15 \text{ K}$$

$$0.01 \leq i \leq 1.6 \text{ A/cm}^2$$

$$0.5 \leq \alpha \leq 1.5$$

Con la optimización de la función objetivo (3.28) se podrán obtener las condiciones de operación para aumentar el potencial real en FCs de tipo PEM, lo cual se llevará a cabo disminuyendo las tres pérdidas de voltaje que se encuentran presente en estos dispositivos.

### 3.5 Características del recocido simulado

- Algoritmo heurístico que se utiliza para resolver problemas de optimización combinatoria.
- Se tendrán varios estados de energía, los cuales serán las posibles soluciones.
- Se llevará a cabo la generación de vecinos, de manera aleatoria.

## **CAPÍTULO III. METODOLOGÍA, DESARROLLO e IMPLEMENTACIÓN**

- La aceptación de vecinos utiliza el criterio de metrópolis y el factor de Boltzmann.
- La característica principal de este algoritmo es que puede escapar de óptimos locales, porque en ocasiones acepta soluciones vecinas peores que la solución actual, dependiendo de la probabilidad calculada.

### **3.6 Pasos del algoritmo**

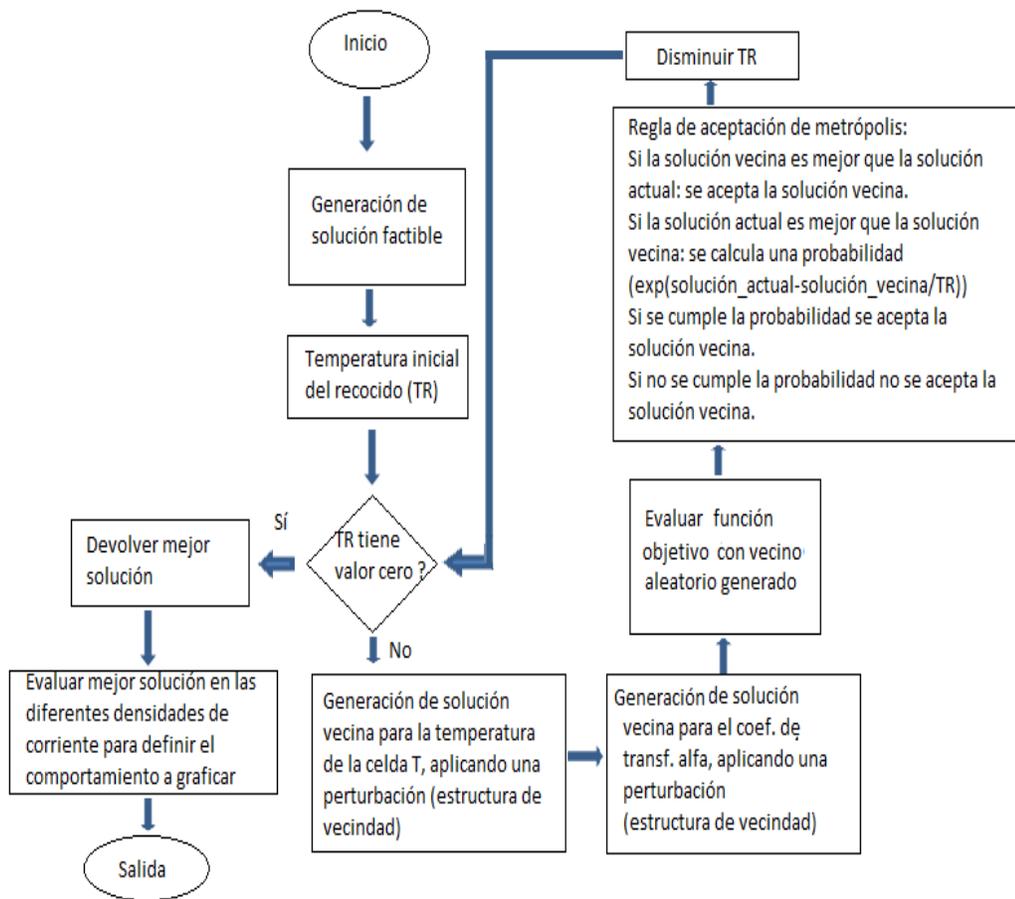
- Se tendrá una temperatura variable con un valor inicial alto y lentamente se decrementará a medida que el algoritmo avanza.
- Se aceptarán soluciones peores que la solución actual, dependiendo del valor de la probabilidad de aceptación.
- Se permitirá que el algoritmo salte en el espacio de soluciones a otro lugar temprano, a otro punto en el espacio de soluciones.
- Se permitirá que el algoritmo se enfoque lentamente en un área del espacio de búsqueda, en la cual se encuentre una solución cercana al óptimo.

### **3.7 Características del algoritmo de recocido simulado implementado**

- La temperatura inicial del recocido simulado tuvo un valor de 1000.
- Se definió la estructura de vecindad desarrollada.
- La longitud de la cadena de Markov definió el tamaño de la vecindad (función aleatoria).
- Se aplicó la ley de enfriamiento, también conocida como ley de evolución de la temperatura.
- El criterio de congelación se aplicó cuando la temperatura del recocido simulado fue igual a cero.

**3.8 Diagrama de flujo del algoritmo de recocido simulado**

El diagrama de flujo de un algoritmo muestra la secuencia de pasos que se ejecutan a la vez que éste es implementado, y describe los términos y condiciones que deben cumplirse para que el algoritmo devuelva un resultado satisfactorio [39].



**Figura 3.1** Diagrama de flujo del algoritmo implementado.

## CAPÍTULO IV. PRESENTACIÓN DE RESULTADOS

### Capítulo IV. PRESENTACIÓN DE RESULTADOS

Este capítulo presenta el análisis de los resultados obtenidos.

#### 4.1 Características del algoritmo implementado

- El algoritmo fue implementado con 1000, 5000 y 10000 combinaciones. Para los tres casos de combinaciones, los resultados de voltaje obtenidos estuvieron en el intervalo  $[V > 0.69 - V < 0.70]$ . Logrando llegar a la convergencia.
- Se estableció que el algoritmo trabajará con 1000 combinaciones, porque a partir de 1000 combinaciones se obtuvo el mismo resultado.
- El tiempo de ejecución del algoritmo es de entre 0.7 y 0.9 segundos.
- La complejidad del algoritmo es  $O(n)$ .
- Se definió hacer las comparaciones en los valores de voltaje cuando la densidad de corriente fue igual a  $1.59 \text{ (A / cm}^2\text{)}$ , pues fue el valor de densidad de corriente inmediato anterior a la corriente límite.

#### 4.2 Resultados de voltaje obtenidos (30 ejecuciones)

El algoritmo de recocido simulado implementado fue ejecutado en 30 ocasiones, obteniéndose diferentes resultados de la función objetivo para cada ejecución. En cada ejecución, se guardó el resultado de temperatura y coeficiente de transferencia para cada valor de voltaje obtenido de evaluar la función objetivo. Así como, se obtuvo el número de combinaciones que se desarrollaron hasta alcanzar el resultado en cuestión; el valor del potencial reversible reportado por el algoritmo; la cantidad de soluciones vecinas mejores que la solución actual (las cuales son aceptadas siempre); la cantidad de soluciones vecinas peores que la solución actual, pero que aún

## CAPÍTULO IV. PRESENTACIÓN DE RESULTADOS

así, el algoritmo decidió aceptarlas después de evaluar la función de probabilidad; y la cantidad de veces que se obtienen soluciones vecinas peores que la actual, pero el algoritmo no las acepta puesto que la función de probabilidad de aceptación no se cumplió.

Las tablas 4.1 y 4.2 muestran los resultados obtenidos en cada ejecución del algoritmo.

