



UNIVERSIDAD DE CHILE
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA,
BIOTECNOLOGÍA Y MATERIALES

ESTUDIO COMPARATIVO DE BATERÍAS DE ION LITIO Y CELDAS DE
COMBUSTIBLE REGENERATIVAS COMO SISTEMAS DE ALMACENAMIENTO DE
ENERGÍA ELÉCTRICA EN UNA PLANTA FOTOVOLTAICA DEL NORTE DE CHILE

MEMORIA PARA OPTAR AL TÍTULO DE INGENIERO CIVIL QUÍMICO

CLAUDIO DAVID TORREALBA ORELLANA

PROFESORA GUÍA:
MELANIE COLET LAGRILLE

MIEMBROS DE LA COMISIÓN:
FRANCISCO GRACIA CAROCA
TOMÁS VARGAS VALERO

SANTIAGO DE CHILE
JULIO 2020

RESUMEN DE LA MEMORIA
PARA OPTAR AL TÍTULO DE
INGENIERO CIVIL QUÍMICO
POR: CLAUDIO DAVID TORREALBA ORELLANA
FECHA: JULIO 2020
PROF. GUÍA: MELANIE COLET LAGRILLE

ESTUDIO COMPARATIVO DE BATERÍAS DE ION LITIO Y CELDAS DE COMBUSTIBLE REGENERATIVAS COMO SISTEMAS DE ALMACENAMIENTO DE ENERGÍA ELÉCTRICA EN UNA PLANTA FOTOVOLTAICA DEL NORTE DE CHILE

El suministro de energía eléctrica a una comunidad debe ser entregado de manera continua y segura, por lo que para incorporar fuentes de energía libres de carbono como la solar es necesario contar con una infraestructura de almacenamiento, considerando su intermitencia durante el día y estacionalidad.

El presente estudio propuso dos alternativas de sistemas de almacenamiento: un sistema de baterías de ion-litio (BAT) y un sistema regenerativo de celdas de combustible (RHFC) compuesto por un electrolizador alcalino, tanques para gas y celdas de combustible ya sea de membrana de intercambio protónico (PEMFC) o de óxido sólido (SOFC). El RHFC con SOFC puede configurarse acoplado a un ciclo de Rankine (SOFC+R) o realizando integración energética (SOFC+Int) entre sus corrientes. Se tomó como base una planta fotovoltaica que hace llegar 60 MW a la planta de almacenamiento. De los balances de masa y energía se obtuvo que se requerirían 106.800 baterías ordenadas en 36 *strings* con 4.919 celdas cada uno. Por su parte, el RHFC debería contar con 90.050 electrolizadores y 49.670 SOFC ó 111.180.960 PEMFC. Este número de equipos está influenciado por la energía de entrada del sistema y para el caso de la PEMFC, se debe a su densidad de corriente de 4,7 A m⁻².

Se utilizaron 2 parámetros para evaluar el desempeño técnico de los sistemas. La eficiencia η se define como la razón entre la energía generada por un equipo y la energía alimentada a éste en un ciclo de carga. Y la energía de retorno (ESOI) se define como la razón entre energía total que un sistema devuelve a la red y la energía necesaria para fabricarlo. Los resultados para cada sistema son: (i) BAT 96 % y 33,9; (ii) SOFC+R 10,25 % y 30,6; (iii) SOFC+Int 9,77 % y 28,5; y (iv) PEMFC 9,72 % y 8. $\eta_{RHFC} < \eta_{Bat}$ se debe a las pérdidas que produce tener diversos equipos en el sistema RHFC. $ESOI_{BAT} > ESOI_{RHFC}$ se debe a que los materiales de las baterías tienen menor gasto energético al producirse que los materiales de las RHFC.

Se definió como parámetro económico a los costos de capital que corresponde al costo inicial que se debe invertir en un proyecto. Los resultados para cada sistema, en pesos chilenos, son: BAT 670 mil millones, SOFC+R de 360 mil millones, SOFC+Int de 359 mil millones y PEM de 463 mil millones. El sistema BAT es el más caro por ser 106.800 unidades. Las PEMFC son el RHFC más caro porque cada celda es más cara que una SOFC.

Priorizando que el abastecimiento sea el máximo posible y con ello que se logre descarbonizar la matriz, se eligió el sistema con mayor η : baterías. Esta decisión puede modificarse al complementar el estudio los costos de operación y flujo de caja de cada sistema y haciendo mejoras en el modelo cinético de la PEMFC.

Agradecimientos

Primero a mí, por lograrlo, incluso cuando muchas veces lo sentía tan lejano. Por la constancia, por la reinversión, por no tener vergüenza en pedir ayuda, por intentarlo siempre, por sacar ganas de la desmotivación y por siempre tratar de dar lo mejor. Este es mi mejor reconocimiento y de los mayores logros. Que seco Claudio! Siempre recuerda eso!

El más especial agradecimiento a mi familia nuclear: mis papás y mi hermano. Por acompañarme, tenerme paciencia, entender mis tiempos, no presionarme y hacerme la vida más fácil. Y por sobretodo por forjarme, educarme y entregarme valores que me permiten ser quién soy hoy. Al resto de mi familia. Por entretenerme, respetar y alentar mi proceso.

A mis amigos de la carrera. Por enseñarme a estudiar, enseñarme a buscar información, enseñarme sobre orden y disciplina.

Al Grupo de Ingeniería Electroquímica, por ayudarme con mis dudas, por ayudarme a mejorar mi trabajo y por compartir conocimiento conmigo.

Especiales agradecimientos a Constanza Escobar, Camila Viveros, Felipe Rojas, Osvaldo Villagrán y Guillermo Valenzuela por darse el tiempo y la disponibilidad generosa y absoluta de ayudarme a mejorar esta tesis.

A Francisco Henríquez que me enseñó, revisó y orientó el trabajo como nadie lo habría hecho y sin cuya ayuda no habría podido llegar al final.

A Alonso Sepúlveda, Felipe Murillo, Eduardo Bahamondes, Javiera Rojas, Vicente Morales, Pablo Lizama y Carolina Pérez, por el darse el generoso y genuino gesto de darse el trabajo de leer este trabajo y proponerle mejoras.

A Matías Tapia, por su eterna, indiscutible y generosísima disposición a ayudarme. Y sobre todo, por creer en mí, por permitirme crecer como persona, como ingeniero y como habitante de este planeta. Gracias por permitirme participar de los cursos, crear nuevos y abrirme el espacio para cuestionarme todo lo que conozco.

A mi profesora guía, Melanie Colet, por ayudarme a resolver todas mis dudas, por simplificarme la vida, por haberme tenido paciencia y por haberme entregado tanto conocimiento.

Y finalmente a mis amigas y amigos Gabriel Aguayo, Catalina Pinto, Matías Pantoja,

Diego Bravo, Daniela Gormaz, Camila Viveros, Vanessa Vargas, Fernanda Atala, Franco Lizama, Vicente Morales, Carolina Pérez, Camila Meza y en fin, muchos otros que tengo guardados en el corazón, por su cariño, compañía y tiempo para compartir conmigo, para hacer mi vida más simple, entretenida y abordable.

Tabla de contenido

Índice de tablas	vi
Índice de figuras	x
1. Introducción	1
1.1. Matriz Energética en Chile	1
1.2. Antecedentes	4
1.2.1. Recurso solar en Chile	4
1.2.2. Coordinador Eléctrico Nacional	5
1.2.3. Sistemas de Almacenamiento	6
1.3. Caso de Estudio	8
1.4. Objetivos	9
1.4.1. Objetivos generales	9
1.4.2. Objetivos específicos	9
2. Tecnologías	10
2.1. Sistema Regenerativo de Celdas de Combustible	10
2.1.1. Celdas de Combustible	10
2.1.2. Electrolizador	13
2.1.3. Estanque de almacenamiento	15
2.2. Baterías de ion-litio	17
2.2.1. Características	17
2.2.2. Desgaste	19
3. Metodología	20
3.1. Preámbulo	20
3.2. Configuración de los sistemas	21
3.2.1. Sistema SOFC+R	22
3.2.2. Sistema SOFC+Int	24
3.2.3. Sistema PEM	26
3.3. Modelamiento de los equipos electroquímicos	28
3.3.1. Celdas de Combustible	28
3.3.2. Electrolizador	40
3.3.3. Baterías de ion-litio	49
3.4. Balances de masa y energía	52
3.4.1. Sistema SOFC+R	52
3.4.2. Sistema SOFC+Int	57

3.4.3.	Sistema PEM	58
3.4.4.	Baterías de ion-litio	59
4.	Parámetros	60
4.1.	Parámetros Técnicos	60
4.1.1.	Energía de Retorno (ESOI)	60
4.1.2.	Eficiencia Energética (η)	65
4.2.	Parámetro Económico	68
4.2.1.	Costos de Inversión	68
5.	Resultados	72
5.1.	Resultados Técnicos	72
5.1.1.	RHFC	72
5.1.2.	Baterías	83
5.2.	Resultados Económicos	84
6.	Discusiones	86
6.1.	Contexto	86
6.2.	Tecnología	89
6.3.	Metodología	89
6.3.1.	Celdas y Electrolizador	91
6.3.2.	Baterías	96
6.3.3.	Balance de masa y energía	98
6.4.	Parámetros técnicos	101
6.4.1.	Resultados de parámetros técnicos	103
6.5.	Parámetro económico	107
6.5.1.	Resultados económicos	107
7.	Conclusiones	110
	Bibliografía	112
	Anexos	123
A.	Anexos	124
A.1.	Variación de la demanda energética	124
A.2.	Modelo matemático para el dimensionamiento de un sistema de almacenamiento regenerativo	125
A.2.1.	Celdas de combustible	125
A.2.2.	Electrolizador	128
A.2.3.	Configuraciones del Sistema	132
A.3.	Modelo matemático para el dimensionamiento de las baterías de ion litio	157
A.3.1.	Baterías de ion-litio	157
A.4.	Modelo matemático para deducir la $ESOI_{el}$ en un RHFC	159
A.4.1.	$ESOI_{el}$ para RHFC	159
A.5.	Costos de Inversión CAPEX	165

Índice de tablas

4.1. Resumen de términos ocupados en el cálculo de la eficiencia de los RHFC, junto con el tiempo en que opera cada equipo.	67
4.2. Estructura de costos y porcentajes escogidos para la estimación del CAPEX [64]. Estos valores se obtienen como un promedio del rango de valores que se muestra en ' <i>Plant Design and Economics for Chemical Engineers</i> ' y ajustados hasta sumar 100%.	71
5.1. Dimensiones y números de <i>stacks</i> de los equipos electroquímicos del sistema.	75
5.2. Número de tanques que son necesarios para el almacenamiento. Para las corrientes gaseosas, se utiliza como referencia la capacidad de almacenamiento de los estanques utilizados en el proyecto de almacenamiento de energía de Galicia, que es de 8,8 Nm ³ [45] y para la corriente de agua, se usa como referencia tanques de almacenamiento no aislados de 10 m ³	76
5.3. Resultados del balance de energía en el sistema con celda de óxido sólido y ciclo de Rankine acoplado.	76
5.4. Resultados del balance de masa del sistema con celda de óxido sólido y ciclo de Rankine acoplado	77
5.5. Cierre del balance de energía para el sistema con celda de óxido sólido y ciclo Rankine acoplado.	77
5.6. Resultados del balance de masa y energía en el sistema con celda de óxido sólido e integración energética.	78
5.7. Resultados del balance de masa en el sistema con celda de óxido sólido e integración energética	79
5.8. Cierre del balance de energía para el sistema con celda de óxido sólido e integración energética	79
5.9. Resultados del balance de masa y energía en el sistema con celda de intercambio protónico.	80
5.10. Resultados del balance de masa del sistema con celda de intercambio protónico	80
5.11. Cierre del balance de energía para el sistema con celda de intercambio protónico.	81
5.12. Resultados de los parámetros técnicos de los sistemas en estudio.	81
5.13. Resultados de los parámetros de operación para las baterías de ion-litio de 24V y una capacidad de 300 A-h.	83
5.14. Costo de los equipos para todos los sistemas en estudio, en moneda nacional, con valores actualizados a diciembre 2019 y considerando ajustes de tamaño y costos de transporte y de impuestos	84

5.15. Costo de los equipos para todos los sistemas en estudio, en moneda nacional, con valores actualizados a diciembre 2019 y considerando ajustes de tamaño y costos de transporte y de impuestos	85
6.1. Combinación de potencia de entrada desde la planta fotovoltaica al sistema de almacenamiento y tiempo de entrada de dicha potencia, para que el sistema de almacenamiento sea del mismo tamaño al dimensionado en este estudio (615 MW-h).	87
6.2. Comparativa entre los valores de la cinética difusional entre las PEMFC y SOFC.	96
6.3. Comparación de valores encontrados en el presente estudio y el de M. Pellow <i>et al.</i> (Energy & Environ. Sci., 2015).	105
A.1. Dimensiones físicas de las celdas de combustibles de óxido sólido y de intercambio protónico	125
A.2. Valores para el coeficiente de Difusión de Knudsen para la Celda SO, mostrado en la sección 3.3.1.3.1.	126
A.3. Valores para el coeficiente de Difusión Molecular para la Celda SO [90], mostrado en la sección 3.3.1.3.1.	126
A.4. Valores de las constante para la conductividad de cada material correspondiente a la celda SO	126
A.5. Valores utilizados para calcular el Voltaje de circuito abierto [52].	128
A.6. Valores utilizados para calcular el sobrepotencial de activación [52].	129
A.7. Condiciones de operación del sistema utilizadas para el cálculo del potencial de concentración [52].	129
A.8. Valores utilizados para calcular términos del potencial de concentración . . .	129
A.9. Resultado de términos calculados para el sobrepotencial de concentración tomando los valores de la Tabla A.8 y las Ecuaciones 3.108, 3.109, 3.110, 3.111, 3.112, 3.113 y 3.114.	130
A.10. Coeficientes de la Ecuación 3.118 [53].	130
A.11. Términos utilizados para la modelación de la resistencia del electrolito en el electrolizador alcalino	131
A.12. Términos utilizados para la modelación de la resistencia del diafragma en el electrolizador alcalino.	131
A.13. Valores finales para la resistencia óhmica.	131
A.14.	132
A.15.	133
A.16. Resumen de corrientes y expresiones en función de la corriente de H ₂ de salida del electrolizador, en el sistema SOFC+Rankine	135
A.17. Datos utilizados en los balances para el sistema de almacenamiento con celda de óxido sólido y ciclo Rankine acoplado	139
A.18. Datos termodinámicos de cada corriente en el sistema de óxido sólido y ciclo de Rankine acoplado [44].	140
A.19.	140
A.20.	142
A.21. Resumen de corrientes y expresiones en función de la corriente de H ₂ de salida del electrolizador, en el sistema SOFC+Int.	142

A.21. Resumen de corrientes y expresiones en función de la corriente de H ₂ de salida del electrolizador, en el sistema SOFC+Int.	143
A.22. Datos termodinámicos de cada corriente en el sistema de óxido sólido con integración energética [44]	149
A.23.	151
A.24.	152
A.25. Resumen de corrientes y expresiones en función de la corriente de H ₂ de salida del electrolizador, en el sistema PEM	153
A.26. Datos utilizados en los balances para el sistema de almacenamiento con celda de intercambio protónico	156
A.27. Datos termodinámicos de cada corriente en el sistema de PEM [44]	157
A.28. Valores para el sistema de baterías que fueron utilizados en la planta solar de Berlín, Alemania [93].	158
A.29. Resumen de términos que se ocupan en la ecuación del ESOfel para cada sistema involucrado en el estudio	160
A.30. Valores para el cálculo de ESOf _{el} que fueron encontrados en el estudio de M. Pellow <i>et al.</i> (Energy & Environ. Sci., 2015) [6].	161
A.31. Resumen de los datos que se utilizarán para el cálculo de la ESOf _{el} en cada sistema. Los datos operacionales se obtuvieron del balance de masa y energía descrito en el Anexo A.2.3. Los valores de intensidad energéticos mostrados están para energía eléctrica, es decir, ya fueron calculados utilizando la eficiencia de la red $\eta_{red} = 0,3$	164
A.31. Resumen de los datos que se utilizarán para el cálculo de la ESOf _{el} en cada sistema. Los datos operacionales se obtuvieron del balance de masa y energía descrito en el Anexo A.2.3. Los valores de intensidad energéticos mostrados están para energía eléctrica, es decir, ya fueron calculados utilizando la eficiencia de la red $\eta_{red} = 0,3$	165
A.32. Valores del indicador de ajuste temporal desde los años 1996 al 2019.	166
A.33. Exponentes específicos para algunos equipos, utilizados en la estimación del precio por capacidad, usando la regla de los seis décimos [64].	166
A.34. Cotizaciones de los principales equipos correspondientes a los equipos utilizados en los sistemas en estudio. La capacidad mencionada en esta tabla, hace referencia a la capacidad del equipo encontrado en la cotización, capacidad que será utilizada para la Regla de los Seis Décimos. Los precios mostrados corresponden al valor FOB.	167
A.35. Precios de los equipos más importantes para cada sistema, considerando un ajuste de precio con respecto a la capacidad, utilizando la regla de los seis décimos. Todos los valores mostrados son FOB y corresponden a valores del 2020 excepto en el caso del Electrolizador alcalino y la celda SO.	167
A.36. Precios de los equipos considerando los valores de transporte, importación e impuestos. Los precios son con fecha del 2020 excepto para el electrolizador alcalino y la celda SO.	168
A.37. Valores actualizados con fecha Diciembre de 2019. El resto de equipos, mantienen sus valores, como se muestra en la Tabla A.36	169
A.38. Precios de los equipos más importantes de cada sistema convertidos a moneda nacionalm utilización la transformación 1 USD = 774,8 CLP [117] y 1 EUR = 859,7 CLP [118] con fecha 20 de enero de 2020.	169

A.39.Estructura de costos y porcentajes para la estimación del CAPEX [64]. . . . 170

Índice de figuras

1.1.	Demanda energética en Chile en el periodo 2006-2016 en TW-h [3].	1
1.2.	Oferta energética de la matriz chilena en el periodo 2006-2016 en TW-h [4]. .	2
1.3.	Fuentes de la oferta energética de la matriz chilena [4], en %.	3
1.4.	Ingreso esperado de operación de proyectos de generación eléctrica en construcción entre 2007 y 2017 en MW [4].	3
1.5.	Total de los proyectos de generación eléctrica en construcción por tecnología en MW [4], en %.	4
1.6.	Esquema simplificado de un sistema regenerativo de celda de combustible de hidrógeno [6].	8
2.1.	Diagrama básico de una celda de combustible de hidrógeno con membrana de intercambio protónico (PEMFC) [22].	11
2.2.	Diagrama básico de una celda de combustible de óxido sólido (SOFC) usando H ₂ como combustible [27].	12
2.3.	Esquema de un electrolizador de electrolito alcalino [34].	14
2.4.	Fuentes de hidrógeno para utilización mundial en refinerías, industria química y gases industriales [33].	16
2.5.	Diagrama de la estructura básica de una batería de ion Litio, flechas según el sentido de descarga [39].	18
3.1.	Configuración del sistema de almacenamiento utilizando celda de combustible de óxido sólido, electrolizador alcalino y un ciclo de Rankine acoplado. . . .	23
3.2.	Configuración del sistema de almacenamiento utilizando celda de combustible de óxido sólido, electrolizador alcalino y un intercambio de calor entre corrientes. . . .	25
3.3.	Configuración del sistema de almacenamiento utilizando una celda de combustible con membrana de intercambio protónico y electrolizador alcalino. . . .	26
3.4.	Geometría y punto de referencia para ambos electrodos en la celda de combustible de óxido sólido.	32
3.5.	Geometría y punto de referencia para ambos electrodos en la celda de combustible con membrana intercambio protónico.	32
3.6.	Geometría y puntos de referencia para el electrolizador	43
5.1.	Curvas de operación del electrolizador alcalino que opera a 9 bar y 80°C. Este electrolizador es idéntico para los sistemas SOFC+R y SOFC+Int.	73
5.2.	Curvas de operación de la celda de combustible con membrana de intercambio protónico que opera a 1,4 bar y 80°C.	74

5.3. Curvas de operación de la celda de combustible de óxido sólido que opera a 1 bar y 800°C.	75
5.4. Comportamiento del flujo de H ₂ producido por el electrolizador y la potencia de salida por cada RHFC respecto a cambios en la densidad de corriente del electrolizador.	82
5.5. Comportamiento de las áreas del electrolizador, celda de óxido sólido y celda de intercambio protónico respecto a cambios en la densidad de corriente del electrolizador.	82
5.6. Comportamiento de Eficiencia y la ESOI respecto a cambios en la densidad de corriente del electrolizador.	83
5.7. Variación del número de baterías con respecto a cambios en la profundidad de descarga de las baterías.	84
A.1. Variación del consumo diario en la región de Coquimbo en los cambios de estación, durante el año 2018 [70].	124
A.2. Desglose de los distintos sobrepotenciales en la celda de combustible con membrana de intercambio protónico con respecto al voltaje de la celda, en función de la densidad de corriente.	127
A.3. Desglose de los distintos sobrepotenciales en la celda combustible de óxido sólido con respecto al voltaje de la celda, en función de la densidad de corriente.	128
A.4. Desglose de los distintos sobrepotenciales en el electrolizador alcalino con respecto al voltaje de la celda, en función de la densidad de corriente.	132

Capítulo 1

Introducción

1.1. Matriz Energética en Chile

Las fuentes de energía de origen fósil se están agotando a un ritmo tal que en el próximo siglo ya no quedarán fuentes disponibles de petróleo ni de gas natural [1]. Además, el 5to informe del Panel Intergubernamental para el Cambio Climático (IPCC) señala que la influencia en el cambio climático por la acción antrópica, particularmente en emisiones de Gases de Efecto Invernadero (GEI), es clara. Considerando que parte de las emisiones de GEI se han producido en el sector de energía, una de las acciones para la mitigación de los efectos del cambio climático sugeridas en este informe, corresponde a que las economías mundiales descarbonicen sus matrices energéticas [2].

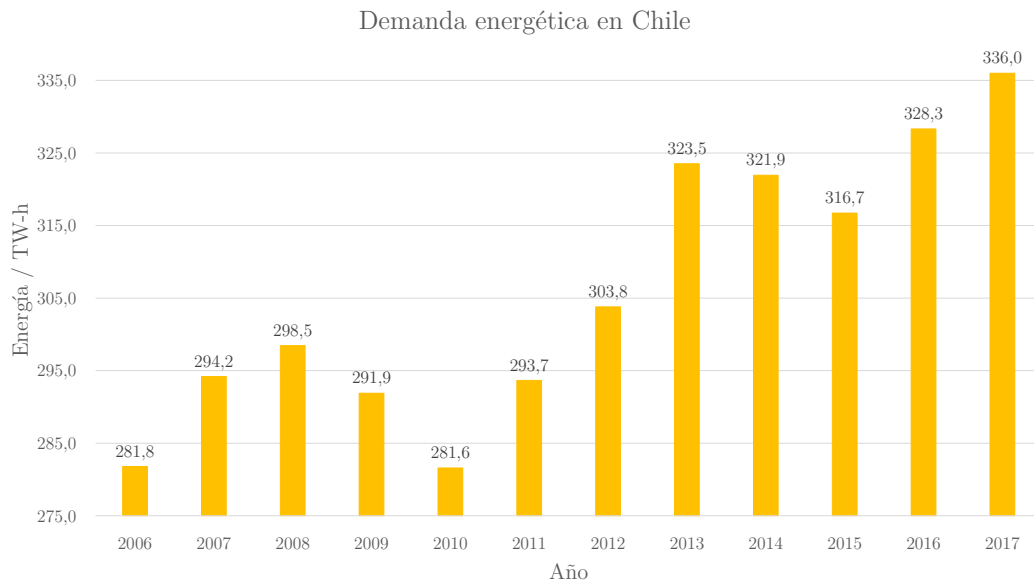


Figura 1.1: Demanda energética en Chile en el periodo 2006-2016 en TW-h [3].

La demanda energética en Chile ha ido en progresivo aumento [4]. En una década, ha

aumentado un 18 %, como se puede ver en la Figura 1.1, y se estima que este crecimiento siga aumentando.

La matriz energética chilena para el año 2017 tuvo una oferta de 391,3 TW-h [3], oferta que se mantiene al alza, como puede verse en la Figura 1.2. Las fuentes que componen ese total están señaladas en la Figura 1.3. Un 53 % de la oferta corresponde a fuentes no renovables y contaminantes: el carbón y el petróleo crudo. Y las fuentes de energía solar y eólica, corresponden a aproximadamente un 1,3 % de la matriz. Según lo señalado por el Ministerio de Energía la meta es alcanzar un 20 % de entrada de energía a la matriz usando como fuente Energías Renovables No Convencionales (ERNC) para el 2025 y que dicho aporte incremente a un 60 % para 2035 [5].

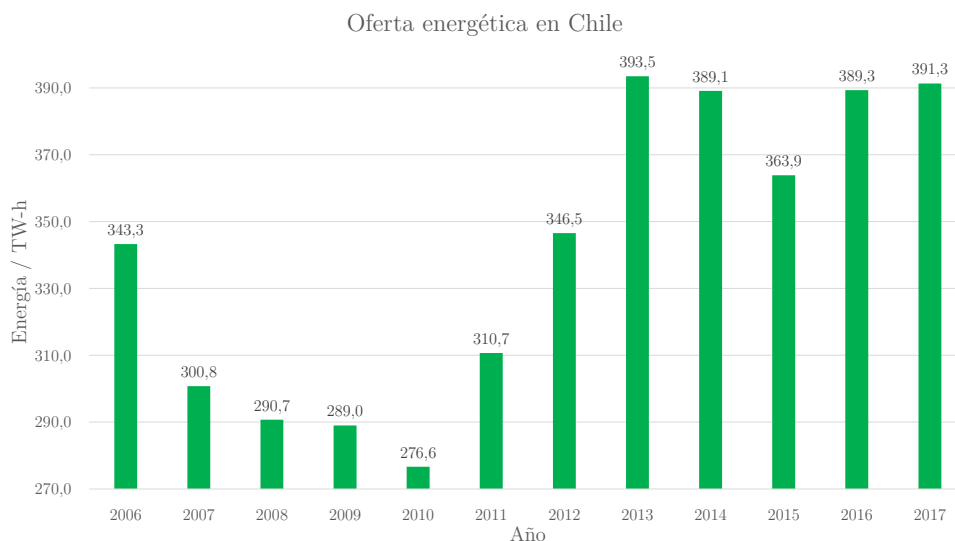


Figura 1.2: Oferta energética de la matriz chilena en el periodo 2006-2016 en TW-h [4].

Con respecto al aumento de la generación energética, el Ministerio de Energía señala que de 3.140 MW que entraron en operación el año 2017, el 51 % de esa capacidad instalada corresponde a ERNC y esa tendencia hacia capacidad en ERNC ha ido aumentando en la última década, como puede verse en la Figura 1.4 [4]. De esa capacidad instalada, se puede notar que el 25 % corresponde a energía de fuente solar para el 2017 y 39 % para el 2016, como puede verse en la Figura 1.5.

Esto justifica el interés que se ha generado en Chile por la utilización de ERNC, las cuales se consideran abundantes en el territorio nacional, sobre todo la energía solar, por tener el desierto más árido y por lo tanto más despejado del mundo [4]. Sin embargo, la energía solar tiene una limitación para ser integrada a los sistemas de transmisión eléctrica, la cual corresponde a su intermitencia de producción. La radiación solar recibida está sujeta a variaciones astronómicas y climáticas. Es decir, la producción de este tipo de energía puede reducirse si hay nubosidad que cubra el cielo o ser incluso nula, cuando es de noche. Por otro lado, existe un desfase entre el pico de generación y el pico de consumo [6]. Esto quiere decir que, el momento del día de máxima producción de la energía no ocurre simultáneamente con el momento en que es máximo su consumo, para más detalle revisar Anexo A.1.

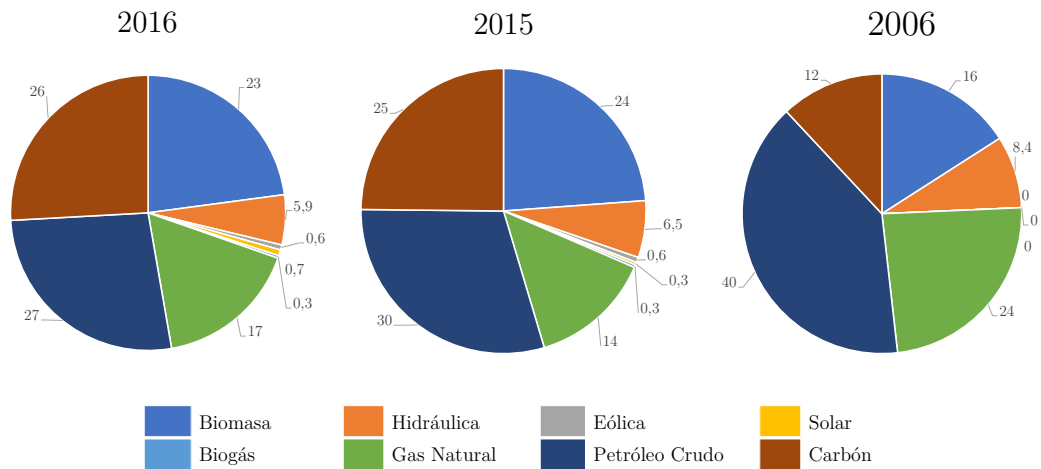


Figura 1.3: Fuentes de la oferta energética de la matriz chilena [4], en %.

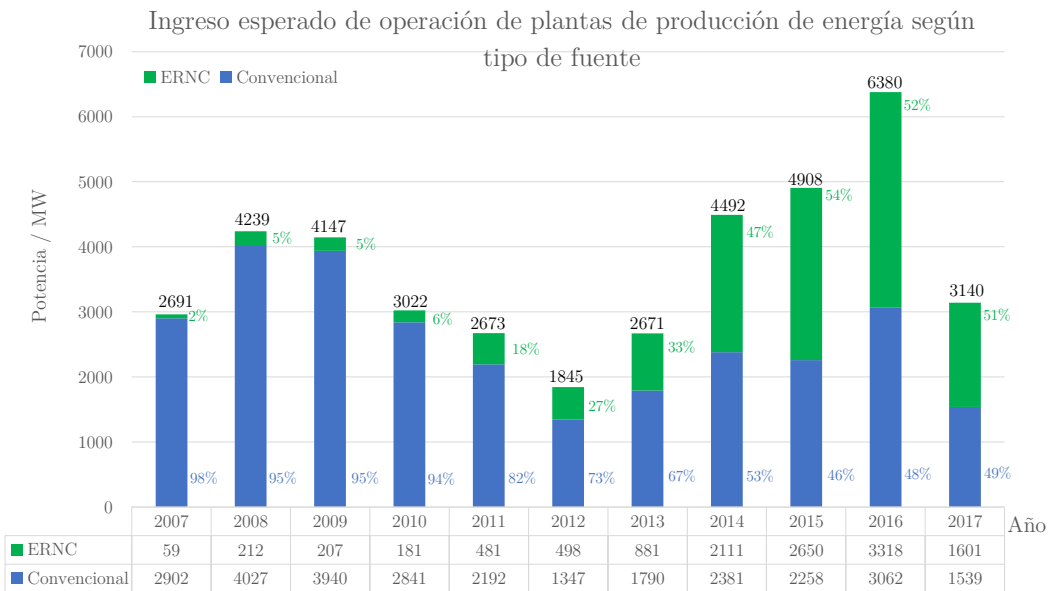


Figura 1.4: Ingreso esperado de operación de proyectos de generación eléctrica en construcción entre 2007 y 2017 en MW [4].

La intermitencia genera un problema operativo, pues el usuario desearía usar la energía en cualquier momento del día, independiente de si se está produciendo o no. Entonces resulta necesario encontrar una solución para poder almacenar la energía eléctrica desde fuente solar (PV¹, por su sigla en inglés), que se produzca de día y almacenarla para abastecer durante la noche. Es decir, es necesario crear una infraestructura de almacenamiento de energía solar, para tener abastecimiento de manera continua. En el año 2016, el Sistema Interconectado del Norte Grande (SING), se vio forzado a desperdiciar el excedente de energía solar que se

¹Photovoltaic. Se usa esta sigla para referirse a la producción de energía eléctrica usando paneles solares fotovoltaicos

Total de los proyectos de generación, por tecnología

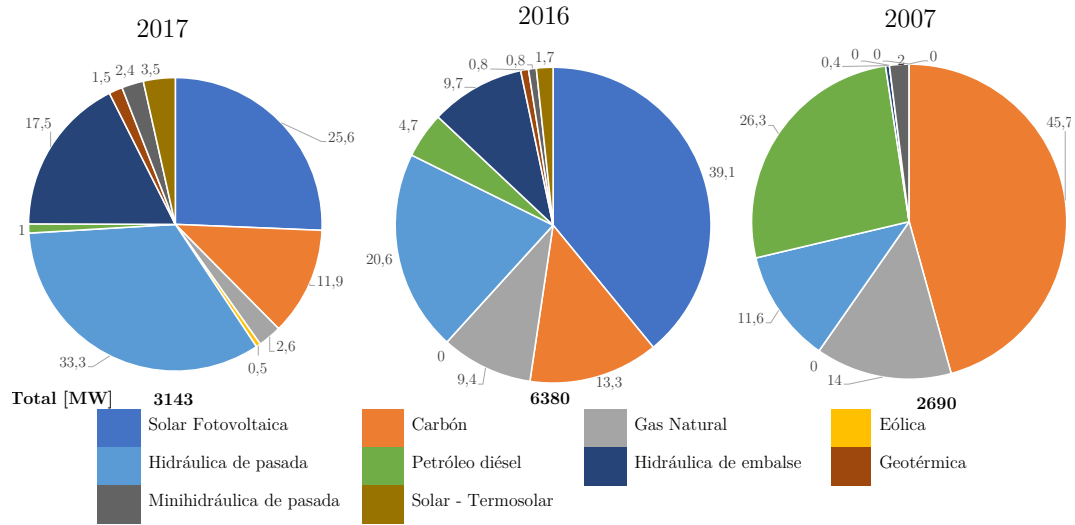


Figura 1.5: Total de los proyectos de generación eléctrica en construcción por tecnología en MW [4], en %.

produjo, por falta de infraestructura para almacenarla o distribuirla [7], [8].

Es por lo anterior que se hace necesaria una infraestructura de almacenamiento de energía, la cual le permita al sistema abastecer de manera continua y segura y así optimizar el uso del recurso energético en cuestión [8].

El propósito de este estudio es comparar técnica y económicamente dos sistemas de almacenamiento de energía, las baterías de ion litio y los sistemas regenerativos de celdas de combustible, para determinar cuál tecnología es más adecuada para el caso de una planta de producción de energía eléctrica desde la fuente solar.

1.2. Antecedentes

1.2.1. Recurso solar en Chile

Chile posee uno de los potenciales solares más altos del mundo, ya que, el desierto de Atacama en el norte del país, representa una de las zonas de mayor irradiación solar del planeta [9].

Para entender la radiación, se enumeran los factores principales que inciden en la cantidad de energía solar que se recibe en la superficie terrestre [10]:

- La latitud donde se esté ubicado, pues esto determina la inclinación con la que llegan los rayos desde el Sol. En los polos, los rayos llegan inclinados, en circunstancias que cerca del Ecuador, los rayos llegan perpendiculares. Así la cantidad de energía por unidad de área es mayor en las latitudes cercanas al Ecuador.