**Tabla 4.1** Resultados obtenidos para 30 ejecuciones del algoritmo implementado

Número de ejecuciones	Voltaje	Temp.	Alfa	Potencial reversible	Número de combinaciones
1	0.698245	299.974	1.49637	1.23	1000
2	0.697245	299.265	1.48529	1.23	1000
3	0.697178	300.67	1.49384	1.23	1000
4	0.696292	302.24	1.49808	1.23	1000
5	0.697658	299.656	1.49048	1.23	1000
6	0.699239	299.185	1.49783	1.23	1000
7	0.694084	302.277	1.48401	1.23	1000
8	0.699453	299.013	1.49815	1.23	1000
9	0.695564	303.053	1.4985	1.23	1000
10	0.697906	300.773	1.49927	1.23	1000
11	0.69524	301.728	1.48798	1.23	1000

## CAPÍTULO IV. PRESENTACIÓN DE RESULTADOS

12	0.696103	298.373	1.47543	1.23	1000
13	0.697388	299.468	1.48752	1.23	1000
14	0.698405	299.313	1.49316	1.23	1000
15	0.693499	301.066	1.47266	1.23	1000
16	0.699444	299.288	1.49985	1.23	1000
17	0.695558	301.235	1.48691	1.23	1000
18	0.699279	298.841	1.49588	1.23	1000
19	0.696416	299.997	1.48459	1.23	1000
20	0.692485	306.099	1.49783	1.23	1000
21	0.698012	300.764	1.49991	1.23	1000
22	0.692317	306.058	1.49649	1.23	1000
23	0.697615	300.748	1.49719	1.23	1000
24	0.694933	299.752	1.47351	1.23	1000
25	0.697983	298.514	1.48529	1.23	1000
26	0.698472	298.825	1.49048	1.23	1000
27	0.696976	299.663	1.48608	1.23	1000
28	0.698061	300.51	1.48500	1.23	1000
<b>29</b>	<b>0.690492</b>	<b>298.182</b>	<b>1.43619</b>	<b>1.23</b>	<b>1000</b>
<b>30</b>	<b>0.699859</b>	<b>298.283</b>	<b>1.49625</b>	<b>1.23</b>	<b>1000</b>

---

## CAPÍTULO IV. PRESENTACIÓN DE RESULTADOS

**Tabla 4.2** Distribución realizada por el algoritmo implementado (30 ejecuciones)

Número de ejecuciones	Cantidad de soluciones vecinas mejores	Cantidad de veces que se acepta una peor solución	Cantidad de veces que no se acepta una peor solución
1	41	334	625
2	384	336	280
3	407	332	261
4	372	315	313
5	426	332	242
6	388	359	253
7	401	335	264
8	365	336	299
9	387	322	291
10	389	329	282
11	383	325	292
12	395	341	264
13	369	321	310
14	394	329	277
15	385	333	282
16	378	330	292
17	539	461	0

## CAPÍTULO IV. PRESENTACIÓN DE RESULTADOS

18	402	330	268
19	383	341	276
20	396	360	244
21	383	312	305
22	385	334	281
23	387	313	300
24	380	350	270
25	383	617	0
26	384	352	264
27	407	341	252
28	391	330	279
29	502	498	0
30	47	42	911

---

Las tablas 4.3 y 4.4 muestran el mejor y el peor resultado de voltaje obtenidos durante las 30 ejecuciones del algoritmo, en conjunto con los parámetros asociados a ellos.

## CAPÍTULO IV. PRESENTACIÓN DE RESULTADOS

**Tabla 4.3** Parámetros asociados a la mejor y peor solución obtenidas para 30 ejecuciones del algoritmo implementado

Ejecución	Voltaje	Temp.	Alfa	Potencial reversible	Número de combinaciones
Mejor solución	0.699859	298.283	1.49625	1.23	1000
Peor solución	0.690492	298.182	1.43619	1.23	1000

Una diferencia entre el mejor y peor voltaje muy pequeña, con valor igual a 1.3565689 %, lo que representa un algoritmo convergente en un valor de voltaje igual a: 0.69 volts. En el desarrollo del recocido simulado se busca la convergencia, de manera que, mientras más cercanos sean los valores de los resultados obtenidos en las ejecuciones realizadas, mayor convergencia se alcanzó en el algoritmo.

**Tabla 4.4** Presentación de la decisiones tomadas por el algoritmo, para su mejor y peor solución.

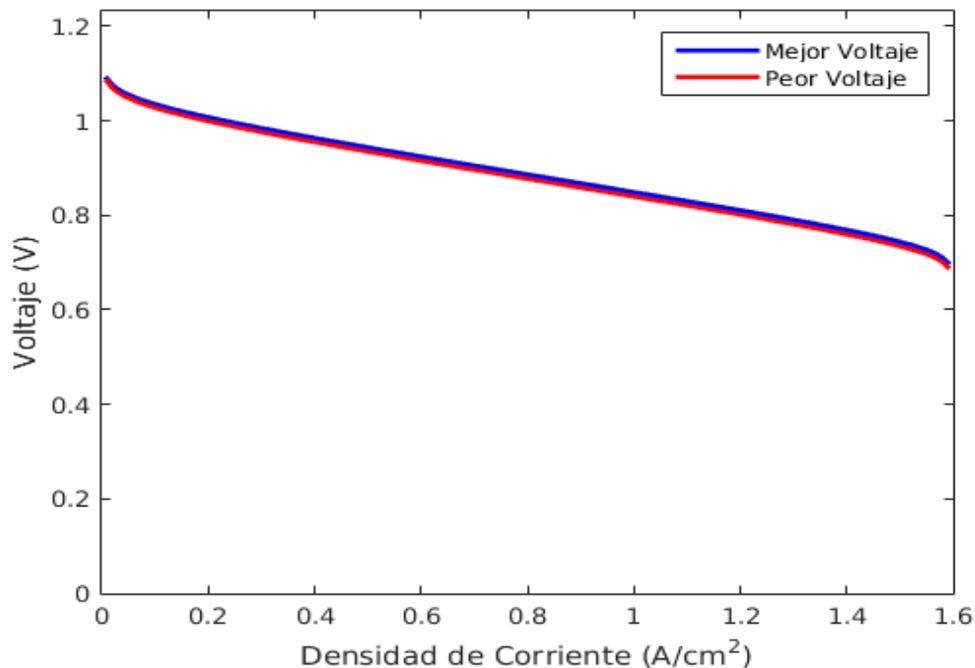
Ejecución	Cantidad de soluciones vecinas mejores	Cantidad de veces que se acepta una peor solución	Cantidad de veces que no se acepta una peor solución
Mejor solución	47	42	911
Peor	502	498	0

## CAPÍTULO IV. PRESENTACIÓN DE RESULTADOS

solución

---

La figura 4.1 presenta dos curvas de polarización asociadas al mejor voltaje (curva azul) y peor voltaje (curva roja) devueltos por La función objetivo durante las 30 ejecuciones del algoritmo implementado. Se puede apreciar una convergencia del algoritmo, ya que ambas curvas poseen un comportamiento similar y cercano en sus valores. Teniendo en cuenta que de las 30 ejecuciones desarrolladas, las dos curvas representadas son los casos más extremos, las otras 28 curvas que no se muestran en la gráfica siguen un comportamiento similar al mostrado y se encuentran más cercanas a cada una de ellas.



**Figura 4.1** Modelado de la mejor y peor solución obtenida con el algoritmo implementado.

## CAPÍTULO IV. PRESENTACIÓN DE RESULTADOS

### 4.3 Análisis de resultados

Las tablas 4.5 y 4.6 muestran el comportamiento de los parámetros y la distribución realizada por el algoritmo, respectivamente, para la curva modelada con los parámetros que dieron lugar al mejor voltaje obtenido de las 30 ejecuciones realizadas (curva azul), y la curva modelada con los parámetros experimentales que ofrece la literatura (curva roja). Se pudo llevar a cabo esta comparación porque en ambos casos se utiliza la misma función objetivo. Se mantuvieron los parámetros que se determinó utilizar como constantes con los mismos valores en ambas evaluaciones, los mismos son: corriente inicial, corriente de pérdida, corriente límite, constante de Faraday, constante de los gases ideales, resistencia, y número de electrones. En cambio, la densidad de corriente, la temperatura, el potencial reversible y el coeficiente de transferencia tuvieron valores variables. Ya que se desarrolló este trabajo con el objetivo de que sea el algoritmo quien proponga los valores de coeficiente de transferencia y temperatura que se deben utilizar para minimizar los sobrepotenciales. Y estos valores son los asociados a los mejores resultados de potencial que se obtuvo al evaluar La función objetivo. El resultado obtenido de evaluar la función objetivo con parámetros de la literatura muestra un voltaje = 0.510442 volts en el punto de densidad de corriente =  $1.59 \text{ (A/cm}^2\text{)}$ , mientras que el mejor resultado obtenido de evaluar la función objetivo con el algoritmo implementado equivale a un voltaje = 0.699859 volts en el mismo punto de densidad de corriente antes mencionado. El algoritmo implementado logró maximizar el potencial, pues el voltaje de la literatura corresponde a un 72.93 % del voltaje calculado por el algoritmo presente.

Este algoritmo de recocido simulado propone valores de temperatura, potencial reversible y coeficiente de transferencia que ofrecen un mejor valor de voltaje durante todo el rango de densidad de corriente. Lo cual garantiza una curva de polarización con notables mejoras, disminuyendo las pérdidas de voltaje involucradas y garantizando una mayor eficiencia de la pila de

## CAPÍTULO IV. PRESENTACIÓN DE RESULTADOS

combustible. La figura 4.2 describe el comportamiento de estas curvas, en la cual se aprecia que la curva modelada a partir de los parámetros propuestos por el algoritmo de recocido simulado implementado (curva azul) ofrece un mejor desempeño que la curva modelada a partir de los datos experimentales obtenidos de la literatura (curva roja). Pues la curva azul se mantiene durante toda su trayectoria con menos pérdidas de polarización que la curva roja.

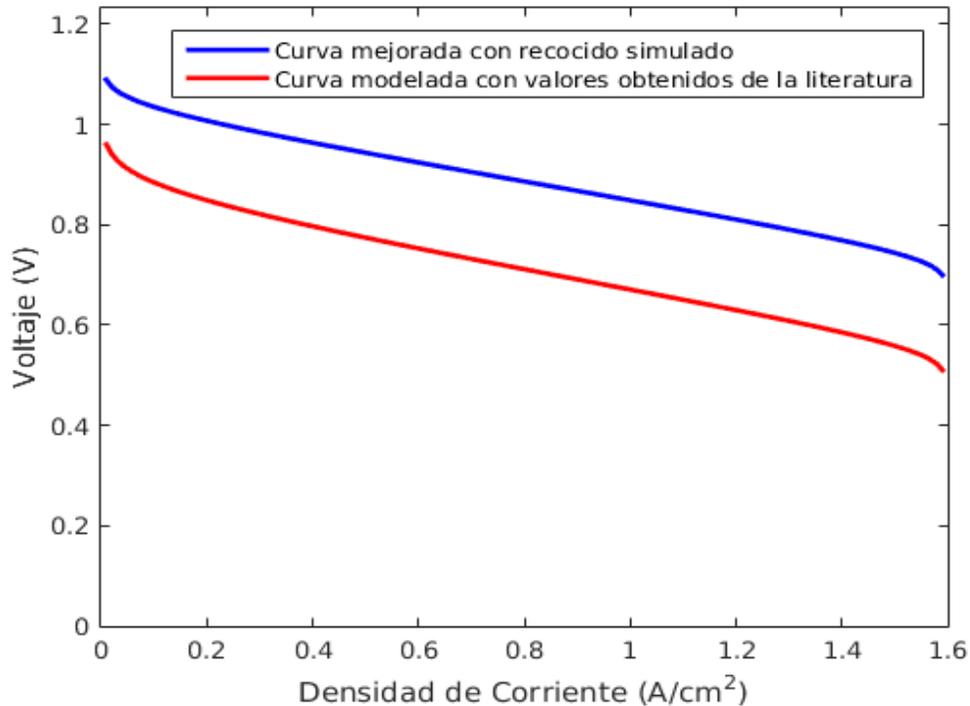
**Tabla 4.5** Comparación entre los parámetros de la curva modelada a partir de datos experimentales de la literatura y los parámetros del resultado obtenido con el recocido simulado implementado.

Curva	Voltaje	Temp.	Alfa	Potencial reversible	Número de combinaciones
Color azul	0.699859	298.283	1.49625	1.23	1000
Color rojo	0.510442	333	1	1.200	1000

**Tabla 4.6** Presentación de las decisiones tomadas por el algoritmo implementado

Curva	Cantidad de soluciones vecinas mejores	Cantidad de veces que se acepta una peor solución	Cantidad de veces que no se acepta una peor solución
Color azul	387	403	210
Color rojo	–	–	–

## CAPÍTULO IV. PRESENTACIÓN DE RESULTADOS



**Figura 4.2** Comparación entre la curva modelada a partir del resultado obtenido con el recocido simulado implementado (curva azul) y la curva modelada a partir de datos experimentales de la literatura (curva roja).

### 4.4 Determinando la potencia

El término Potencia es definido como la capacidad para realizar una acción o para producir un efecto determinado. También puede verse como la cantidad de trabajo efectuado por unidad de tiempo.

Cuando se habla de Potencia eléctrica se hace referencia a la correlación entre el paso de energía de un flujo y la unidad de tiempo, o sea, es la cantidad de energía entregada por un componente en un instante determinado.

## CAPÍTULO IV. PRESENTACIÓN DE RESULTADOS

En este caso se requiere calcular la potencia para determinar en cuál valor de densidad de corriente se registró el mayor voltaje, la misma es el producto del voltaje por la corriente, tal como se muestra en las siguientes ecuaciones [40]:

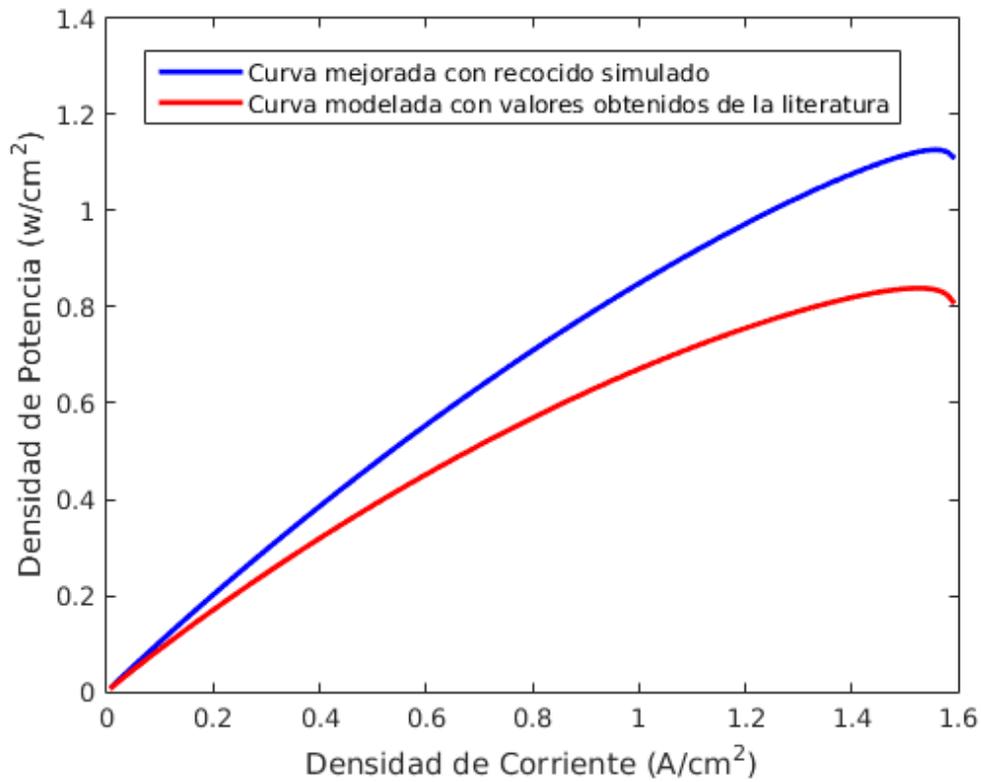
$$Potencia = v * i [w] \quad (4.1)$$

$$Densidad de Potencia = v * densidad de i [w/cm^2] \quad (4.2)$$

La figura 4.4 muestra la gráfica de potencia mejorada con recocido simulado (curva azul) y la gráfica de potencia modelada con parámetros de la literatura (curva roja). Se puede apreciar que se alcanza mayor potencia cuando se evalúa la función objetivo con el alfa y la temperatura propuestos por el algoritmo de recocido simulado. En el caso de la curva en que se han utilizado las condiciones que propone el recocido simulado, el punto de mayor potencia = 1.12707 ( $w/cm^2$ ), se alcanzó en la densidad de corriente = 1.56 ( $A/cm^2$ ), y para la curva modelada a partir de parámetros experimentales obtenidos de la literatura, la mayor potencia = 0.839147 ( $w/cm^2$ ) fue alcanzada para la densidad de corriente = 1.53 ( $A/cm^2$ ).

Los valores de potencia reportados en la literatura con la cual se establece la comparación, corresponden al 74.45 % del voltaje calculado con el algoritmo de recocido simulado.

## CAPÍTULO IV. PRESENTACIÓN DE RESULTADOS



**Figura 4.3** Comparación entre la potencia mejorada con recocido simulado (curva azul) y la potencia modelada con parámetros de la literatura (curva roja).

### 4.5 Análisis de los parámetros variables del algoritmo

Las figuras 4.5, 4.6 y 4.7 muestran los valores de los parámetros variables para las 30 ejecuciones del recocido simulado desarrollado. El algoritmo propone valores de alfa y de temperatura en cada ejecución, que evaluados en la función objetivo devuelven valores de voltaje. Estos resultados fueron graficados señalando los puntos para los cuales se obtuvo la mejor y peor combinación de los mismos.

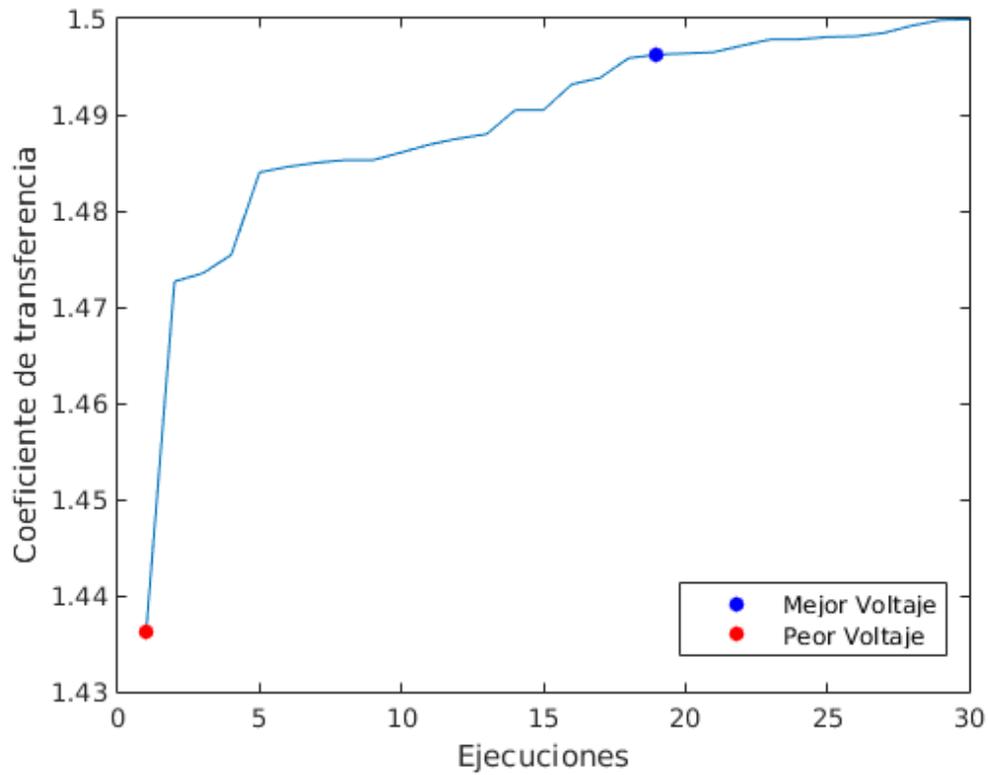
## CAPÍTULO IV. PRESENTACIÓN DE RESULTADOS

La figura 4.5 describe el comportamiento del coeficiente de transferencia a lo largo de las ejecuciones desarrolladas. El punto azul de esta gráfica está asociado al valor de  $\alpha = 1.49625$ , para el cual se obtuvo el mejor voltaje de todas las ejecuciones. Mientras que el punto rojo de esta gráfica está asociado al valor de  $\alpha = 1.43619$ , para el cual se obtuvo el peor voltaje de todas las ejecuciones. Demostrando que se trata en este caso de una variable crítica, pues afecta drásticamente el comportamiento del sistema. Se evidencia que un valor alto de  $\alpha$  brinda mayor probabilidad de disminuir los sobrepotenciales, y a su vez, alcanzar mejor eficiencia.

La figura 4.6 describe el comportamiento de la variable temperatura a lo largo de las ejecuciones desarrolladas. El punto azul de esta gráfica está asociado al valor de temperatura, para el cual se obtuvo el mejor voltaje de todas las ejecuciones. Mientras que el punto rojo de esta gráfica está asociado al valor de temperatura para el cual se obtuvo el peor voltaje de todas las ejecuciones. El valor de temperatura es de 298 (k) en ambos casos, pues el algoritmo evalúa la función objetivo teniendo en cuenta todos los parámetros involucrados y algunos de ellos afectan más al voltaje que la temperatura. Demostrando que se trata en este caso de una variable que no es crítica para el sistema, siempre y cuando se mueva en el intervalo [298, 306] (K).