- La estación del año. En la época de invierno de un hemisferio, dicho hemisferio presenta la inclinación terrestre en la que se recibe menor energía por unidad de área. De este modo, durante la época de verano se recibirá más energía por unidad de área que en la temporada de invierno. Además que, durante el verano las horas de luz son mayores que en el invierno, por lo que al mismo tiempo que se recibe más energía, también se recibe por más horas.
- Las condiciones climáticas. Los días despejados, son los que poseen mayor radiación. En contraposición, las nubes difuminan la radiación incidente desde el Sol. Si bien, un panel recibirá radiación un día nublado, ésta se denomina ‘difusa’. La radiación difusa corresponde a radiación que proviene de distintas direcciones de la bóveda celeste, producto de reflexiones de los rayos de luz. Lo deseable es que la radiación que reciba un panel sea la radiación directa, es decir, la que incide en línea recta desde el Sol, pues ésta maximiza la energía que se puede aprovechar. Esto ocurre dado que al ocurrir reflexiones en distintas direcciones, hay parte de la energía que se pierde hacia fuera de la bóveda celeste.

Mediciones del *World Radiation Data Centre*, señalan que las ciudades del norte de Chile poseen los cielos más limpios y despejados de América Latina. Se señala además, que incluso una ciudad con contaminación como Santiago posee mayores índices de radiación [11] que la localidad con mayor radiación de Europa, que corresponde a Almería, España [12].

Reportes del Ministerio de Energía, señalan que la producción de energía de fuente solar ha aumentado de un 1 % en 2012 al 21 % el 2016. Esto significa que, existe un aumento en el interés por este tipo de energía [4]. Además, de los 6.186 GW-h que se produjeron en octubre de 2016 en Chile, 420 GW-h provenían de energía solar [13], que corresponden al 6,7 % de la generación de ese mes.

1.2.2. Coordinador Eléctrico Nacional

El Coordinador Eléctrico Nacional (CEN) nace el año 2017, en el momento en que el Sistema Interconectado del Norte Grande se une con el Sistema Interconectado Central. Es corporación autónoma de derecho público, sin fines de lucro, con patrimonio propio y de duración indefinida. La organización, composición, funciones y atribuciones se rigen según lo establecido en la Ley N° 20.936 y su Reglamento [14].

El CEN se encarga de la coordinación de la operación de las plantas productivas de energías del Sistema Eléctrico Nacional que están en la red interconectadas. Por ello, el CEN busca preservar el suministro eléctrico con la seguridad requerida, de la manera más económica posible [14]. En otras palabras, el CEN se encarga de asegurar que en conjunto, las plantas productoras de energía, generen la energía necesaria para el consumo, que el sistema opere con un suministro continuo y cuya producción sea al mínimo costo.

El CEN coordina la operación de 546 centrales generadoras y 1.071 subestaciones, las cuales son operadas por 596 empresas repartidas de la región de Arica y Parinacota hasta la región de Los Lagos. Las centrales están compuestas de la siguiente forma [15]:

- 162 centrales hidroeléctricas con un total de 6.824,53MW
- 185 centrales termoeléctricas con un total de 13.376,10MW
- 36 centrales eólicas con un total de 2.157,16MW
- 180 centrales solares con un total de 2.750,50MW
- 1 central geotérmica de 44,91MW

El hecho de que exista un ente que coordine actualmente a todas las centrales tiene como propósito resolver contingencias como los cortes o las intermitencias de producción. Esto último se refiere a lo que ocurre con las ERNC como la energía eólica y solar, donde por ejemplo, la energía solar no genera energía durante la noche. Para suplir ese cese de producción, el CEN se encarga de aumentar la producción de otras plantas que sí pueden producir de noche, para asegurar el suministro y que éste sea al menor costo posible. Además, el sistema energético no cuenta con infraestructura de almacenamiento en red [16], por lo que hacer una transición hacia energías libres de carbono, no es factible en el corto plazo. Debido a esto, resulta relevante estudiar los sistemas de almacenamiento como parte fundamental del sistema energético nacional.

1.2.3. Sistemas de Almacenamiento

Existen diversos sistemas de almacenamiento de la energía excedente que se produce en un sistema. En este estudio, se abordarán en particular: baterías de ion litio y sistema regenerativo de celdas de combustible de hidrógeno.

1.2.3.1. Baterías de ion-litio

Un sistema de almacenamiento basado en baterías consiste en un conjunto de celdas electroquímicas conectadas entre sí, en las cuales se almacena energía en forma de especies químicas. La energía posteriormente es entregada al sistema que lo quiera al transformarla electroquímicamente la especie en otra. En ese proceso, se libera corriente que es aprovechada por un sistema externo [17].

El voltaje y la corriente del sistema de baterías se obtienen al conectar dichas baterías en serie y en paralelo en distintas combinaciones. Un sistema de baterías también considera otro tipo de equipos como los conectores, controladores, equipos eléctricos para conexión con los sistemas de transmisión de alta tensión, controladores térmicos. Sin embargo para este estudio, solo serán considerados las baterías [17].

Los tipos de baterías se diferencian principalmente en la especie química que se transporta por el sistema para almacenarse. Existen de plomo-ácido, de sulfuro de sodio, de ion-litio, entre otras. Este estudio se centrará en este último tipo de baterías [17].

Las baterías de ion-litio constan de un cátodo de un óxido metálico de litio y un ánodo de grafito. El electrolito está hecho de sales de litio disueltas en carbonatos orgánicos. En el

proceso de carga, los átomos de litio del cátodo se transforman en iones de litio que migran a través del electrolito hacia el ánodo en el que se combinan con los electrones de y se depositan en entre las capas del grafito en forma de átomos de litio. Este proceso se revierte durante la descarga [17].

1.2.3.2. Sistemas de celdas regenerativos

Un sistema regenerativo de celdas de combustible de hidrógeno (RHFC², por sus siglas en inglés) es un sistema que puede producir potencia eléctrica por medio de reacciones químicas y a la vez regenerar sus reactantes electroquímicamente, utilizando un arreglo de celdas electroquímicas. Los principales componentes de estos sistemas son la celda de combustible, donde se produce la energía; el electrolizador, equipo en el que se regeneran los reactivos; y el estanque de almacenamiento, donde se almacenan el combustible [18]. El sistema usa electricidad para generar hidrógeno (H₂) a partir de agua, en el electrolizador. Dicho hidrógeno es almacenado en un estanque y posteriormente entregado a la celda de combustible para transformarlo en electricidad y agua [6].

Este sistema tiene variadas características que lo hacen útil para aplicaciones de almacenamiento en red de gran escala. Primero, el almacenamiento de la energía en forma de hidrógeno entrega mayor densidad energética másica que sistemas de almacenamiento con otro combustible como por ejemplo la gasolina. El H₂ tiene aproximadamente 2,6 veces la densidad energética másica de la gasolina [19], [20]. Segundo, el hidrógeno es un vector energético flexible, ya que puede usarse para celdas estacionarias (solo para producir electricidad o de ciclo combinado para producir electricidad y calor) o para motores a combustión. Tercero, el H₂ tiene un bajo rango de auto descarga³, lo cual lo hace útil para almacenamiento por temporadas. Esta autodescarga, se utiliza con dicho nombre, debido a que el tanque, es la unidad de almacenamiento propiamente tal del sistema. De este modo, para hacer comparable el efecto con otras formas de almacenamiento, como las baterías, se utiliza el concepto de 'autodescarga'. Lo que ocurre es que se puedan presentar pérdidas del gas en el tanque, es decir, que hayan fugas del gas, lo que sería un fenómeno netamente físico y que es más sencillo de controlar que una autodescarga, que ocurra por fenómenos químicos. Y por último, el precio del almacenamiento está comenzando a ser competitivo con respecto a las baterías [6].

La configuración más común de este sistema, por considerarse tecnologías maduras en el mercado, son las de electrolizador de agua alcalino (AWE⁴, por sus siglas en inglés) y celda de combustible de intercambio iónico (PEMFC⁵, por sus siglas en inglés). En la Figura 1.6 se puede ver un diagrama de un RHFC.

²*Regenerative Hydrogen Fuel Cell*

³Fenómeno en el cual una batería pierde su carga debido a reacciones químicas sin que los electrodos estén conectados [23]

⁴*Alkaline Water Electrolyzer*

⁵*Proton-Exchange Membrane Fuel Cell*

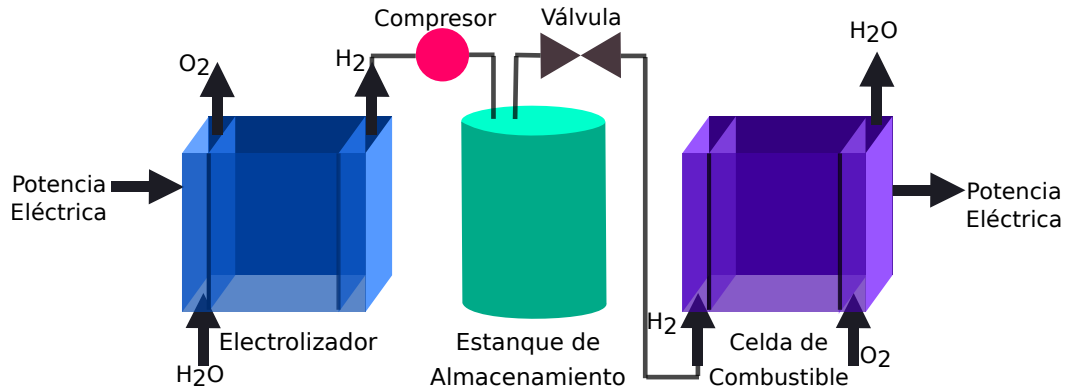


Figura 1.6: Esquema simplificado de un sistema regenerativo de celda de combustible de hidrógeno [6].

1.3. Caso de Estudio

Se usó como caso de estudio la planta fotovoltaica ‘El Pelicano’, la cual está ubicada en la comuna de La Higuera, en la región de Coquimbo. Esta planta tiene una potencia instalada de 100 MW [21].

Para efectos de este estudio, se asumirá que la energía de la planta será solamente suministrada para consumo humano. Según un estudio del Ministerio de Energía, en la región de Coquimbo existe una población de 816.939 habitantes [13] y que cada hogar en la región tiene un consumo eléctrico promedio de $139 \text{ kW-h (mes}\cdot\text{hogar)}^{-1}$. Si se asume que en promedio hay 4 habitantes por hogar, en la región hay aproximadamente 204.235 hogares. Por lo tanto, la tasa de consumo energético residencial en la región es:

$$\begin{aligned} \text{Cons}_{\text{residencial}} &= 139 \frac{\text{kW-h}}{\text{mes hogar}} \cdot \frac{3,6 \times 10^6 \text{ J}}{1 \text{ kW-h}} \cdot 204.325 \text{ hogar} \cdot \frac{1 \text{ mes}}{2,628 \times 10^6 \text{ s}} \cdot \frac{1 \text{ MJ}}{10^6 \text{ J}} \\ \text{Cons}_{\text{residencial}} &= 38,9 \text{ MW} \sim 40 \text{ MW} \end{aligned}$$

Si bien existe una variación de consumo a lo largo de un día (Ver Anexo A.1 para más detalles), se asumirá que el consumo energético es constante a lo largo del día por simplicidad de cálculo, cuyo valor es igual a 40 MW. El sistema se sobredeterminará con el propósito de que éste sea lo suficientemente grande para abastecer de energía en cualquier momento. Junto con lo anterior, como la planta fotovoltaica tiene una tasa de generación de 100 MW, se dispone de 60 MW para ser almacenados en el sistema. Es decir, 40 MW pasan directo a consumo y 60 MW entran al sistema de almacenamiento objeto de este estudio. Esta energía se utiliza durante los periodos en los que la planta fotovoltaica no generaría energía, que corresponde a la noche. Por lo tanto, el sistema de almacenamiento tiene un ciclo diario de carga y descarga.

1.4. Objetivos

1.4.1. Objetivos generales

Comparar técnica y económicamente los sistemas de almacenamiento de energía solar basados en baterías de ion-litio y sistemas regenerativos de celdas de combustible.

1.4.2. Objetivos específicos

- Selección las tecnologías del almacenamiento seleccionadas para el estudio: baterías de ion-litio y componentes del sistema regenerativo de celdas de combustible.

Incluyendo parámetros de operación, como potencial-corriente, eficiencia. Y además costos de inversión de los equipos involucrados.

- Dimensionar los equipos de almacenamiento.

Para las baterías, dimensionar el número de baterías y la capacidad de carga/descarga en A-h.

Para electrolizadores y celdas de combustible, el área de los electrodos y el número de *stacks* para cada uno de ellos.

Para estanques de almacenamiento, la capacidad de almacenamiento en Nm³ para especies gaseosas y en m³ para especies líquidas.

- Hacer una comparación técnica de las tecnologías de almacenamiento anteriormente mencionadas, usando los parámetros de eficiencia energética y de energía de retorno.
- Realizar una comparación de costos de inversión de cada uno de los sistemas.

Capítulo 2

Tecnologías

Las tecnologías que componen los sistemas de almacenamiento, ya sea en base a celdas de combustible o baterías de ion-litio, se detallan a continuación:

2.1. Sistema Regenerativo de Celdas de Combustible

2.1.1. Celdas de Combustible

Las celdas de combustible (FC¹, por sus siglas en inglés) de hidrógeno son equipos que combinan hidrógeno y oxígeno para producir agua y electricidad, caracterizadas por no producir gases de efecto invernadero. Estas celdas fueron inicialmente desarrolladas por la empresa General Electric en Estados Unidos en la década de 1960 para ser usadas por la NASA en vehículos espaciales [22].

A diferencia de las baterías, las celdas pueden trabajar de manera continua, conforme se alimenta el combustible. Este proceso corresponde a una transformación de la energía química de los reactivos en energía eléctrica, sin asociarse a procesos térmicos. Esta característica hace que esta forma de producción de energía sea más eficiente que un proceso térmico, como la combustión [24]. La reacción global que ocurre dentro de la celda es:



Los reactivos utilizados por la celda deben ser tratados antes de ser ingresados en el sistema, puesto que la celda es sensible a impurezas. Si las hay, se podrían generar reacciones indeseadas con algún componente de ella y depositar compuestos que afecten el rendimiento

¹*Fuel Cell*

de ésta [25]. Las celdas de combustible se componen de un cátodo, un ánodo y un electrolito, como puede verse en la Figura 2.1.

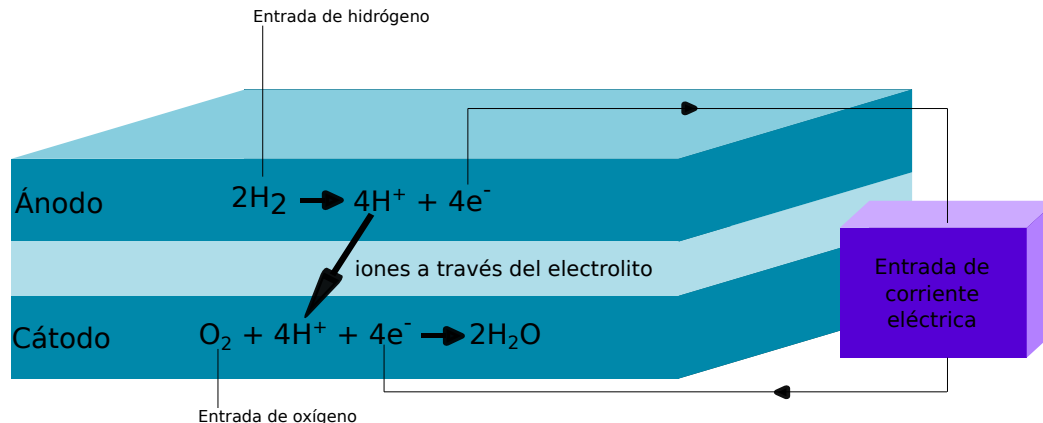


Figura 2.1: Diagrama básico de una celda de combustible de hidrógeno con membrana de intercambio protónico (PEMFC) [22].

El electrolito puede ser de diversos componentes, como alcalino, de óxido sólido (SOFC², por si sigla en inglés), carbonato fundido o membrana de intercambio iónico (PEM). Estos componentes, a excepción de la PEM, operan a temperaturas superiores a los 200°C, por lo que podrían resultar útiles para la aplicación en red [24]. En este estudio, se abordarán tanto las celdas de óxido sólido como las de membrana de intercambio protónico, pues ambas pueden operar usando como combustible al H₂, haciendo comparable a ambas tecnologías. De todos modos es necesario recalcar que las celdas de óxido sólido también pueden operar usando monóxido de carbono CO [22].

2.1.1.1. Celdas de combustible de membrana de intercambio protónico

Las celdas de combustible de membrana de intercambio iónico (PEMFC), poseen un electrolito que corresponde a film polimérico, donde el más usado corresponde al Nafion®. Esta celda opera a una temperatura entre 80 y 120 °C con una eficiencia de aproximadamente 60 % [25].

El funcionamiento de esta celda se debe al electrolito Nafion®, el cual tiene una conductividad de 0,1 S cm⁻¹. Este compuesto es un sólido polimérico que fue fabricado por la empresa DuPont Co., tiene la capacidad de transferir protones en presencia de humedad y no permite la transferencia de los reactantes a través de su estructura. Al Nafion® se le agrega una capa de Teflón para hacerlo impermeable al agua. Esto ocurre porque en el cátodo se produce agua y parte de ésta queda dentro del electrolito. Entonces se hace necesario soplar aire por el electrolito a una velocidad y presión específica, que se determina en el diseño de la celda [26].