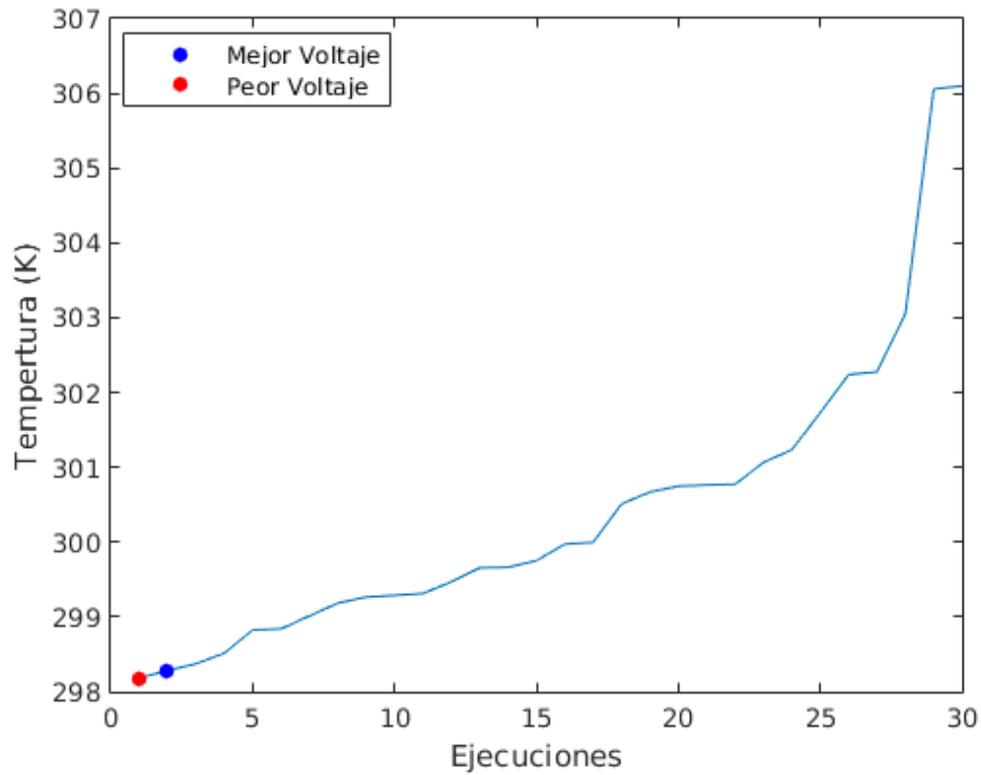
La figura 4.6 describe el comportamiento de la función objetivo evaluada a lo largo de las ejecuciones desarrolladas. El punto azul de esta gráfica está asociado al valor de voltaje = 0.699859, el cual se corresponde con el mejor voltaje alcanzado en todas las ejecuciones realizadas. Mientras que el punto rojo de esta gráfica está asociado al valor de voltaje = 0.690492, el cual se corresponde con el peor voltaje alcanzado en todas las ejecuciones. Demostrando que el algoritmo convergió en el valor de voltaje = 0.69 (V).

## CAPÍTULO IV. PRESENTACIÓN DE RESULTADOS



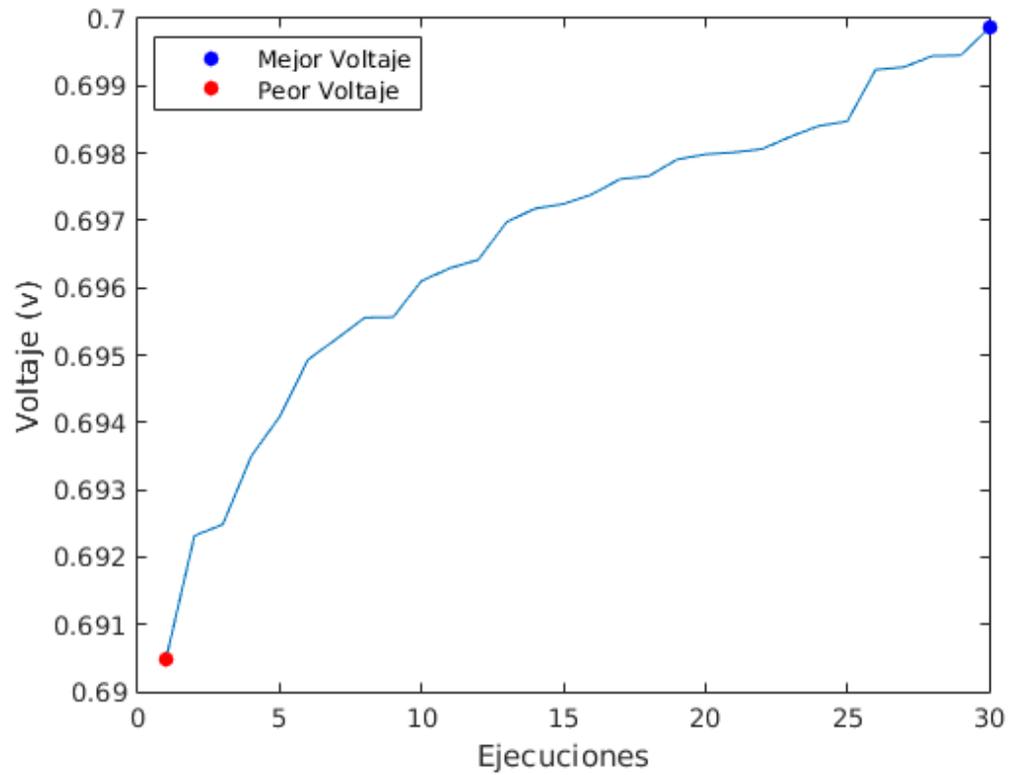
**Figura 4.4** Valores obtenidos con el algoritmo implementado, para el coeficiente de transferencia (alfa). Punto azul: valor de alfa que se corresponde con el mejor voltaje, y punto rojo: valor de alfa que se corresponde con el peor voltaje obtenido en las 30 ejecuciones del algoritmo.

## CAPÍTULO IV. PRESENTACIÓN DE RESULTADOS



**Figura 4.5** Valores de temperatura obtenidos con el algoritmo implementado. Punto azul: valor de temperatura que se corresponde con el mejor voltaje, y punto rojo: valor de temperatura que se corresponde con el peor voltaje obtenido en las 30 ejecuciones del algoritmo.

## CAPÍTULO IV. PRESENTACIÓN DE RESULTADOS



**Figura 4.6** Valores de voltaje obtenidos con el algoritmo implementado. Punto azul: mejor voltaje obtenido y punto rojo: peor voltaje obtenido en las 30 ejecuciones del algoritmo.

### Capítulo V. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

#### 5.1. CONCLUSIONES

Con la implementación del algoritmo heurístico de recocido simulado se pudo obtener una combinación de parámetros (Temperatura, coeficiente de transferencia y potencial reversible) que permitieron maximizar el voltaje real de la celda, obteniendo un potencial 37 % mayor al original. Esta maximización de potencial se llevó a cabo con la combinación de parámetros siguiente: potencial reversible igual a 1.23 volts, temperatura igual a 298 K, y coeficiente de transferencia igual a 1.49.

El algoritmo demostró que el coeficiente de transferencia es una variable crítica que afecta la eficiencia de la celda.

Se propone un conjunto de parámetros (potencial reversible, coeficiente de transferencia y temperatura) que podrán incrementar la eficiencia de la celda con respecto a datos experimentales que hacen uso de la misma función objetivo.

Se logró obtener un algoritmo de recocido simulado que converge en un mismo valor de voltaje con dos cifras significativas.

El algoritmo de recocido simulado permitió modelar la curva de polarización, con valores de potencial superiores a 0.6 volts para densidades de corriente de  $1.5 A/cm^2$ , lo cual se aproxima a los más altos encontrados en la literatura.

### 5.2. TRABAJOS FUTUROS

Se propone realizar las pruebas experimentales para verificar los resultados obtenidos con el algoritmo implementado.

Se propone, utilizando el mismo modelo matemático, implementar otros algoritmos heurísticos que no hayan sido implementados hasta la fecha para resolver este tipo de problemas.

Se propone implementar recocido simulado a otros modelos matemáticos reportados en la literatura, así como su comparación con otros algoritmos heurísticos.

## REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

[1] M. Ibárcena, J.M. Scheelje, El cambio climático principales causantes, consecuencias y compromisos de los países involucrados, XII congreso forestal mundial Quebec Canada (2003).

[2] Ecoinventos, <https://ecoinventos.com/energias-renovables>, (2018).

[3] Canan Acar, Ibrahim Dincer, The potential role of hydrogen as a sustainable transportation fuel to combat global warming, International Journal of Hydrogen Energy, (2018).