Los electrodos están hechos de platino soportado en carbono. Se utiliza un material poroso

²Solid Oxide Fuel Cell

hecho de carbono, que tiene la capacidad de soportar soportar platino en grandes cantidades. Este polvo poroso se deposita sobre una matriz o lámina de grafito. De este modo se obtienen distintas capas de grafito para el soporte del platino [26].

2.1.1.2. Celdas de combustible de óxido sólido

Una celda de óxido sólido consiste de dos electrodos porosos, separados por un electrolito denso de óxido que permite conducir iones. En el cátodo reacciona el O_2 con los electrones que se transportan por circuito externo. De esta reacción se forman los iones oxígeno O^{2-} , como se muestra en la Figura 2.2. Los iones O^{2-} migran a través del electrolito hacia el ánodo. En el ánodo, estos iones reaccionan con el gas H_2 para formar H_2O . Junto con ello, se liberan electrones, los cuales fluyen por un circuito externo hacia el cátodo, para producir energía eléctrica [27].

En la Figura 2.2 se muestra una diagrama de una celda de óxido sólido.

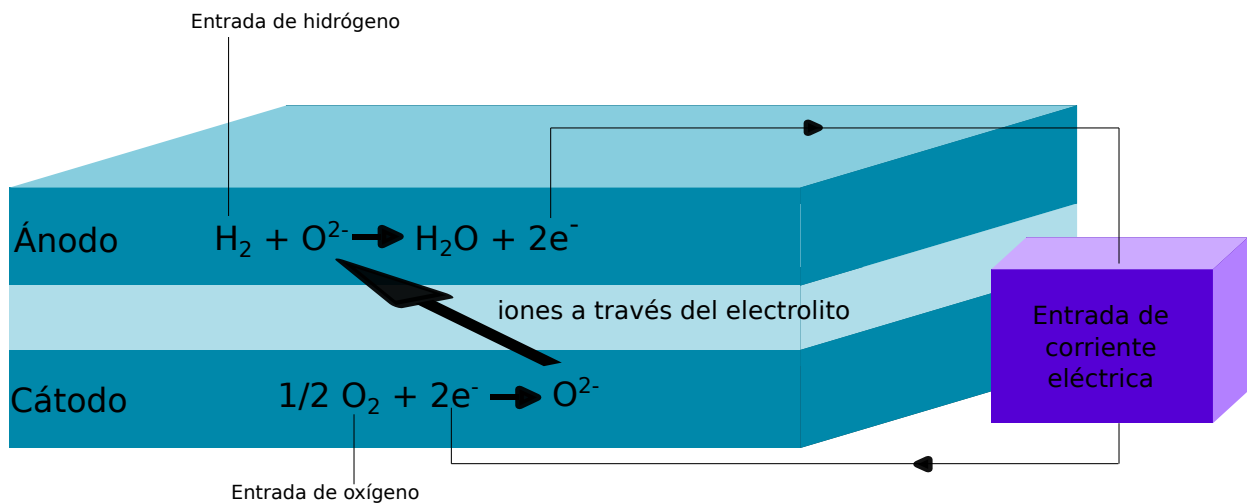


Figura 2.2: Diagrama básico de una celda de combustible de óxido sólido (SOFC) usando H_2 como combustible [27].

Este tipo de celdas operan en un rango de temperatura de $600-800^\circ C$. A esta temperatura se pueden reducir las pérdidas por resistencia que ofrece el electrolito denso al paso de la iones [27].

Para ser usado, el electrolito debe cumplir con las siguiente características: primero, tiene que operar a temperaturas superiores a $600^\circ C$, por lo que tiene que ser estable en esas condiciones. Segundo, tiene que someterse a condiciones químicas extremas pues tiene un ambiente oxidante del lado del oxígeno y un ambiente reductor del lado del hidrógeno. De este modo, el electrolito tiene que contar con una conductividad iónica tal que los iones fluyan a través de sí sin representar una resistencia significativa. También, debe ser lo suficientemente denso para que los gases no puedan atravesarlo. Y por último, estable a ese rango de

temperaturas, lo que implica que el coeficiente de expansión térmica se ajuste a la interfaz con cada electrodo [27]. El material más comunmente usado para es la circona estabilizada con itria, cuyo símbolo químico es ZrO_2 y se abrevia como YSZ, por su sigla en inglés³ [27].

En el caso del cátodo es un ambiente reductor y a alta temperatura, por lo que el material debe cumplir con ser estable química y mecánicamente a temperaturas sobre 600°C . Además, debe tener una alta conductividad eléctrica⁴. El material debe tener una microestructura porosa tal que los gases se difundan con facilidad a través de sí para llegar a la interfase cátodo/electrolito. La opción más usada para este material es manganato de lantano dopado con itria estabilizada con circona: LSM-YSZ [27].

Por último, en el ánodo se establece un ambiente oxidante y a alta temperatura. El material de este electrodo debe ser un catalizador lo más óptimo posible para que ocurra la oxidación del combustible. También tener conducción eléctrica suficiente como para que las especies lo atraviesen con facilidad. Y también, que su coeficiente de expansión térmica sea suficiente para ajustarse a la interfaz electrodo/electrolito. El material más utilizado para el ánodo es níquel dopado con itria estabilizada con circona [27].

Es importante destacar que dada la temperatura de operación, este tipo de celdas son candidatas a usarse en ciclos combinados. Es decir, usarlas para producir energía adicional al combinarlas con un ciclo de potencia. Se han reportado casos donde se combinan con turbinas de gas o con ciclos de Rankine [28], [29], [30]. En tales casos, el calor removido de la celda se utiliza para calentar los gases o vapores de cada ciclo y con ello producir energía. En este estudio, se propone una forma alternativa de configuración, que se describirá en el Capítulo 3.

2.1.2. Electrolizador

El electrolizador es el equipo donde ocurre la reacción de electrólisis de agua, la que se señala en 2.2, la corriente fluye entre los electrodos separados e inmersos en un electrolito acuoso, requiriendo además de un separador o diafragma para evitar la recombinación de los gases de salida H_2 y O_2 [31], como puede verse en la Figura 2.3. Es decir, ocurre la reacción inversa a la de la celda de combustible.



El agua alimentada debe ser tratada antes de ser utilizada puesto que el sistema es sensible a las impurezas, por lo que se podrían generar deposiciones de minerales, deteriorando la celda. Sin embargo, considerando ese factor, el hidrógeno extraído llega a purezas del orden del 99,999 vol % [32].

Esta celda electroquímica alcalina está compuesta por los electrodos, un diafragma y un

³ *Yttrium-stabilized zircona*

⁴Tanto de iones como de electrones

electrolito, como puede verse en la Figura 2.3. Actualmente, son utilizados 3 tipos principales de electrolizadores, los cuales difieren principalmente en el electrolito que usan: alcalinos, membrana de intercambio de protones y de estado sólido.

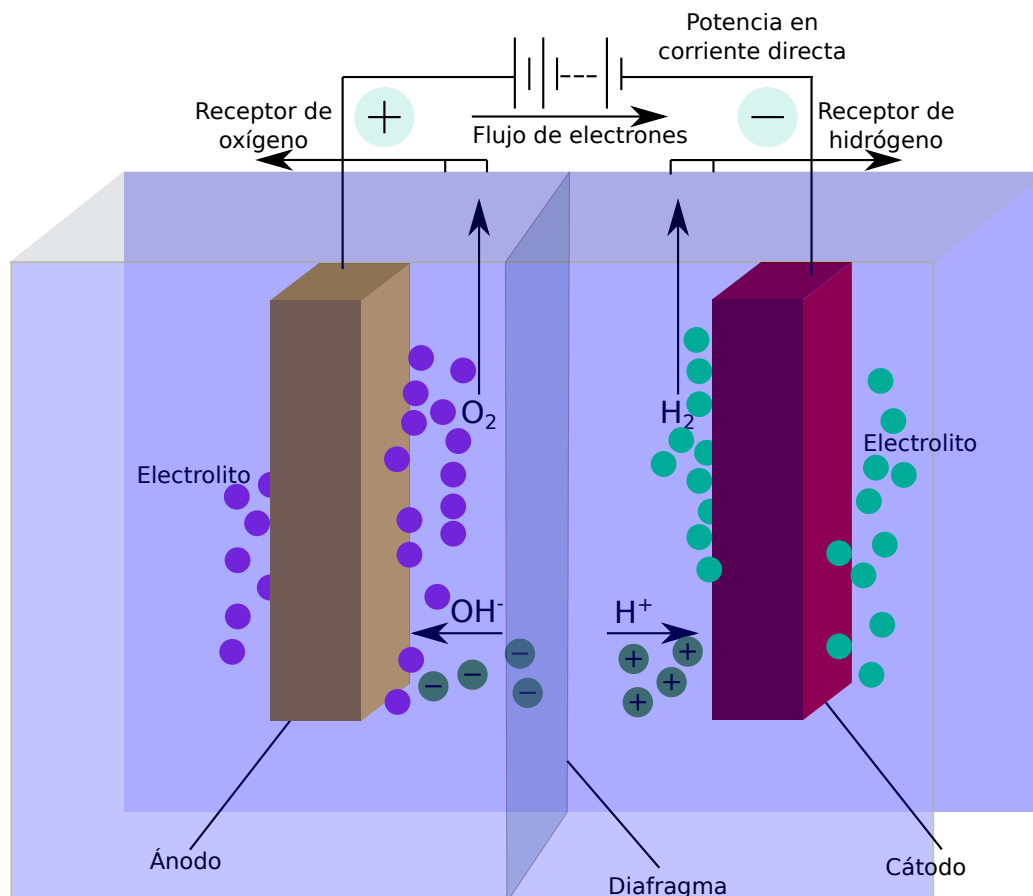


Figura 2.3: Esquema de un electrolizador de electrolito alcalino [34].

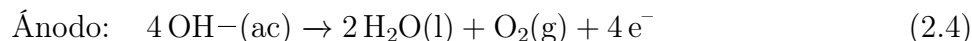
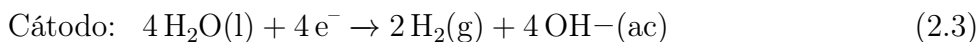
Los electrolitos de membrana de intercambio de protones poseen una membrana polimérica de características ácidas, la cual permite el intercambio de protones de hidrógeno. Los electrodos que se utilizan junto a esta membrana son de platino e iridio. Esta tecnología solamente está disponible para aplicaciones de menor escala⁵ o proyectos en escala piloto. El valor que tiene esta tecnología consiste en que pueden trabajar con variaciones de potencia, ya que responden rápidamente a las variaciones en la red [33].

Por otro lado, las membranas de estado sólido utilizan una membrana sólida cerámica. La particularidad de estas celdas es que permitirían la electrólisis del vapor de agua, es decir, a temperaturas de entre 600 y 900°C [24], [33]. Sin embargo, se optará por estudiar al electrolizador en su versión de tecnología madura, que corresponde a los electrolizadores alcalinos, AWE⁶ por su sigla en inglés. Estos electrolizadores son una tecnología ampliamente desarrollados, con aplicaciones que trabajan en órdenes de MW de energía de entrada [32]. En este tipo de electrolizadores, el electrolito es una mezcla 25-35 %p/p de KOH o de NaOH

⁵Hasta 2 MW.

⁶Alkaline Water Electrolyzer

en agua. Los electrodos pueden ser de acero, níquel o acero recubierto de níquel [31]. En dicho sistema las semirreacciones que ocurren son las que siguen [31]:



Los electrones fluyen por un circuito externo desde el ánodo al cátodo donde se genera el hidrógeno y iones hidroxilo. A medida que la temperatura aumenta, el sobrepotencial disminuye debido a que aumenta la cinética en el electrodo y a la reducción de la resistencia óhmica. Sin embargo, lo anterior aumenta el riesgo de corrosión, por lo que se ha encontrado que la temperatura óptima para la electrólisis es 80 a 90°C, con una presión de 1 atm [31]. Estos casos tienen tamaños de 2 a 3 MW, llegando a producir entre 40 y 70 kg h⁻¹ de H₂, con una pureza de 99,5%. Además, tienen una vida útil de 15 años, con una operación de entre 60.000 y 90.000 h y de eficiencia entre 47 y 82% [32] [33]. Un punto que le resulta negativo a esta tecnología es que tienen un tiempo de partida en frío de entre 10 y 40 minutos, lo cual puede ser poco ventajoso en circunstancias en las que se requiera una reacción inmediata, como en un corte de suministro imprevisto en la red [35].

Respecto de aplicaciones en el mundo, al año 2015 existían aproximadamente 8 GW instalados de esta tecnología [33]. Incluso, es la forma de obtención de hidrógeno más limpia a partir del agua y usando fuentes renovables [24], debido a que no se emiten gases de efecto invernadero en el proceso. Otras formas de producción consideran los procesos termoquímicos, los cuales usan calor y reacciones químicas para obtener el hidrógeno desde combustibles convencionales o desde biomasa, biológicos a través de microorganismos que generen hidrógeno en sus procesos biológicos, etc. De estas formas de producción, la que actualmente más se usa para producir hidrógeno en el mundo es a través de combustibles fósiles, con un 96% de la producción y un 4% para la producción a través de agua, como puede verse en la Figura 2.4 [33].

Sobre el gas, se puede mencionar que el H₂ tiene una ventaja respecto de otros combustibles, al tener una mayor densidad energética. Por ejemplo, a 25°C y 30 bar, la densidad energética del H₂ es de 33,3 kW-h kg⁻¹ [19] y para la gasolina es 12,7 kW-h kg⁻¹ [20]. Además, tiene distintas formas de almacenarse, como se mencionará a continuación, por lo que representa una manera interesante de estudio.

2.1.3. Estanque de almacenamiento

Para completar el RHFC, se necesita el sistema de almacenamiento mismo. En contraste con las baterías de ion litio, en las que la energía se almacena en forma de iones litio Li⁺, en el RHFC se almacena como gas hidrógeno H₂. En este sentido, se debe encontrar un recipiente en el cual almacenar dicho gas. El almacenamiento del gas puede realizarse de diversas formas: en superficies sólidas por adsorción, dentro de sólidos por absorción o forma física dentro de estanques [24].

Fuentes de hidrógeno más utilizadas

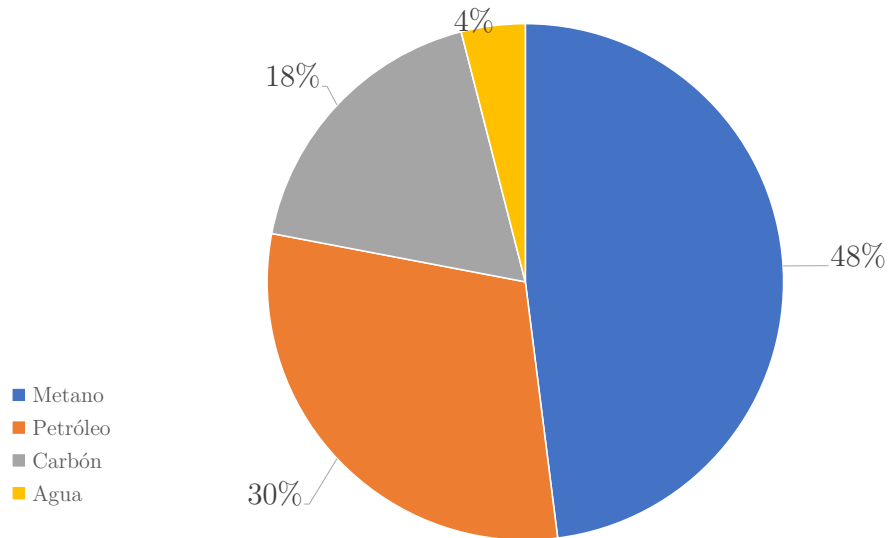


Figura 2.4: Fuentes de hidrógeno para utilización mundial en refinerías, industria química y gases industriales [33].

El almacenamiento en superficie sólida consiste en tomar el gas y retenerlo en la superficie del sólido. Esta retención no altera químicamente al gas y tampoco lo fija a la superficie de manera permanente [24].

El almacenamiento dentro de sólido consiste en absorber el gas dentro del material, materiales como nanotubos de grafito, alanato o borohidruros. Estos almacenamientos ofrecen un almacenamiento que ocupa menor volumen total utilizado por el sistema de almacenamiento, debido a que los materiales tienen mayor superficie de almacenamiento por unidad de masa que otros almacenamientos tradicionales, como un estanque. Y junto con lo anterior, también permiten utilizar menor energía para almacenar el gas dentro de los sólidos, distinto el caso a otros sistemas donde el gas primero se tiene que comprimir a altas presiones, mayores a 20 bar, para almacenarse. Apesar de lo anterior, estos materiales están aún en estapa de investigación y desarrollo, por lo que no son tecnologías comercializables. De este modo, no se consideran para el presente estudio [24].

El almacenamiento físico es la forma más utilizada para almacenar el hidrógeno [24]. Una forma de almacenamiento sería la inyección del gas bajo tierra. Esta forma tendría que ocurrir en una formación geológica hermética, con mínima contaminación del gas por bacterias o compuestos que se encuentren cerca del lugar [33]. Los recintos más favorables para esto son las cavernas de sal porque cuentan con la seguridad, factibilidad técnica, costos de inversión y operación y formaciones geológicas más favorables para dicho fin, contando con casos en Estados Unidos y Reino Unido [33]. Sin embargo, el sistema en estudio no busca depender del contexto geológico, por lo tanto se descartará el almacenamiento geológico.

De los almacenamientos físicos, el más ampliamente utilizado es el tanque de acero inoxidable. Estos tanques suelen soportar presiones entre 250 y 300 bar, que se considera una tecnología madura. La ventaja de estos recipientes, respecto de las otras formas de

almacenamiento mencionadas, consiste en que los estanques son tecnológicamente más simples de fabricar y mantener. Esto se refiere a que el estanque, normalmente es de acero inoxidable y solo requiere válvulas para controlar el flujo del gas. La investigación actual sobre este tipo de estanques está en nuevos materiales que le permitan llevar la presión de almacenamiento hasta 700 bar [36].