[4] J.M. Sierra a, S.J. Figueroa-Ramírez a , S.E. Díaz a , J. Vargas b , P.J. Sebastian c, Numerical evaluation of a PEM fuel cell with conventional flow fields adapted to tubular plates, International journal of hydrogen energy 39 (2014) 16694 – 16705.

[5] Li Zhang, Ning Wang, An adaptive RNA genetic algorithm for modeling of proton exchange membrane fuel cells, International Journal of Hydrogen Energy 38 (2013) 219 – 228.

[6] Oguz Emrah Turgut, Mustafa Turhan Coban, Optimal proton exchange membrane fuel cell modelling based on hybrid Teaching Learning Based Optimization – Differential Evolution algorithm, Ain Shams Engineering Journal 7 (2016) 347– 360.

[7] Petterson MolinaVale, The changing climate of climate change economics, Ecological Economics 121 (2016) 12-19.

- [8] J.C Chávez Velasco, J. Meléndez Marcos, La física en el cambio climático Mitos y Realidades, 4 Congreso Nacional de Investigación en Cambio Climático (2014).
- [9] J. Macedo-Valencia, J.M. Sierra\*, S.J. Figueroa-Ramírez, S.E. Díaz, M. Meza, 3D CFD modeling of a PEM fuel cell stack, International journal of hydrogen energy 41 (2016) 23425 – 23433.
- [10] Alireza Askarzadeh, and Alireza Rezazadeh, A new heuristic optimization algorithm for modeling of proton exchange membrane fuel cell: bird mating optimizer, International journal of energy research 37 (2013) 1196–1204.
- [11] LiuHongtao LiuWenjia, The analysis of effects of clean energy power generation, Energy Procedia 152 (2018) 947-952.
- [12] J.M. Sierra, Diseño y simulación de una celda de combustible tipo PEM mediante técnicas de CFD, Tesis de doctorado (2010).
- [13] Chaohua Dai, Weirong Chen, Zhanli Cheng, Qi Li , Zhiling Jiang, Junbo Jia, Seeker optimization algorithm for global optimization: A case study on optimal modelling of proton exchange membrane fuel cell (PEMFC), Electrical Power and Energy Systems 33 (2011) 369–376.
- [14] S.A. Grigoriev, A.A. Kalinnikov, Mathematical modeling and experimental study of the performance of PEM water electrolysis cell with different loadings of platinum metals in electrocatalytic layers, International Journal of Hydrogen Energy 42 (2017) 1590 – 1597.

[15] Po Hong a,b , Liangfei Xu a,c,d , Jianqiu Li a,c,\* , Mingguo Ouyang a, Modeling and analysis of internal water transfer behavior of PEM fuel cell of large surface area, International Journal of Hydrogen Energy 42 (2017) 18540 – 18550.

[16] A.Vasilyev, J.Andrews, L.M.Jackson, S.J.Dunnett, B.Davies, Component-based modelling of PEM fuel cells with bond graphs, International Journal of Hydrogen Energy 42 (2017) 29406-29421.

[17] D.S. Falcãoa, V.B. Oliveira, C.M. Rangel, C. Pinho, A.M.F.R. Pinto, Water transport through a PEM fuel cell: A one-dimensional model with heat transfer effects, Chemical Engineering Science 64 (2009) 2216 – 2225.

[18] Jian Zhao, Adnan Ozden, Samaneh Shahgaldi, Ibrahim E.Alaefour, XianguoLi, Feridun Hamdullahpur, Effect of Pt loading and catalyst type on the pore structure of porous electrodes in polymer electrolyte membrane (PEM) fuel cells, Energy 150 (2018) 69-76.

[19] Manuel Langemann, David L. Fritz, Martin Muller, Detlef Stolten, Validation and characterization of suitable materials for bipolar plates in PEM water electrolysis, International Journal of Hydrogen Energy 40 (2015) 11385 – 11391.

[20] Qing Guo<sup>1</sup> · Fang Ye<sup>1</sup> · Hang Guo<sup>1</sup> · Chong Fang Ma<sup>1</sup>, Gas/Water and Heat Management of PEM-Based Fuel Cell and Electrolyzer Systems for Space Applications, Microgravity Science Technology 29 (2017) 49 – 63.

[21] Sigrid Lædre, Ole Edvard Kongstein, Anders Oedegaard , Havard Karoliussen , Frode Seland, Materials for Proton Exchange Membrane water electrolyzer bipolar plates, International Journal of Hydrogen Energy 42 (2017) 2713 – 2723.

[22] Nattawut Jaruwatupanta, and Yottana Khunatorna, Effects of difference flow channel designs on Proton Exchange Membrane Fuel Cell using 3-D Model, Energy procedia 9 (2011) 326 – 337.

[23] Frano Barbir, PEM fuel cells. Theory and Practice, Elsevier Academic Press, First edition, United States of America (2005).

[24] Colleen Spiegel, PEM fuel cell. Modeling and simulation using matlab, First edition, Academic Press, United State of America (2008).

[25] D.S. Falcão, C. Pinho, A.M.F.R. Pinto\*, Water management in PEMFC: 1-D model simulations, Ciência & Tecnologia dos Materiais 28 (2016) 81 – 87.

[26] N.Rajasekar, BasilJacob, KarthikBalasubramanian, K.Priya, K.Sangeetha, T.Sudhakar Babu, Comparative study of PEM fuel cell parameter extraction using Genetic Algorithm, Ain Shams Engineering Journal 6 (2015) 1187– 1194.

[27] Amos Gilat, Matlab Una introducción con ejemplos prácticos, (2006).

[28] L. Silva Bijit, Algoritmos heurísticos, capítulo 25, <http://www2.elo.utfsm.cl/~lsb/pascal/clases/cap25.pdf>, (2003).

[29] Jhon Jairo Santa Chávez , César Augusto Peñuela Meneses, Mauricio Granada Echeverry, Algoritmo de recocido simulado aplicado al problema de secuenciamiento regular, (2014).

[30] Marco Antonio Cruz-Chávez , Sergio A. Serna-Barquera , Jazmín Juárez-Chávez , R.J. Romero , Martín H. Cruz-Rosales , Bernardo Campillo-Illanes, Optimization-heuristic of mechanical properties of acicular ferrite Steel, Material Science and engineering 721 (2018) 65–73.

[31] C.D. Sandoval, X. Galindo, R.E. salas, Herramienta software para resolver procesos de decisión de Markov utilizando recocido simulado, Memorias de la Décima Quinta Conferencia Iberoamericana en Sistemas, Cibernética e Informática (CISCI 2016).

[32] Jon P. Owejana , Jeffrey J. Gagliardo , Jacqueline M. Sergib , Satish G. Kandlikarb , Thomas A. Trabold, Water management studies in PEM fuel cells, Part I: Fuel cell design and in situ water distributions, International Journal of Hydrogen Energy 34 (2009) 3436 – 3444.

[33] D.S. Falcão , C.M. Rangel , C.Pinho , A.M.F.R. Pinto, Water Management in PEMFC, Ciência & Tecnologia dos Materiais 2 (2016) 81-87.

[34] Larminie J, Dicks A, Fuel cell systems explained, John Wiley & Sons, LTD (2000), United kingdom.

[35] I. Pilatowsky · R.J. Romero · C.A. Isaza S.A. Gamboa · P.J. Sebastian · W. Rivera, Cogeneration Fuel Cell-Sorption Air Conditioning Systems, Green Energy and Technology (2011).

[36] Yong-Song Chena, Huei Peng, Predicting current density distribution of proton exchange membrane fuel cells with different flow field designs, Journal of power sources 196 (2011) 1992 – 2004.

[37] Qun Niu, Letian Zhang, Kang Li, A biogeography-based optimization algorithm with mutation strategies for model parameter estimation of solar and fuel cells, Energy Conversion and Management 86 (2014) 1173–1185.

[38] Yong-Song Chen, Huei Peng, A segmented model for studying water transport in a PEMFC, Journal of power Sources 185 (2008) 1179 –1192.

[39] Bo Han , Jingke Mo, Zhenye Kang, Gaoqiang Yang, William Barnhill, Feng-Yuan Zhang, Modeling of two-phase transport in proton exchange membrane electrolyzer cells for hydrogen energy, International Journal of Hydrogen Energy 42 (2017) 4478 – 4489.

[40] E.V. Cuevas, J.V. Osuna, D.A. Oliva, M.A.Diaz, Optimización Algoritmos programados con Matlab, Alfaomega Colombiana, Primera edición (2016), Colombia.

[41] J. Martínez, A. Fernández, P. Osnaya, Cambio climático: una visión desde México, primera edición, Instituto Nacional de Ecología, México (2004).

[42] <http://electrical-support.com/tag/energia-eolica/>

[43] S. Shimpalee, S. Greenway, J.W. Van Zee, The impact of channel path length on PEMFC flow-field design, Journal of Power Sources (2006).

[44] E. Flores, Estado actual del hidrógeno aplicado a celdas de combustible, Universidad Nacional Autónoma de México, (2016).

**ÁPENDICE A**

```
#include <iostream>
#include <time.h>
#include <stdlib.h>
#include <cmath>
#include <stdio.h>
#include <string.h>
```

```
using namespace std;
```

```
struct config{
double alpha=0;
double FO=0;
double Er=0;
double T=0;
}mejor,vecino;
```

```
double Evaluar_funcion( double alpha, double Er, double T)
{
```

```
const double R=8.314;
const double F=96485;
const double i0=0.000003;
const double Ri=0.15;
const double i=1.59;
const double n=2;
const double il=1.6;
const double iloss=0.002;
```

```

//double prueba= Er-(((R*T)/(alpha*F))*log((1.1)/i0))-(1.1*(Ri))-
(((R*T)/(n*F))*log(il/(il-1.1)));
//cout <<"prueba: " << prueba <<endl;
return Er-(((R*T)/(alpha*F))*log((i-iloss)/i0))-(i*Ri)-(((R*T)/(n*F))*log((il)/(il-
i)));
//return Er-((R*T)/(alpha*F))*log((i)/i0)-i*(Ri)-0.0003*exp(i/0.125);
// return Er-(((R*T)/(alpha*F))*log((i)/i0))-(i*Ri)-(0.00003*(pow(e,i/0.125)));
}

```

```

int main(int argc, char **argv)
{

```

```

    double Er=1.167;
    double T=373.15;
    double alpha=0.5;
    double TR=100;
double solucion_actual=0;
double solucion_vecina=0;
double P_aceptacion=0;

```

```

int contador_solucion_vecina_mejor=0;
int contador_aceptacion=0;
int contador_no_aceptacion=0;
int contador_ejecuciones=0;
double mejor_voltaje= -100;
double mejor_alpha=0;
double mejor_Ri=0;
double mejor_Er=0;
double mejor_T=0;
double i=0;
double r=0;

```

```

srand(time(NULL));

```

```

mejor.Er=1.167;
mejor.T=373.15;
mejor.alpha=0.5;
mejor.FO=Evaluar_funcion( mejor.alpha, mejor.Er, mejor.T);

solucion_actual=mejor.FO;

for (TR=1000; TR>=1; TR--)
{
T=(double)rand()/RAND_MAX*75+298.15;
// cout <<"T: " << T <<endl;

if(T>=298.15 && T<=309.75)
Er=1.230;

if(T>309.75 && T<=321.35)
Er=1.220;

if(T>321.35 && T<=332.95)
Er=1.210;

if(T>332.95 && T<=333.15)
Er=1.200;

if(T>333.15 && T<=334.40)
Er=1.199;

if(T>334.40 && T<=335.65)
Er=1.198;

if(T>335.65 && T<=336.90)
Er=1.197;

if(T>336.90 && T<=338.15)

```

Er=1.196;

if(T>338.15 && T<=339.40)

Er=1.195;

if(T>339.40 && T<=340.65)

Er=1.194;

if(T>340.65 && T<=341.90)

Er=1.193;

if(T>341.90 && T<=343.15)

Er=1.192;

if(T>343.15 && T<=344.40)

Er=1.191;

if(T>344.40 && T<=345.65)

Er=1.190;

if(T>345.65 && T<=346.90)

Er=1.189;

if(T>346.90 && T<=348.15)

Er=1.188;

if(T>348.15 && T<=349.40)

Er=1.187;

if(T>349.40 && T<=340.65)

Er=1.186;

if(T>340.65 && T<=341.90)

Er=1.185;

if(T>341.90 && T<=353.15)

```
Er=1.184;

if(T>353.15 && T<=355.15)
Er=1.183;

if(T>355.15 && T<=357.15)
Er=1.182;

if(T>357.15 && T<=359.15)
Er=1.181;

if(T>359.15 && T<=361.15)
Er=1.180;

if(T>361.15 && T<=363.15)
Er=1.179;

if(T>363.15 && T<=365.15)
Er=1.178;

if(T>365.15 && T<=367.15)
Er=1.177;

if(T>367.15 && T<=369.15)
Er=1.176;

if(T>369.15 && T<=371.15)
Er=1.175;

if(T>371.15 && T<=373.15)
Er=1.167;

//cout <<"ER: " << Er <<endl;

    alpha=(double)rand()/RAND_MAX*1.0+0.5;
//cout <<"alpha: " << alpha <<endl;
```

```

//i=(double)rand()/RAND_MAX*1.59+0.01;
//cout <<"i: " << i <<endl;

vecino.Er=Er;
vecino.T=T;
vecino.alpha=alpha;
vecino.FO=Evaluar_funcion( vecino.alpha, vecino.Er, vecino.T);

solucion_vecina=vecino.FO;

if(solucion_actual<=solucion_vecina)
{

    mejor.Er=vecino.Er;
    mejor.T=vecino.T;
    mejor.alpha=vecino.alpha;
    mejor.FO=vecino.FO;
    solucion_actual=solucion_vecina;
    contador_solucion_vecina_mejor++;
}

    if(solucion_actual>solucion_vecina)
    {
        r=(double)rand()/RAND_MAX*1.71828+1.0;
        // cout<< r << endl;
        P_aceptacion=exp(solucion_actual-solucion_vecina/TR);

        if(P_aceptacion<r)
        {

            mejor.Er=vecino.Er;
            mejor.T=vecino.T;
            mejor.alpha=alpha;

```

```

mejor.FO=vecino.FO;
        solucion_actual=solucion_vecina;
        contador_aceptacion++;
    }
    else
    {
        contador_no_aceptacion++;
    }
}

contador_ejecuciones++;

if(solucion_vecina>mejor_voltaje)
{

mejor_voltaje=solucion_vecina;
mejor_Er=Er;
mejor_T=T;
mejor_alpha=alpha;

}

}

for( i=0.01; i<1.6; i+=0.01)
{
    double    graficar= mejor_Er-
    (((8.314*mejor_T)/(mejor_alpha*96485))*log((i-0.002)/0.000003))-i*(0.15))-
    (((8.314*mejor_T)/(2*96485))*log(1.6/(1.6-i)));
    //double    graficar=mejor_Er-
    ((8.314*mejor_T)/(mejor_alpha*96485))*log((i)/0.000003)-i*(0.15)-
    0.0003*exp(i/0.125);
    cout<<"i: "<<i<<"="<<graficar<<endl;
    cout<< "Potencia: "<<i*graficar<<endl;
}

```

```
}
```

```
cout <<"Programa ejecutado con: "<< contador_ejecuciones << "  
combinaciones"<<endl;
```

```
cout <<"Mejor voltaje: "<< mejor_voltaje << endl;
```

```
cout <<"Mejor voltaje teorico ideal: "<<mejor_Er << endl;
```

```
cout <<"Mejor temperatura: "<<mejor_T << endl;
```

```
cout <<"Mejor alpha: "<<mejor_alpha << endl;
```

```
cout <<"Numero de soluciones vecinas mejores que la solucion actual:" <<  
contador_solucion_vecina_mejor << endl;
```

```
cout <<"Numero de veces que acepto una solucion vecina peor que la  
solucion actual:"<< contador_aceptacion << endl;
```

```
cout <<"Numero de veces que no acepto una solucion vecina peor que la  
solucion actual:" << contador_no_aceptacion << endl;
```

```
return 0; }
```

ANEXO





The Organizing Committee  
Acknowledges the Participation of

**Edumis Viera Martin**

in the XXVII International Materials Research Congress

Claudia Gutiérrez-Wing  
**President (2017-2018)**



Sociedad Mexicana  
de Materiales A.C.