2.2. Baterías de ion-litio

2.2.1. Características

Las baterías son celdas electroquímicas, cuya función es almacenar energía para liberarla posteriormente. Con esto se obtiene un proceso reversible de carga y descarga.

Las baterías son de diferentes tipos como plomo-ácido, ion-litio, de níquel-hierro, etc. Este estudio se centrará en las baterías de ion-litio. Actualmente, las baterías que tienen mayor predominancia en el mercado portátil, como en teléfonos móviles y computadores portátiles, corresponde a las baterías de ion-litio, debido a que son seguras de transportar y son las que tienen la mayor combinación de densidad energética: 300 W-h L⁻¹ y 150 W-h kg⁻¹ aproximadamente, con respecto a los 80 W-h L⁻¹ y 25 W-h kg⁻¹ aproximadamente, de las baterías de plomo-ácido [37]. El mercado de este tipo de baterías está avanzando hacia la inclusión en vehículos móviles e incluso hacia las aplicaciones en red, que consiste en el almacenamiento de energías productivas [37].

Las baterías de ion litio almacenan energía eléctrica en electrodos hechos de un compuesto de intercalaciones de Li⁺. En la Figura 2.5 se puede apreciar un diagrama con los componentes básicos de una batería de ion litio. El sistema está conectado externamente por un colector de corriente el cual corresponde a un conector de cobre. Desde la estructura de grafito, migran los iones Li⁺ hacia el electrolito.

Durante el proceso de carga y descarga, los iones Li⁺ se transfieren por el electrolito entre un electrodo y el otro, donde se producen procesos de oxidación y reducción simultáneamente, según el sentido del proceso. La dirección del proceso de carga es aquella en la que los electrones del circuito externo fluyen del cátodo al ánodo y los iones Li⁺ fluyen desde el LiFeO₄ al grafito. La gran mayoría de baterías de ion litio, usa un electrolito líquido que contiene una sal de litio, como LiPF₆, LiBF₄, LiClO₄. Esta sal de litio se disuelve en una mezcla con un orgánico como etileno, dimetilo, dietilo, dimetilo. También se han usado aditivos, como el carbonato de vinileno, para estabilizar la interfase electrolito-electrodo [38], aspecto que no fue considerado en la Figura 2.5.

El atractivo para usar estas baterías consiste en que el ion Li⁺ tiene un peso molecular menor a la mayoría de los elementos de la tabla periódica 6,9405 g mol⁻¹ [39], también tiene un radio iónico pequeño de 0,9 Angstrom⁷, lo cual es favorable para la difusión a través

⁷En adelante: Å°

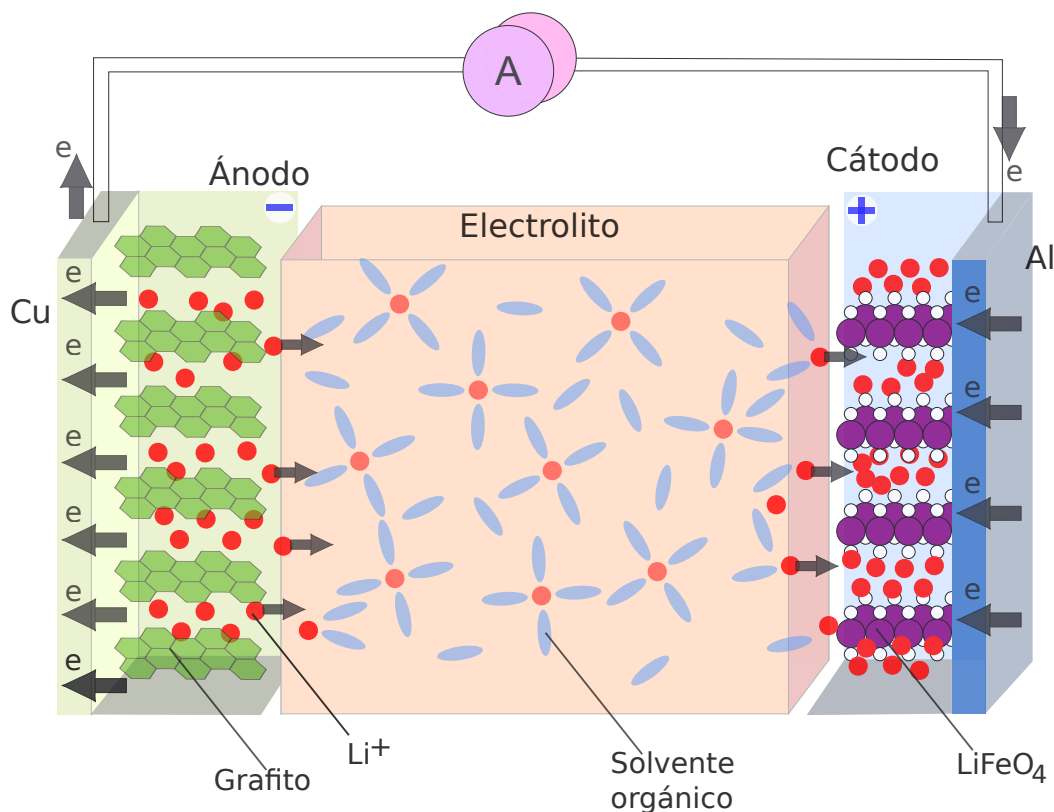


Figura 2.5: Diagrama de la estructura básica de una batería de ion Litio, flechas según el sentido de descarga [39].

del electrolito y de los electrodos. Y por último tiene un potencial redox bajo, el cual es $E^\circ(\text{Li}^+/\text{Li}) = -3,04 \text{ V}^8$ [39]. Por lo tanto, permite que se cuenten con alta densidad de energía de salida, un largo ciclo de vida y una salida de energía segura. Estas características las han posicionado como la alternativa más atractiva para aplicaciones móviles como en telefonía móvil. Sin embargo, estas propiedades también las hacen atractivas para aplicaciones de almacenamiento en red. La principal diferencia entre las baterías de ambas aplicaciones sería que para las aplicaciones en red es prioritario el costo de la batería misma, priorizado por sobre la densidad energética que entregue dicha batería. Y también, que para las aplicaciones en red se prioriza un largo ciclo de vida [39].

Para aplicaciones de almacenamiento de energía eléctrica conectada a la red de suministro eléctrico (en adelante: ‘aplicaciones *grid*’), las baterías más apropiadas son las de electrodos de litio, hierro fosfato LiFeO_4 (LFP) y de grafito (C), más conocidas por su sigla ‘LIP:C’ [40]. Este tipo de baterías muestran un menor voltaje por celda que baterías de ion litio de electrodos de distinta composición, como las de níquel, manganeso y cobalto con grafito (NCM:C) o las de óxido de níquel, cobalto y aluminio con grafito (NCA:C), las cuales son más usadas en aplicaciones móviles [40]. Esta diferencia de voltaje en celda, llega a ser incluso un 20 % menor para las LFP:C, sin embargo, estas celdas han mostrado tener mejores características en seguridad y desgaste [41]. También, el bajo voltaje de la celda permite a la batería LFP:C funcionar en un rango de porcentaje de carga el cual permite ser más eficiente

⁸Comparado con el electrodo de hidrógeno estándar EHE

en costos y en el diseño de algunos componentes, como el inversor electrónico de potencia [42].

2.2.2. Desgaste

Es un proceso inevitable el cual se produce a causa de reacciones paralelas, que se presentan en cualquier sistema electroquímico. Esto provoca que existan cambios en la capacidad de la batería y que aumente su resistencia conforme pasa el tiempo, por lo que se hace necesario sobre estimar la capacidad inicial, así como también, adaptar la entrega de la potencia almacenada. En el caso de las baterías para aplicaciones *grid*, su uso prolongado y demandante generará que el desempeño y la capacidad de la batería se vean comprometidos y con ellos, el sistema completo. Lo anterior también afectaría a los costos operacionales de un sistema en particular, así como también los costos de inversión al tener que reponer las baterías obsoletas [40].

El parámetro que se utiliza para monitorear el estado de la batería es el Estado de Salud (SOH, por sus siglas e inglés⁹). Este parámetro cuantifica la evolución en el tiempo de la degradación de la batería producto de la reducción de capacidad y aumento de la resistencia interna. El SOH es una función del tiempo y entregará un indicador del momento en el que la batería deba ser cambiado. Para eso se definen cotas de SOH, por ejemplo en las aplicaciones automotrices, se utiliza un $SOH < 0,8$ la batería debe ser reemplazada. En el caso de aplicaciones en red, aun no existe consenso sobre el valor [43].

⁹*State of Health*

Capítulo 3

Metodología

3.1. Preámbulo

La metodología que se describe en este capítulo, consta a grandes rasgos de los siguientes pasos:

1. Definir la configuración de los sistemas a utilizar
 - Sistema SOFC+Rankine
 - Sistema SOFC+Integración
 - Sistema PEM
 - Sistema de baterías
2. Modelamiento de los equipos electroquímicos de cada sistema
 - Sistema SOFC+Rankine: Electrolizador alcalino y celda de óxido sólido
 - Sistema SOFC+Integración: Electrolizador alcalino y celda de óxido sólido
 - Sistema PEM: Electrolizador alcalino y celda de intercambio protónico
 - Sistema de baterías: Baterías de ion-litio
3. Realizar balance de masa y energía en cada uno de los sistemas
 - Dimensionamiento de los equipos electroquímicos. En el caso de los sistemas con celdas, corresponde al área de los electrodos de cada equipo en m^2 . Y en el caso de las baterías será capacidad de carga/descarga en A h.
 - Búsqueda en catálogo de los equipos auxiliares
4. Definir los parámetros técnicos y económicos ¹ para los sistemas y calcularlos
5. Comportamiento de los parámetros técnicos y dimensionamiento de equipos electroquímicos frente a cambios en distintos parámetros
 - Tiempo de salida de potencia del sistema t_{su}
 - Eficiencia de utilización de combustible de entrada a la celda de combustible x_f^2

¹Se realiza en el Capítulo 4

²Esta evaluación solamente es válida para los sistemas que utilizan celdas de combustible.

Densidad de corriente del electrolizador j_{elec} ³

Potencia de salida basal⁴ del sistema \dot{W}_s

Para las baterías: la profundidad de descarga DOD y la potencia de entrada \dot{W}_e

6. Realizar una evaluación económica para los sistemas, considerando los costos de inversión
7. Comparar los 4 sistemas usando los parámetros técnicos y económicos

3.2. Configuración de los sistemas

El sistema que fue presentado en la Figura 1.6 corresponde a una simplificación de un sistema regenerativo de celdas de combustible. Esto porque se destacan los equipos principales propuestos en el estudio de M. Pellow *et. al* (Energy & Environ. Sci., 2015). Sin embargo en el presente estudio, se hace una propuesta adicional: el O_2 generado en los electrolizadores y el H_2O generada en las celdas de combustible.

La implicancia de que se almacenen el O_2 y el H_2O es que el sistema funcionará de manera cerrada, es decir, sin transferir masa con el exterior. Por lo tanto, el dimensionamiento considerará que el sistema ya cuenta con la masa necesaria de cada especie. Por otro lado, el modelamiento asumirá que no existen contaminaciones en estas corrientes o pérdidas de masa, de modo que ésta se mantiene constante.

Otro aspecto relevante es que los equipos auxiliares que se utilicen y que reciban energía de forma externa, recibirán dicha energía de una fuente externa que es distinta a la energía que entrega la planta fotovoltaica. Es decir, no se obtienen de los 60 MW que entran al sistema de almacenamiento. Esto se realizará así dado que si los 60 MW se repartieran entre todos los equipos que utilizaran dicha energía, habría que realizar un modelo de optimización para ver la manera en la que se reparte esa energía. Y un modelo de optimización no está en los objetivos ni alcances de este estudio. El centro de este estudio es conocer el funcionamiento y el tamaño de los equipos electroquímicos asociados al sistema de almacenamiento. Por lo tanto, los 60 MW que entran al sistema de almacenamiento, entran directamente al electrolizador: $\dot{W}_e = \dot{W}_{Elec}$. Se prevee que la potencia de los equipos auxiliares sea menor a la potencia del electrolizador y que por lo tanto, su obtención desde una fuente externa distinta a la planta fotovoltaica sea de fácil acceso.

A grandes rasgos, los equipos auxiliares que se utilizarán son como se describe a continuación:

- Para calentar fluidos se consideran calentadores que cuentan con una resistencia eléctrica

³Esta evaluación es solamente válida para los sistemas que utilizan celdas de combustible.

⁴Se denominará 'basal' a la potencia que sale de los electrolizadores únicamente, en el caso de los sistemas con celdas. Y a la potencia que sale del sistema de baterías, en el caso de baterías. Esta distinción se hace para notar que en algunas configuraciones, existe una potencia de salida adicional al electrolizador o baterías y esa potencia no se hará variar.

- Para comprimir corrientes gaseosas se consideran compresores
- Para impulsar corrientes líquidas se consideran bombas
- Para disminuir la presión de corrientes gaseosas se consideran válvulas de descompresión
- Para separar la gases de líquidos se consideran condensadores
- Para almacenar corrientes gaseosas o líquidas se consideran estanques de acero inoxidable

Ahora, cada sistema tiene características particulares debido a que existen diferencias en su diseño. Principalmente se plantea la comparación entre un sistema que utiliza una celda de combustible de óxido sólido con uno que utiliza una celda de combustible con membrana de intercambio protónico. Pero además de eso, se propone un sistema de celda de combustible de óxido sólido que aprovecha la alta temperatura de la corriente de salida de la celda para poder acoplarle un ciclo de Rankine y con ello obtener más energía. Y la alternativa, que consiste en utilizar la alta temperatura de la salida de la celda de óxido sólido para producir una integración energética con las corrientes que deben calentarse para entrar a la celda.

De este modo se tienen 3 sistemas de celdas de combustible: sistema de celda de combustible de óxido sólido y un ciclo de Rankine acoplado (SOFC+R), sistema de celda de combustible de óxido sólido e integración en energética (SOFC+Int) y un sistema de celda de combustible con membrana de intercambio protónico (PEM). Además, el sistema de baterías. De este modo, se estudiaron 4 configuraciones de sistema, que se detallan a continuación.

En el caso del sistema de baterías de ion-litio, se puede mencionar que su configuración se refiere a cuántas baterías se tienen por conjunto. Es decir, cuántas baterías hay por cada *string* de baterías y cuántos *strings* hay conectados en paralelo. Un *string*⁵ es un conjunto de baterías que están conectados en serie, haciendo una cadena consecutiva de baterías.

3.2.1. Sistema SOFC+R

La configuración del sistema SOFC+R se muestra en la Figura 3.1:

Se necesitan compresores para presurizar las corrientes 1 de H₂ y 13 de O₂ para que entren en los respectivos estanques de almacenamiento. La corriente 1 está a una presión de 9 bar y debe entrar al estanque de almacenamiento a 200 bar. La corriente 13 de O₂ está a una presión de 9 bar y entra al estanque de almacenamiento a 17 bar.

A la salida de los estanques de almacenamiento de O₂ y H₂, se realiza una descompresión para que ambas corrientes lleguen a una presión de 1 bar. Esta descompresión se realiza en válvulas, donde el supuesto considerado es que la entalpía de la entrada y de la salida se mantiene constante. Esta consideración se considera fuerte porque esta descompresión se denomina expansión libre y consiste en una expansión violenta del fluido en la que se pierde energía cinética. Por lo tanto, se genera un cambio en la energía del fluido pero el modelo

⁵Del inglés. Significa 'cadena'

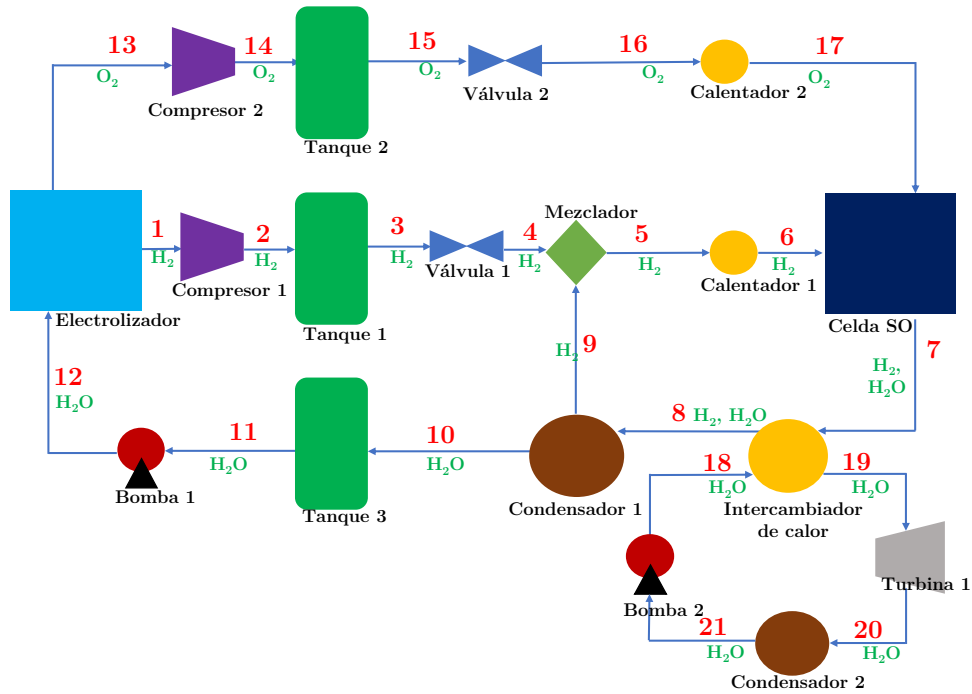


Figura 3.1: Configuración del sistema de almacenamiento utilizando celda de combustible de óxido sólido, electrolizador alcalino y un ciclo de Rankine acoplado.

que se plantea en este estudio no lo reconoce, porque como se mencionará más adelante, la energía cinética se considera despreciable frente a la la energía térmica de las corrientes.

La corriente 16 de O_2 entra al calentador 2 para aumentar su temperatura hasta $800^\circ C$. De la misma manera ocurre en el calentador 1 donde la corriente 5 aumenta su temperatura hasta los $800^\circ C$. Ambas corrientes se calientan de manera isobárica, manteniendo su presión de 1 bar. Las corrientes 17 y 6 entran a la celda de combustible.

La celda de combustible de óxido sólido opera a $800^\circ C$ y 1 bar. En ella, se agota el O_2 de la entrada y sale una fracción de H_2 . La fracción de H_2 que sale es el 20% de la corriente que entra al equipo y se diseña así para evitar que la diferencia de presión dentro de la celda sea 0 y que por lo tanto, los materiales de ésta se deterioren. La corriente 7 de salida de la celda consta de H_2 y de H_2O a una temperatura de $800^\circ C$ y una presión de 1 bar. Esta corriente se hace pasar por un intercambiador de calor donde transfiere calor a una corriente de agua la cual pertenece a un ciclo de Rankine simple el que se acopla al sistema de almacenamiento, la cual eleva su temperatura hasta $500^\circ C$. La incorporación del ciclo de Rankine se hace pensando en que se mejore la eficiencia del sistema de almacenamiento al aprovechar el calor de la corriente de $800^\circ C$ y con ello generar potencia de salida en una turbina. También, se incorpora para enfriar la corriente 7, pues ésta tiene que llegar al electrolizador a una temperatura de $85^\circ C$. Normalmente, en los ciclos combinados, se ocupa el calor removido por la celda para calentar el fluido de trabajo en el ciclo de Rankine [29], [30]. Pero como se mencionó anteriormente, el fluido de salida de la celda debe enfriarse para luego utilizarse en el electrolizador, de modo que se optó por la configuración presentada.

La corriente 8 sale del intercambiador de calor a una temperatura de $99,61^{\circ}\text{C}$ que corresponde a la temperatura de saturación del agua a 1 bar y entra al condensador 1. En el equipo se remueve calor latente del H_2O y se separa del H_2 , en las corrientes 10 y 9, respectivamente. Ambas corrientes salen a una temperatura de $99,61^{\circ}\text{C}$ y una presión de 1 bar, pues el condensador trabaja en condiciones de presión y temperatura constante. La corriente 9 se incorpora a la línea de H_2 en un mezclador, en la que se mezcla con la corriente 4 y del equipo sale la corriente 5. Posteriormente la corriente 5 entra a un calentador, el cual aumenta la temperatura de la corriente hasta 800°C para finalmente entrar a la celda de combustible.

La corriente 10 entra a un tanque para almacenarse y ser liberada cuando sea requerida por el sistema. Dentro del tanque se enfría hasta una temperatura de 80°C . Este enfriamiento se realiza porque en la bomba, equipo que viene posterior al estanque y cuya función es presurizar e impulsar el fluido hacia el electrolizador, el fluido se calienta. El fluido se calentará hasta una temperatura de 85°C porque si se propone que el fluido sale de la bomba a 80°C , implica que a la entrada de la bomba está a $80,4^{\circ}\text{C}$. Es decir, se produce un enfriamiento del fluido y eso genera que la bomba genere un trabajo de salida del sistema, al igual que lo haría una bomba, lo cual parece una contradicción termodinámica. Para evitar ese problema, se usa la corriente 12 a una temperatura de 85°C . Sin embargo el modelamiento de la cinética electroquímica de dicho electrolizador, fue hecho considerando que el equipo funciona a una temperatura de 80°C . Esta diferencia será analizada en el Capítulo 6. Para más detalle sobre esta elección, revisar el Anexo A.2.3.1.

En el electrolizador se produce la electrólisis del agua, para ello se recibe una potencia eléctrica externa la que permite electrolizar las moléculas de H_2O en O_2 y H_2 . El equipo opera a 80°C y una presión de 9 bar. El equipo tiene una salida 13 para el O_2 y una salida 1 para el H_2 , las cuales están a las mismas condiciones de temperatura y presión.

El ciclo de Rankine acoplado recibe calor para calentar la corriente de H_2O 18 hasta una temperatura de 618°C aproximadamente. Esta corriente está a una presión de 50 bar la cual desciende hasta 0,84 bar al pasar por la turbina. Este proceso de expansión genera una potencia de salida que genera es aprovechable y enfría el fluido hasta una temperatura de $94,64^{\circ}\text{C}$. Posterior a la turbina, la corriente 20 pasa por condensador 2 que remueve calor latente al fluido hasta hacerlo llegar al estado de líquido saturado. La corriente 21 de salida del condensador pasa por la bomba 2 la cual aumenta la presión del fluido hasta 50 bar y lo impulsa hacia el intercambiador de calor que calienta el fluido hasta los 618°C , completando el ciclo.

3.2.2. Sistema SOFC+Int

A grandes rasgos, la configuración del sistema de celda de combustible de óxido sólido con integración energética⁶ es similar al sistema SOFC+R, como se aprecia en la Figura 3.2.

⁶En adelante *SOFC + Int*

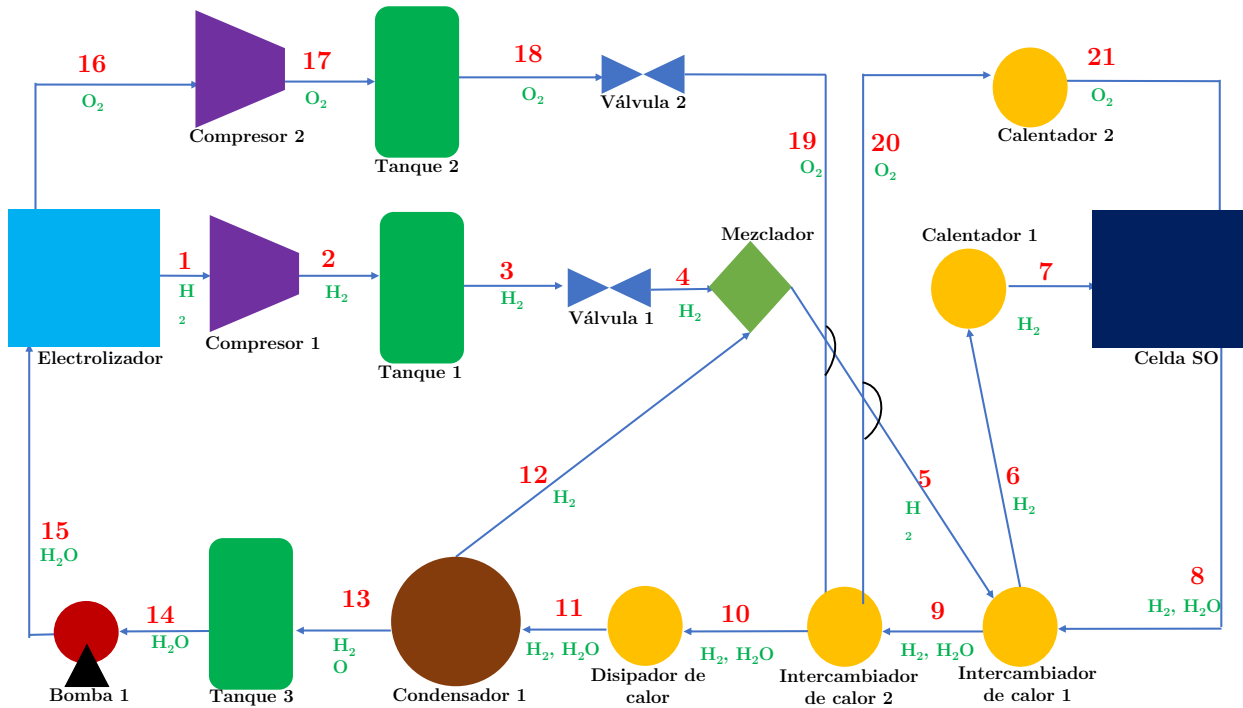


Figura 3.2: Configuración del sistema de almacenamiento utilizando celda de combustible de óxido sólido, electrolizador alcalino y un intercambio de calor entre corrientes.

La gran diferencia entre ambas configuraciones es que en este caso, no se acopla un ciclo de Rankine al sistema. La corriente 8 caliente que sale de la celda de óxido sólido es utilizada en intercambiadores de calor para calentar las corrientes 5 de H_2 y 19 O_2 previo a su entrada a la celda de combustible. Esto se hace con el propósito de que la potencia consumida por los calentadores 1 y 2 para cada corriente sea menor al caso SOFC+R. El proceso anterior se conoce como Integración Energética y consiste en aprovechar la temperatura de las corrientes con las que cuenta el sistema, para calentarlas o enfriarlas entre sí y con ello disminuir la potencia de equipos auxiliares.

La corriente 12 de H_2 del condensador sale a una temperatura de $99,61^\circ C$ y una presión de 1 bar. Esta corriente se mezcla con la corriente 4 de H_2 que está a $196^\circ C$ y a una presión de 1 bar. La corriente 5 resultante de esta mezcla, tiene una temperatura de $110,5^\circ C$ y una presión de 1 bar.

El proceso de integración energética se realiza en 2 etapas. Primero la corriente 8, que está a $800^\circ C$ y 1 bar, se hace pasar por el intercambiador de calor 1 a contra corriente con la corriente 5 de H_2 , que entra a $110,5^\circ C$. La corriente enfriada 9 tiene una temperatura de $160^\circ C$ y la corriente calentada 6 tiene una temperatura de $797^\circ C$. Posteriormente, la corriente 9 entra al intercambiador de calor 2 a contra corriente con la corriente 19 que está a $96^\circ C$ y 1 bar. La corriente aun más enfriada 10, sale del equipo a una temperatura de $150^\circ C$ y la corriente calentada 20, a $107^\circ C$.

Las corrientes 6 y 20 entran a los calentadores 1 y 2, respectivamente, para elevar su temperatura hasta los $800^\circ C$ y posteriormente entrar a la celda de combustible.

La corriente 10 entra al disipador de calor donde se enfría hasta alcanzar una temperatura de $99,61^{\circ}\text{C}$ que es la temperatura de saturación a 1 bar [44]. La corriente 11 entra al condensador 1 y en ella se separa el H_2O del H_2 en las corrientes 13 y 12 respectivamente, las cuales salen del equipo a $99,61^{\circ}\text{C}$ y 1 bar.

El resto del sistema, funciona de manera idéntica a como fue descrito para el sistema SOFC+R.

3.2.3. Sistema PEM

La configuración del sistema PEM es más simple que las presentadas anteriormente, como se puede apreciar en la Figura 3.3. Esto se debe a que la celda que se utiliza en esta configuración es una celda de combustible con membrana de intercambio protónico (PEM) y ésta opera a la misma temperatura que el electrolizador.

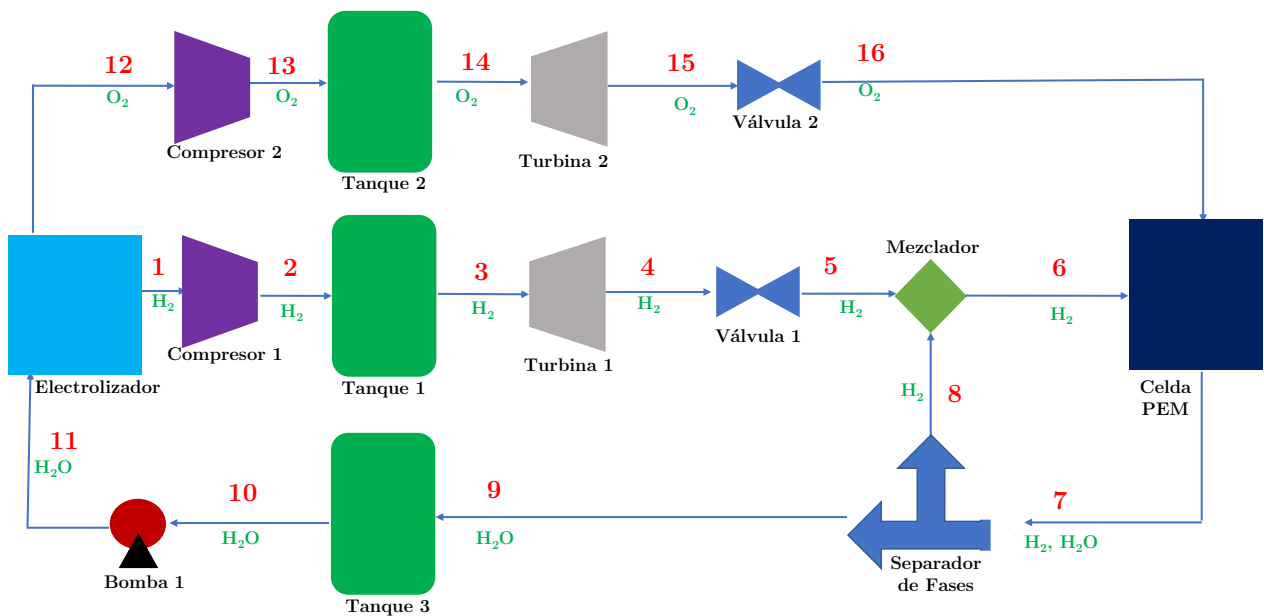


Figura 3.3: Configuración del sistema de almacenamiento utilizando una celda de combustible con membrana de intercambio protónico y electrolizador alcalino.

A grandes rasgos, el proceso es el mismo al caso de las celdas de combustible de óxido sólido: hay un electrolizador que genera H_2 y O_2 , tanques donde se almacenan esas corrientes y una celda que las toma y las transforma en H_2O y potencia eléctrica útil. El agua se almacena y se recircula hacia el electrolizador donde la molécula en la reacción de electrólisis, produciendo H_2 y O_2 , cerrando el ciclo.

Se necesitan compresores para presurizar las corrientes 1 de H_2 y 12 de O_2 desde 9 bar hasta 200 y 17 bar, respectivamente. Con estas presiones, las corrientes gaseosas son almacenadas

en los Tanques 1 y 2, respectivamente. En el proceso de compresión, las corrientes aumentan su temperatura a 196°C la corriente de H₂ y a 96°C la corriente de O₂.

A la salida de ambos tanques, se encuentran las Turbinas 1 y 2, en las cuales se reduce la presión y temperatura de las corrientes gaseosas. La corriente 4 de H₂ sale de la Turbina 2 a una temperatura de 80°C y una presión de 8,95 bar. La corriente 15 de O₂ sale a una temperatura de 80°C y una presión de 8,1 bar. Posteriormente, ambas corrientes se hacen pasar por las Válvula 1 y 2, respectivamente, para reducir su presión hasta 1,4 bar, que es la presión de operación de la celda de combustible. Se configura el par Turbina-Válvula para poder aprovechar la energía térmica que tiene cada corriente al salir del tanque. De poner solo una válvula a la salida de los estanques, el sistema solo habría disminuido la presión mas no la temperatura. Y si se hubieran puesto solamente turbinas, la temperatura habría disminuido por debajo de los 80°C y eso habría implicado poner un equipo de calentamiento, lo cual no es conveniente porque implica más energía externa para el sistema. Para mayor detalle sobre esta configuración, ver Anexo A.2.3.3. Y para más detalle sobre el cambio de temperatura en las válvulas, ver Anexo A.2.3.2.2, sección de Coeficiente de Joule-Thomson.

Las corrientes 5 de H₂ y 16 de O₂ entran a la celda de combustible de intercambio protónico (PEM) a 80°C y 1,4 bar. En el equipo, se produce la oxidación del H₂, donde se produce H₂O y potencia eléctrica que sale del sistema para ser utilizada en la red. En esta reacción agota todo el O₂ y se deja una fracción de 20 % de H₂⁷ para evitar que la presión dentro de los electrodos sea 0 y por tanto, se degraden mecánicamente. Es decir, en la corriente 7 está compuesta de H₂ y H₂O a 80°C y 1,4 bar. Esta corriente se hace pasar por un separador de fases que separa íntegramente cada especie de la otra. Esta división se puede hacer de manera simple porque a esas condiciones de presión y temperatura, el H₂O está en estado de líquido comprimido ⁸ y el H₂ en estado gaseoso, por lo que no se mezclan. La corriente 8 de H₂ y la 9 de H₂O están a 80°C y 1,4 bar.

La corriente 8 de H₂ entra a un mezclador donde se incorpora a la línea de H₂ al mezclarse con la corriente 5. La corriente 6 entra a la celda PEM donde se combustiona.

La corriente 9 de H₂O entra a un Tanque 3. En dicho tanque, el fluido se calienta levemente hasta 84,6°C. Este aumento de la temperatura se realiza por la misma razón que fue explicada para los sistemas SOFC+R y SOFC+Int. Luego, corriente 10 se hace pasar por la Bomba 1 que eleva su presión hasta 9 bar, lo que eleva consigo la temperatura hasta 85°C. Se reitera que el electrolizador opera a 80°C y todos los datos cinéticos están calculados para dicha temperatura. Las discrepancias con los valores reales obtenidos y estos serán discutidos en el Capítulo 6.

Al electrolizador entran la corriente 11 de H₂O a 85°C y 9 bar. Además, entra una potencia eléctrica desde la red eléctrica de 60 MW con los que el equipo realiza la electrólisis del agua, produciendo una corriente de 1 H₂ y corriente 12 de O₂, a 80°C y 9 bar.

⁷Sale 20 % del H₂ del que entró al equipo.

⁸A 1,4 bar, el H₂O tiene una temperatura de saturación de aproximadamente 99,7°C, por lo tanto, a 80°C está fuera de la zona de mezcla húmeda, en la zona de líquido comprimido [44].