Sociedad Mexicana  
de Materiales A.C.

---

August 2018

**TO WHOM IT MAY CONCERN**  
P r e s e n t

This is to certify that *Edumis Viera Martin* presented the contribution: **APPLICATION OF AN HEURISTIC METHOD FOR THE OPTIMIZATION OF PEM FUEL CELLS** as **Oral** modality, in the Electrochemical Energy Storage and Generation: Batteries, Supercapacitors and Fuel Cells Symposium at the XXVII International Materials Research Congress held in Cancun, Mexico from August 19th to 24th, 2018.

Sincerely,



Sociedad Mexicana  
de Materiales A.C.

*Claudia Gutiérrez-Wing*  
President





XVIII International Congress  
of the Mexican Hydrogen Society



## Simulated annealing optimization heuristic algorithm for modelling PEM fuel cell)

Edumis Viera<sup>1</sup>, Martin G. Martínez<sup>2</sup>, Alina Martínez<sup>3</sup>, Sergio Serna<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>CIICAP-UAEM, Cuernavaca, Morelos México, Av. Universidad 1001, C.P62209

<sup>2</sup>FC-UAEM, Cuernavaca, Morelos México, Av. Universidad 1001, C.P62209

<sup>3</sup> Cuernavaca, Morelos México, Av. Universidad 1001, C.P62209

\* Corresponding author: 5555-3297039 e-mail: aserna@uaem.mx

### ABSTRACT

The oil and natural gas reserves continue to decrease and due global warming the hydrogen economy seems to be an alternative solution to this problematic energy condition. Fuel cells are the key support of the hydrogen economy as they deliver clean and sustainable energy maintaining a healthy environment. Polymer electrolyte membrane (PEM) offers relatively high efficiency and power density as the main candidate to replace the internal combustion engine in transportation applications. Even though PEM fuel cells have an excellent potential to meet the economic and technical targets, considerable challenges are still facing the PEM industry an optimization of PEM fuel cells parameters is clearly necessary for making this technology competitive among others.

As an open and demanding problem, accurate modeling of polarization curve in PEM fuel cell has become the main issue of various researches. In recent years, because of their great potentials, metaheuristic optimization algorithms have represented good performances in identification of the unknown parameters of the proton exchange membrane fuel cell model, but there is the possibility to obtain more accurate results with more capable algorithms.

In the literature, many heuristic optimization algorithms have been developed based on natural phenomena. However, there are still some possibilities to devise new ones. In this paper, simulated annealing has been regarded, and the intelligent behavior to avoid local solutions and to achieve global solutions. Moreover, in this paper, the whole unknown parameters of the model, even dimensional parameters, are included in the identification process. The proposed algorithm is used to optimize an already constructed PEM fuel cell. Simulation results reveal the superior performance of optimized PEM fuel cell.

**Keywords:** PEM fuel cell, heuristic, simulated annealing, modelling.

September 18th to 21st, 2018 in Mexico City, Mexico.



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL  
ESTADO DE MORELOS



Instituto de  
Investigación en  
Ciencias  
Básicas y  
Aplicadas

INSTITUTO DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y APLICADAS

Jefatura de Posgrado en Ingeniería y Ciencias Aplicadas



ASUNTO: APROBACIÓN DE TESIS

Cuernavaca, Morelos, 13 de noviembre de 2018

**EDUMIS VIERA MARTIN**

**PRESENTE**

Por este conducto le notifico que su tesis de Maestría titulada, "Optimización de celdas de combustibles de tipo PEM aplicando algoritmo de recocido simulado"

Fue aprobada en su totalidad por el jurado revisor y examinador integrado por los ciudadanos:

NOMBRE	FIRMA
DR. ROSENBERG JAVIER ROMERO DOMÍNGUEZ	
DRA. ALINA MARTÍNEZ OROPEZA	
DR. ARTURO MOLINA OCAMPO	
DR. MARTÍN GERARDO MARTÍNEZ RANGEL	
DR. SERGIO ALONSO SERNA BARQUERA	

Por consiguiente, se autoriza a editar la presentación definitiva de su trabajo de investigación para culminar en la defensa oral del mismo.

Sin otro particular aprovecho la ocasión para enviarle un cordial saludo.

ATENTAMENTE

**Por una humanidad culta**  
*Una universidad de excelencia*

**DR. ROSENBERG JAVIER ROMERO DOMÍNGUEZ**  
COORDINADOR DEL POSGRADO  
EN INGENIERÍA Y CIENCIAS APLICADAS



RJRDRSU/nmc

Av. Universidad 1001 Col. Chamilpa, Cuernavaca Morelos, México, 62209  
Tel. (777) 329 70 00, ext. 6208 / raquel.sotelo@uaem.mx

**UA  
EM**

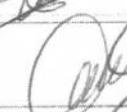
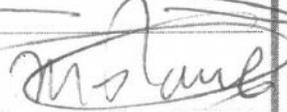
*Una universidad de excelencia*

RECTORÍA  
2017-2023

Cuernavaca, Morelos, a 13 de noviembre de 2018.

**DR. ROSENBERG JAVIER ROMERO DOMÍNGUEZ**  
**COORDINADOR DEL POSGRADO**  
**EN INGENIERÍA Y CIENCIAS APLICADAS**  
**P R E S E N T E**

Atendiendo a la solicitud para emitir DICTAMEN sobre la revisión de la TESIS titulada "Optimización de celdas de combustibles de tipo PEM aplicando algoritmo de recocido simulado" que presenta la alumna **EDUMIS VIERA MARTIN**, para obtener el título de **MAESTRÍA EN INGENIERÍA Y CIENCIAS APLICADAS**. Nos permitimos informarle que nuestro voto es:

NOMBRE	DICTAMEN	FIRMA
DR. ROSENBERG JAVIER ROMERO DOMÍNGUEZ	Aprobado	
DRA. ALINA MARTÍNEZ OROPEZA	Aprobado	
DR. ARTURO MOLINA OCAMPO	Aprobado	
DR. MARTÍN GERARDO MARTÍNEZ RANGEL	Aprobado	
DR. SERGIO ALONSO SERNA BARQUERA	APROBADO	

**PLAZO PARA LA REVISIÓN 20 DÍAS HÁBILES (A PARTIR DE LA FECHA DE RECEPCIÓN DEL DOCUMENTO)**

**NOTA. POR CUESTION DE REGLAMENTACIÓN LE SOLICITAMOS NO EXCEDER EL PLAZO SEÑALADO, DE LO CONTRARIO LE AGRADECEMOS SU ATENCIÓN Y NUESTRA INVITACIÓN SERÁ CANCELADA.**

RJR\*RSU/nmc