3.3. Modelamiento de los equipos electroquímicos

El modelamiento que se muestra a continuación está puesto en paralelo. Es decir, se mostrarán las ecuaciones y los diagramas para la celda de combustible de óxido sólido en contraste con la celda de combustible con membrana de intercambio protónico. De modo que la deducción del modelo se hará para ambas celdas, reparando en los aspectos que las diferencias. Cabe mencionar que el modelo para celda de combustible de óxido sólido se utilizará en los sistemas SOFC+R y SOFC+Int, mientras que el modelo de celda de combustible con membrana de intercambio protónico se usará en el sistema PEM.

3.3.1. Celdas de Combustible

Para el dimensionamiento de las celdas de combustible, la variable de diseño es el voltaje de la celda. El voltaje se define como [45]:

$$V_{FC} = E_N - \eta_{act}^{an} - |\eta_{act}^{cat}| - \eta_{con}^{an} - |\eta_{con}^{cat}| - \Delta V_{ohm} \quad (3.1)$$

donde:

E_N [V]: Potencial de equilibrio de la celda de combustible

η_{act}^{an} [V]: Sobrepotencial de activación del ánodo de la celda de combustible

η_{act}^{cat} [V]: Sobrepotencial de activación del cátodo de la celda de combustible

η_{con}^{an} [V]: Sobrepotencial de concentración del ánodo de la celda de combustible

η_{con}^{cat} [V]: Sobrepotencial de concentración del cátodo de la celda de combustible

ΔV_{ohm} [V]: Resistencia óhmica de la celda de combustible

Y adicionalmente, se puede definir que [45]:

$$\eta_{act} = \eta_{act}^{an} + \eta_{act}^{cat} \quad (3.2)$$

$$\eta_{con} = \eta_{con}^{an} + \eta_{con}^{cat} \quad (3.3)$$

donde:

η_{act} [V]: Sobrepotencial de activación de la celda de combustible

η_{con} [V]: Sobrepotencial de concentración de la celda de combustible

La Ecuación 3.1 es válida tanto para la celda de combustible de combustible con membrana de intercambio protónico como la celda de combustible de óxido sólido. Para calcular el voltaje de celda entonces, se necesitan los términos señalados. Estos son ligeramente diferentes entre celdas debido a que en las celdas ocurren diferentes semi reacciones. De este modo, cuando se defina cada término en específico, se explicitará la diferencia que tiene el dicho término para cada celda.

Por otro lado, se define la densidad de potencia, de unidades $W m^{-2}$, como el producto entre la densidad de corriente y el voltaje de celda [46]:

$$\bar{P} = j \cdot V \quad (3.4)$$

La curva que se observa al graficar el voltaje de una celda con respecto a la densidad de corriente se conoce como 'curva de polarización'. Junto con ello, se grafica la densidad de potencia con respecto a la densidad de corriente. Ambos gráficos desplegados en conjunto permiten estudiar el comportamiento de la celda, al evidenciar el potencial y la densidad de potencia que generan/consumen para un rango de densidades de corrientes. Esta información es relevante ya sea para celdas de combustible (celdas galvánicas) como para los electrolizadores (celdas electrolíticas). Las celdas de combustible, como se mostró en la Ecuación 3.1, extraen energía al sistema desde el estado de equilibrio. Por lo tanto, el voltaje de una celda de combustible es decreciente con respecto a la densidad de corriente. Y debido a lo anterior, la densidad de potencia, alcanza un máximo en algún punto [46]. El modelamiento electroquímico de las celdas de combustible se realiza precisamente para encontrar dicho punto máximo porque representa el punto de máxima densidad de corriente en el cual la celda es capaz de generar la mayor densidad de potencia. En otras palabras, dicho punto representa las condiciones de operación electroquímicas de la celda [46]. De ahí, la relevancia de realizar este modelamiento.

3.3.1.1. Potencial de Nernst E_N

El potencial de Nernst o de equilibrio es el potencial que tiene la celda en su estado inercial, es decir cuando está ocurriendo una reacción en ella. Típicamente, se asume que este voltaje es igual al voltaje de circuito abierto, que corresponde al voltaje de la celda cuando no fluye corriente en su circuito externo. El potencial de Nernst se define como [47]:

$$E_N = \frac{-\Delta G_T^0}{\nu_e F} + \frac{R^* T}{\nu_e F} \ln \left(\frac{\prod_k a_{\text{reactivos},k}}{\prod_l a_{\text{productos},l}} \right) \quad (3.5)$$

donde:

ΔG_T^0 [J mol⁻¹]: Energía libre de Gibbs de la reacción a 1 bar [J]

El término $\frac{-\Delta G_T^0}{\nu_e F}$ se conoce como potencial estándar E_T^0 a la temperatura de operación.

$\prod_k a_{\text{reactivos},k}$: Producto de la actividad de los reactivos

$\prod_l a_{\text{productos},l}$: Producto de la actividad de los productos

Cuando una celda no está conectada a un circuito externo, no hay corriente fluyendo en el sistema, por lo que el voltaje de la celda es igual al voltaje de circuito abierto V_{OC} ⁹. El voltaje de circuito abierto de una celda unitaria típicamente se asume igual al potencial de equilibrio para la reacción global. Esto significa que cualquier proceso irreversible dentro de la celda en el estado de circuito abierto es despreciable, como podrían ser reacciones parásitas entre electrodo y electrolito [47].

3.3.1.2. Sobrepotencial de activación η_{act}

El sobrepotencial de activación de cada electrodo de una celda se define con la Ecuación de Butler-Volmer [47]. Es decir, esta ecuación se debe aplicar por separado en tanto en cátodo

⁹La sigla OC viene del inglés *Open Circuit*, que significa Circuito Abierto

como en ánodo. La ecuación se expresa como sigue:

$$j = j_0 \left(\exp \left(\frac{\alpha_1 F \eta_{act}}{R^* T} \right) - \exp \left(\frac{-\alpha_2 F \eta_{act}}{R^* T} \right) \right) \quad (3.6)$$

donde:

j [$A \text{ m}^{-2}$]: Densidad de corriente del electrodo

j_0 [$A \text{ m}^{-2}$]: Densidad de corriente de intercambio

α_1 [-]: Coeficiente de transferencia de carga de la reducción

α_2 [-]: Coeficiente de transferencia de carga de la oxidación

η_{act} [V]: Sobrepotencial de activación del electrodo

Y la densidad de corriente de intercambio se define como [47]:

$$j_0 = A \exp \left(\frac{-E_{act}}{R^* T} \right) \quad (3.7)$$

donde:

A [$A \text{ m}^{-2}$]: Factor pre-exponencial

E_{act} [$J \text{ mol}^{-1}$]: Energía de activación

Existen modelos más complejos para cada celda de este estudio, en las que la densidad de corriente tiene una expresión diferente. Estas expresiones será con las que se trabajará y son las que se señalan a continuación:

SOFC [48]

$$j_{0,cat} = 7 \cdot 10^8 \left(\frac{p_{O_2}^{Bulk}}{P} \right)^{0,25} \exp \left(\frac{-120.000}{R^* T} \right) \quad (3.8)$$

$$j_{0,an} = 5,5 \cdot 10^8 \left(\frac{p_{H_2}^{Bulk}}{P} \right) \left(\frac{p_{H_2O}^{Bulk}}{P} \right) \exp \left(\frac{-100.000}{R^* T} \right) \quad (3.9)$$

donde:

P [Pa]: Presión total del sistema

$p_{O_2}^{Bulk}$ [Pa]: Presión parcial de oxígeno en el *bulk*¹⁰ del cátodo

$p_{H_2}^{Bulk}$ [Pa]: Presión parcial de hidrógeno en el *bulk* del ánodo

$p_{H_2O}^{Bulk}$ [Pa]: Presión parcial de agua en el *bulk* del ánodo

PEMFC [49]

$$j_{0,cat} = 10^{-5} \exp \left(\frac{-28.300}{R^* T} \right) \quad (3.10)$$

$$j_{0,an} = 0,1 \exp \left(\frac{-34.600}{R^* T} \right) \quad (3.11)$$

¹⁰Seno del fluido. Para más detalles sobre este concepto ver el Anexo 3.3.1.3

Como se puede apreciar en la Ecuación 3.6, no existe una expresión algebraica para η_{act} , por lo que se tienen dos alternativas: resolverlo implícitamente de manera numérica o tomar supuestos para simplificar la ecuación y poder encontrar una expresión algebraica simplificada. Se opta por la segunda alternativa, para simplificar el modelo. Asumiendo que $\alpha_1 = \alpha_2$ se obtiene la expresión denominada *Aproximación de Seno Hiperbólico* de la Ecuación de Butler-Volmer [47], la que se muestra a continuación:

$$\eta_{act} = \frac{R^*T}{\alpha F} \sinh^{-1} \left(\frac{j}{2j_0} \right) \quad (3.12)$$

La Ecuación 3.12 es válida tanto para el cátodo como el ánodo y será utilizada en el modelo para las SOFCs y PEMFCs.

3.3.1.3. Sobrepotencial de concentración η_{con}

El sobrepotencial de concentración se puede escribir como [50]:

$$\eta_{con} = E_N^S - E_N^B \quad (3.13)$$

donde:

E_N^S [V]: Potencial de equilibrio de la celda de combustible en la superficie del electrodo

E_N^B [V]: Potencial de equilibrio de la celda de combustible en el *bulk*¹¹ de un electrodo

En la Ecuación 3.13 se hace la distinción entre *bulk* y la superficie del electrodo, pues en la superficie del electrodo se encuentran las propiedades catalíticas del material. Entonces, esta última es donde se produce la semirreacción. Luego, como se produce difusión de los reactivos a través del electrodo, el término de sobrepotencial de equilibrio en el *bulk* modela dicho efecto.

El potencial de equilibrio fue definido en la Ecuación 3.5. Para este modelo, se asume que el grosor del electrodo, tanto cátodo como ánodo, es lo suficientemente pequeño tal que no se aprecia un perfil de temperatura en él. Por lo que se puede decir que $T_S \approx T_B \equiv T$ y esto implica que $E_{std}^S \approx E_{std}^B$. De este modo, al aplicar la Ecuación 3.5 en la Ecuación 3.13, se obtiene:

$$\eta_{con} = \frac{R^*T}{\nu_e F} \left(\ln \frac{\prod a_{reactivos}^S}{\prod a_{productos}^S} - \ln \frac{\prod a_{reactivos}^B}{\prod a_{productos}^B} \right) \quad (3.14)$$

Por otro lado, es necesario clarificar la geometría con la que se trabajará en esta sección, para entender las ecuaciones que se deducirán.

En las Figuras 3.4 y 3.5 se muestran las geometrías y puntos de referencia para los electrodos de las SOFCs y PEMFCs, respectivamente.

¹¹Del inglés. Su significado es *seno*, que hace referencia a una zona central de un material en la que no se aprecian efectos de borde [51].

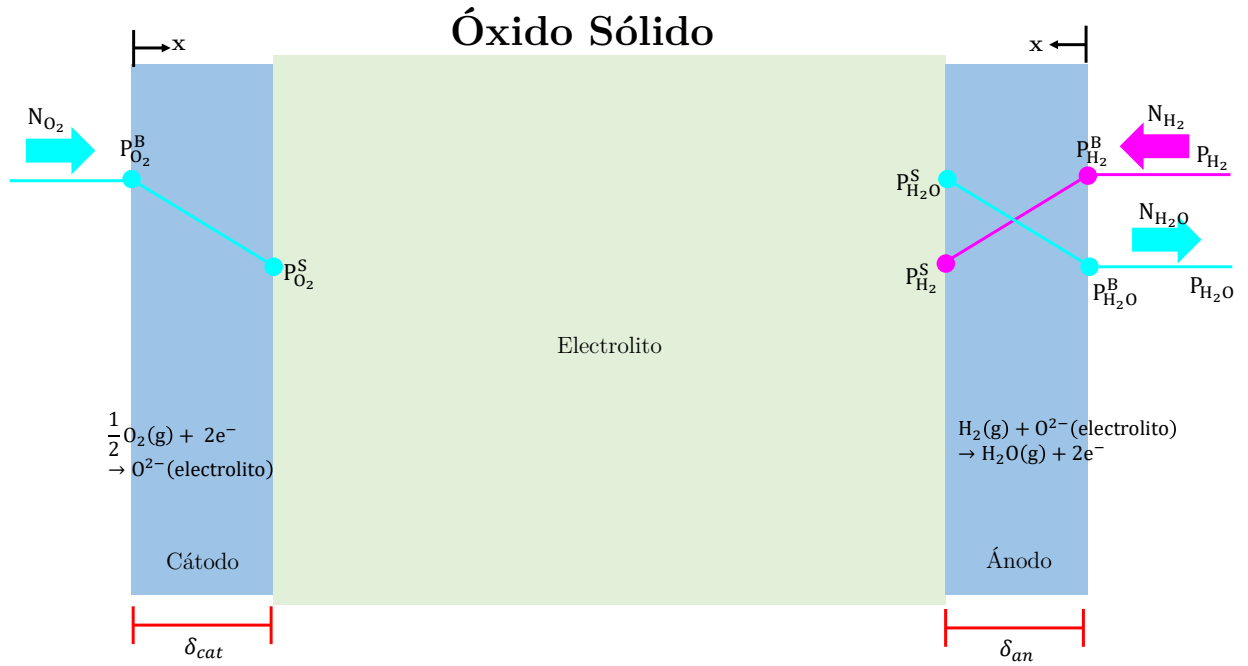


Figura 3.4: Geometría y punto de referencia para ambos electrodos en la celda de combustible de óxido sólido.

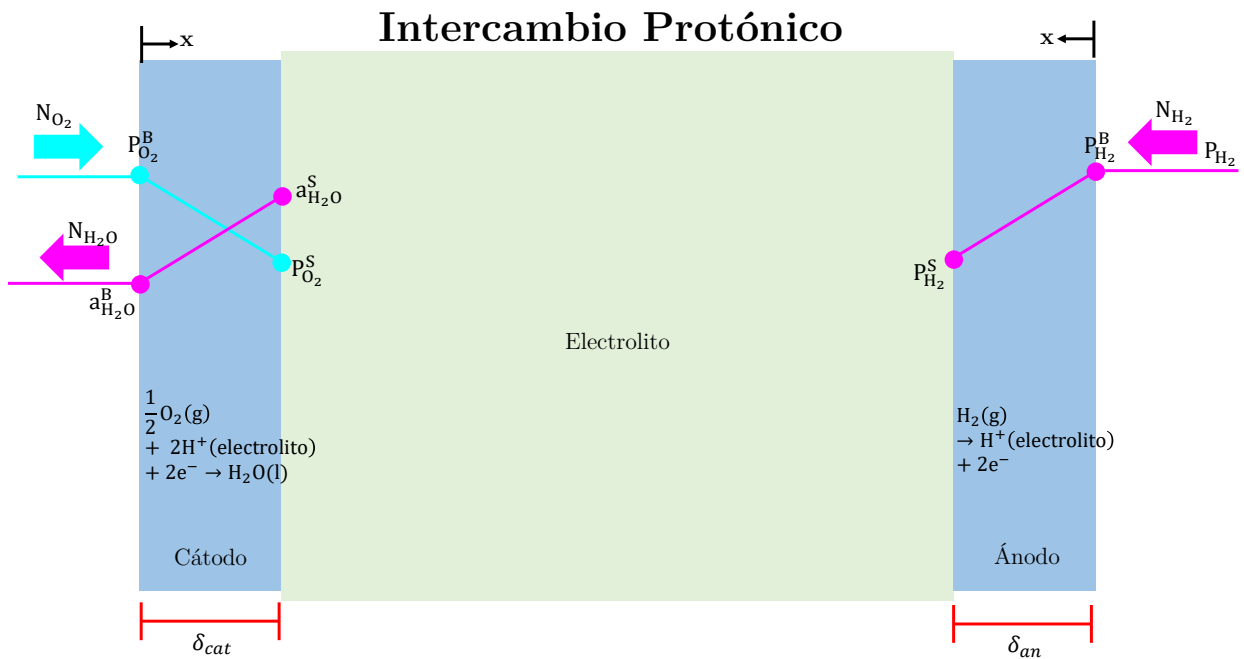
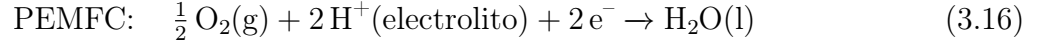
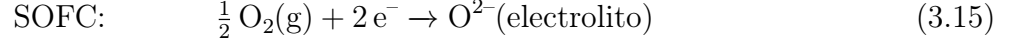


Figura 3.5: Geometría y punto de referencia para ambos electrodos en la celda de combustible con membrana intercambio protónico.

3.3.1.3.1 Cátodo

Luego, queda plantear el sobrepotencial para cada caso. Las semirreacciones catódicas para cada celda son como sigue [48], [49]:



Se puede notar que para ambos casos, el sobrepotencial es el mismo, por lo que se planteará una sola vez. Aplicando la Ecuación 3.5 para el *bulk* y la superficie en cada celda, se obtiene:

$$\text{SOFC y PEMFC: } E_N^B = E_{std}^B + \frac{R^*T_B}{\nu_e F} \ln((p_{O_2}^B)^{\frac{1}{2}}) \quad (3.17)$$

$$\text{SOFC y PEMFC: } E_N^S = E_{std}^S + \frac{R^*T_S}{\nu_e F} \ln((p_{O_2}^S)^{\frac{1}{2}}) \quad (3.18)$$

Aplicando las Ecuaciones 3.17 y 3.18 en la Ecuación 3.14, se obtiene:

$$\eta_{con}^{cat} = \frac{R^*T}{\nu_e F} \frac{1}{2} \ln\left(\frac{p_{O_2}^S}{p_{O_2}^B}\right) \quad (3.19)$$

Se debe encontrar una expresión para actividad en la superficie de cada especie, pues las especies se transportan a través del electrolito desde el *bulk* hasta la superficie, donde se producirá la semirreacción. Este procedimiento se realizará para todos los electrodos de ambas celdas. En el caso del cátodo, es relevante estudiar la actividad del gas oxígeno, en particular, su presión.

Haciendo un balance de masa diferencial para el oxígeno en el cátodo de la celda, se obtiene:

$$\frac{1}{R^*T} \frac{\partial p_{O_2}}{\partial t} = \frac{\partial \dot{N}_{O_2}}{\partial x} - r_{O_2} \quad (3.20)$$

Para dicho balance se toman los siguientes supuestos:

1. El sistema tiene solamente la dirección x como eje característico donde ocurre la difusión de las especies, por simplicidad del modelo.
2. El sistema trabaja en estado estacionario¹². Esto implica que $\frac{\partial p_{O_2}}{\partial t} = 0$.
3. No se produce reacción en el volumen de control, pues la zona donde se encuentran las propiedades catalíticas es la superficie, de modo que la cinética de reacción dentro del electrodo es despreciable. Esto implica que $r_{O_2} = 0$.

Estos supuestos son igualmente válidos para la SOFC y la PEMFC. Considerando los supuestos en la Ecuación 3.20, queda como:

$$\frac{\partial \dot{N}_{O_2}}{\partial x} = 0 \quad (3.21)$$

¹²En inglés se conoce como *Steady State*, abreviado como *st st*. Se usará esta sigla en lo sucesivo.

Posteriormente se supone que en el volumen de control, el sistema está regido por la Ley de Fick. De modo que se tiene [51]:

$$\dot{N}_{O_2} = \frac{-D_{\text{eff}}}{R^*T} \frac{\partial p_{O_2}}{\partial x} \quad (3.22)$$

donde:

D_{eff} [$\text{cm}^2 \text{s}^{-1}$]: Difusividad efectiva de la especie en cuestión en un medio

Difusividad efectiva

La difusividad efectiva de una especie g en un material l se define por [51]:

$$\frac{1}{D_{\text{eff},l}} = \frac{\tau_l}{\varepsilon_l} \left(\frac{1}{D_K^{g,l}} + \frac{1}{D_M^{g,l}} \right) \quad (3.23)$$

donde:

τ_l [-]: Tortuosidad del material l

ε_l [-]: Porosidad del material l

$D_K^{g,l}$ [$\text{cm}^2 \text{s}^{-1}$]: Coeficiente de difusión de Knudsen de la especie g en el material l

$D_M^{g,l}$ [$\text{cm}^2 \text{s}^{-1}$]: Coeficiente de difusión molar de la especie g en el material l

En el caso de la PEMFC, las expresiones de la difusividad efectiva tienen una forma específica y en las mismas unidades que el caso anterior, $\text{cm}^2 \text{s}^{-1}$, que se encontró en el estudio de J. Zhang *et. al* (Electrochim. Acta, 2006) [49]:

$$D_{\text{eff}}^{H_2} = 3,1 \cdot 10^{-3} \exp\left(\frac{-2,8 \cdot 10^3}{T}\right) \quad (3.24)$$

$$D_{\text{eff}}^{O_2} = 4,1 \cdot 10^{-4} \exp\left(\frac{-2,6 \cdot 10^3}{T}\right) \quad (3.25)$$

El coeficiente de difusión de Knudsen se puede escribir como [51]:

$$D_K^{k,l} = \chi_g \cdot d_{\text{poro},l} T^{0,5} \quad (3.26)$$

donde:

χ_g [$\text{m} (\text{s K}^{0,5})^{-1}$]: Coeficiente específico de la especie g . Se explicita en la Tabla A.2

$d_{\text{poro},l}$ [m]: Diámetro del poro en el material l . Se detallan en la Tabla A.2

Por último el coeficiente de difusión molar está dado por la expresión [51]:

$$D_M^{g,l} = \xi_g \cdot T^{1,75} \quad (3.27)$$

donde:

ξ_g [$\text{m}^2 (\text{s K}^{1,75})^{-1}$]: Coeficiente específico para la especie g . Estos coeficientes se detallan en la Tabla A.3

Retomando la Ecuación 3.22 y reemplazándola en la Ecuación 3.21, se tiene:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{-D_{\text{eff}}}{R^*T} \frac{\partial p_{O_2}}{\partial x} \right) = 0 \quad (3.28)$$

$$\frac{\partial^2 p_{O_2}}{\partial x^2} = 0 \quad (3.29)$$

La Ecuación 3.29 tiene una solución general de la forma:

$$y(x) = ax + b \quad (3.30)$$

Para resolver esta ecuación diferencial son necesarias dos condiciones. La primera condición que se puede plantear es que en el *bulk* del cátodo, la presión corresponde a la presión del *Bulk*. Esta condición es equivalente a asumir que en la capa límite en torno a cátodo es despreciable, por lo que la presión en ambos puntos es igual. Es decir:

$$p_{O_2}(x = 0) = p_{O_2}^B \quad (3.31)$$

Esta condición es válida tanto para la SOFC como la PEMFC. Y la segunda condición que se puede plantear es que el flux de oxígeno que llega a la superficie catalítica del electrodo, se transforma completamente en corriente. De este modo, se obtiene la Ley de Faraday para el flux de oxígeno, que se expresa como:

$$\dot{N}_{O_2}(x = \delta_{cat}) = \frac{j}{\nu_e F} \quad (3.32)$$

Reemplazando la condición 3.31 en la solución propuesta y la condición 3.32 en la Ecuación 3.22 se obtiene que:

$$b = p_{O_2}^B \quad (3.33)$$

$$a = \frac{-j}{\frac{\nu_e F D_{eff}}{R^* T}} \quad (3.34)$$

De este modo, la solución de la Ecuación 3.21 es:

$$p_{O_2}(x) = \frac{-j}{\frac{\nu_e F D_{eff}}{R^* T}} x + p_{O_2}^B \quad (3.35)$$

Luego, se sabe que para la presión de oxígeno en la superficie se define como:

$$p_{O_2}^S \equiv p_{O_2}(x = \delta_{cat}) = \frac{-j}{\frac{\nu_e F D_{eff}}{R^* T}} \delta_{cat} + p_{O_2}^B \quad (3.36)$$

Combinando la Ecuación 3.36 en con la Ecuación 3.19 y reordenando los términos, resulta:

$$\eta_{con}^{cat} = \frac{R^* T}{\nu_e F} \frac{1}{2} \ln \left(\frac{\frac{-j}{\frac{\nu_e F D_{eff}}{R^* T \delta_{cat}}} + p_{O_2}^B}{p_{O_2}^B} \right) \quad (3.37)$$

Reordenando los términos y definiendo la corriente límite de oxígeno, se obtiene:

$$\eta_{con}^{cat} = \frac{R^* T}{\nu_e F} \frac{1}{2} \ln \left(1 - \frac{j}{j_{L,O_2}} \right) \quad (3.38)$$

$$j_{L,O_2} = \frac{\nu_e F D_{eff} p_{O_2}^B}{R^* T \delta_{cat}} \quad (3.39)$$

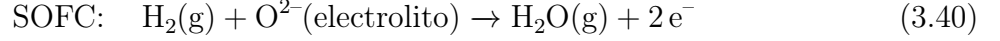
donde:

j_{L,O_2} [$A m^{-2}$]: Corriente límite del oxígeno

Las Ecuaciones 3.38 y 3.39 son válidas tanto para la SOFC como para la PEMFC.

3.3.1.3.2 Ánodo

Las semirreacciones anódicas para cada celda son [48], [49]:



Puede notarse que para este caso, las cinéticas serán distintas. Incluso, en el caso de la SOFC, la actividad del agua no es despreciable, pues está en estado gaseoso.

Comenzando desde la Ecuación 3.14, considerando la geometría mostrada en las Figuras 3.4 y 3.5 y aplicado a la reacción anódica de las SOFC y PEMFC por separado, resulta:

$$\text{SOFC: } V_{con}^{an} = \frac{R^*T}{\nu_e F} \ln \left(\frac{\frac{p_{H_2}^S}{p_{H_2}^B}}{\frac{p_{H_2O}^S}{p_{H_2O}^B}} \right) \quad (3.42)$$

$$\text{PEMFC: } V_{con}^{an} = \frac{R^*T}{\nu_e F} \ln \left(\frac{p_{H_2}^S}{p_{H_2}^B} \right) \quad (3.43)$$

Hay que encontrar expresiones para $p_{H_2}^S$ en la SOFC y PEMFC y una expresión para $p_{H_2O}^S$ para la SOFC. El fundamento es el mismo explicado en el caso del cátodo: existe un transporte por difusión a través del ánodo desde el bulk hasta la superficie catalítica. Se comienza haciendo balances de masa en el volumen de control que es el ánodo de cada celda, lo que queda como:

$$\text{SOFC y PEMFC: } \frac{1}{R^*T} \frac{\partial p_{H_2}}{\partial t} = \frac{\partial N_{H_2}}{\partial x} - r_{H_2} \quad (3.44)$$

$$\text{SOFC: } \frac{1}{R^*T} \frac{\partial p_{H_2O}}{\partial t} = \frac{\partial N_{H_2O}}{\partial x} + r_{H_2O} \quad (3.45)$$

Para los balances se toman los mismos supuestos que en el caso del cátodo, los cuales son:

1. El sistema tiene solamente la dirección x como eje característico.
2. El sistema trabaja en estado estacionario.
3. No se produce reacción en el volumen de control.

Por lo que las ecuaciones quedan como:

$$\text{SOFC y PEMFC: } \frac{\partial N_{H_2}}{\partial x} = 0 \quad (3.46)$$

$$\text{SOFC: } \frac{\partial N_{H_2O}}{\partial x} = 0 \quad (3.47)$$

Asumiendo que en el volumen de control existe transporte difusivo regido por la Ley de Fick [51], se tiene:

$$\text{SOFC: } \dot{N}_{H_2} = \frac{D_{eff}}{R^*T} \frac{\partial p_{H_2}}{\partial x} \quad (3.48)$$

$$\text{SOFC: } \dot{N}_{H_2O} = \frac{-D_{eff}}{R^*T} \frac{\partial p_{H_2O}}{\partial x} \quad (3.49)$$

$$\text{PEMFC: } \dot{N}_{H_2} = \frac{-D_{eff}}{R^*T} \frac{\partial p_{H_2}}{\partial x} \quad (3.50)$$

Reemplazando las Ecuaciones 3.48 y 3.50 en la Ecuación 3.46 y la Ecuación 3.49 en la Ecuación 3.47, resulta:

$$\text{SOFC y PEMFC: } \frac{\partial^2 p_{H_2}}{\partial x^2} = 0 \quad (3.51)$$

$$\text{SOFC: } \frac{\partial^2 p_{H_2O}}{\partial x^2} = 0 \quad (3.52)$$

Y como se habían mencionado en la deducción para el cátodo, estas ecuaciones diferenciales tienen una solución de la forma mostrada en la Ecuación 3.30. Las condiciones que se definen para ambos sistemas son:

Condiciones de Dirichlet

$$\text{SOFC y PEMFC: } P_{H_2}(x=0) = P_{H_2}^B \quad (3.53)$$

$$\text{SOFC: } P_{H_2O}(x=0) = P_{H_2O}^B \quad (3.54)$$

Condiciones de Neumann

$$\text{SOFC: } \frac{D_{eff}}{R^*T} \frac{\partial p_{H_2}}{\partial x} = \frac{j}{\nu_e F} \quad (3.55)$$

$$\text{SOFC: } \frac{-D_{eff}}{R^*T} \frac{\partial p_{H_2O}}{\partial x} = \frac{j}{\nu_e F} \quad (3.56)$$

$$\text{PEMFC: } \frac{-D_{eff}}{R^*T} \frac{\partial p_{H_2}}{\partial x} = \frac{j}{\nu_e F} \quad (3.57)$$

Aplicando las condiciones de Dirichlet y de Neumann respectivamente en las Ecuaciones 3.51 y 3.52 y conociendo la forma de la solución de dichas ecuaciones diferenciales, finalmente se obtiene:

$$\text{SOFC: } P_{H_2}(x) = \frac{j}{\nu_e F D_{eff}} x + P_{H_2}^B \quad (3.58)$$

$$\text{SOFC: } P_{H_2O}(x) = \frac{-j}{\nu_e F D_{eff}} x + P_{H_2O}^B \quad (3.59)$$

$$\text{PEMFC: } P_{H_2}(x) = \frac{-j}{\nu_e F D_{eff}} x + P_{H_2}^B \quad (3.60)$$

Posteriormente, se define la presión de cada especie en la superficie como:

$$\text{SOFC: } P_{H_2}^S \equiv P_{H_2}(x = \delta_{an}) = \frac{j}{\nu_e F D_{eff}} \delta_{an} + P_{H_2}^B \quad (3.61)$$

$$\text{SOFC: } P_{H_2O}^S \equiv P_{H_2O}(x = \delta_{an}) = \frac{-j}{\nu_e F D_{eff}} \delta_{an} + P_{H_2O}^B \quad (3.62)$$

$$\text{PEMFC: } P_{H_2}^S \equiv P_{H_2}(x = \delta_{an}) = \frac{-j}{\nu_e F D_{eff}} \delta_{an} + P_{H_2}^B \quad (3.63)$$

Reemplazando las Ecuaciones 3.61 y 3.62 en la Ecuación 3.42 y la Ecuación 3.63 en la Ecuación 3.44, se obtiene:

$$\text{SOFC: } \eta_{con}^{an} = \frac{R^*T}{\nu_e F} \ln \left(\frac{\frac{\frac{j}{\nu_e F D_{eff}} + P_{H_2}^B}{R^*T \delta_{an}}}{p_{H_2}^B}}{\frac{\frac{-j}{\nu_e F D_{eff}} + P_{H_2O}^B}{R^*T \delta_{an}}}{p_{H_2O}^B}} \right) \quad (3.64)$$

$$\text{PEMFC: } \eta_{con}^{an} = \frac{R^*T}{\nu_e F} \ln \left(\frac{\frac{-j}{\nu_e F D_{eff}} + P_{H_2}^B}{p_{H_2}^B}}{\frac{-j}{\nu_e F D_{eff}} + P_{H_2O}^B}} \right) \quad (3.65)$$

Reordenando los términos y definiendo la corriente límite para cada especie, resulta:

$$\text{SOFC: } \eta_{con}^{an} = \frac{R^*T}{\nu_e F} \ln \left(\frac{1 + \frac{j}{j_{L,H_2}}}{1 - \frac{j}{j_{L,H_2O}}} \right) \quad (3.66)$$

$$\text{PEMFC: } \eta_{con}^{an} = \frac{R^*T}{\nu_e F} \ln \left(1 - \frac{j}{j_{L,H_2}} \right) \quad (3.67)$$

donde, las corrientes límites son:

$$\text{SOFC: } j_{L,H_2} = \frac{p_{H_2}^B \nu_e F D_{eff}^{H_2}}{R^*T \delta_{an}} \quad (3.68)$$

$$\text{SOFC: } j_{L,H_2O} = \frac{p_{H_2O}^B \nu_e F D_{eff}^{H_2O}}{R^*T \delta_{an}} \quad (3.69)$$

$$\text{PEMFC: } j_{L,H_2} = \frac{p_{H_2}^B \nu_e F D_{eff}^{H_2}}{R^*T \delta_{an}} \quad (3.70)$$

Recapitulando, las ecuaciones que se tienen para el sobrepotencial de concentración son:

SOFC

$$\eta_{con}^{cat} = \frac{R^*T}{\nu_e F} \frac{1}{2} \ln \left(1 - \frac{j}{j_{L,O_2}} \right)$$

$$\eta_{con}^{an} = \frac{R^*T}{\nu_e F} \ln \left(\frac{1 + \frac{j}{j_{L,H_2}}}{1 - \frac{j}{j_{L,H_2O}}} \right)$$

PEMFC

$$\eta_{con}^{cat} = \frac{R^*T}{\nu_e F} \frac{1}{2} \ln \left(1 - \frac{j}{j_{L,O_2}} \right)$$

$$\eta_{con}^{an} = \frac{R^*T}{\nu_e F} \ln \left(1 - \frac{j}{j_{L,H_2}} \right)$$

3.3.1.4. Resistencia Óhmica ΔV_{ohm}

La resistencia óhmica corresponde a la oposición que tiene un compuesto o material a que fluya corriente a través de sí [52]. Los electrodos, el electrolito y el separador son los

principales factores que contribuyen en la resistencia óhmica de una celda. La resistencia óhmica se define como [52]:

$$\Delta V_{\text{omh}} = I \sum_l R_l \quad (3.71)$$

donde:

I [A]: Corriente que fluye por la celda.

R_l [Ω]: Resistencia del material l que pertenece al sistema en cuestión.

La resistencia de un material está dada por la expresión general [52]:

$$R = \rho \frac{l}{A} \quad (3.72)$$

donde:

ρ [Ω m]: Resistividad de un material

l [m]: Largo de un material

A [m^2]: Área del material

La resistencia de la celda R_T está dada por:

SOFC [48]

$$R_T = R_{\text{cat}} + R_{\text{an}} + R_{\text{elec}} \quad (3.73)$$

donde:

R_{cat} [Ω]: Resistencia del cátodo

R_{an} [Ω]: Resistencia del ánodo

R_{elec} [Ω]: Resistencia del electrolito

PEMFC [49]

$$R_T = R_{\text{cat}} + R_{\text{an}} + R_{\text{nafion}} + R_{\text{grafito}} + R_{\text{acero}} \quad (3.74)$$

donde:

R_{nafion} [Ω]: Resistencia del electrolito de Nafion®

R_{grafito} [Ω]: Resistencia del grafito

R_{acero} [Ω]: Resistencia del acero

La resistividad es un valor complejo de encontrar en la bibliografía. Sin embargo, la conductividad σ es más común de hallar. La resistividad y la conductividad están relacionadas entre sí, por la siguiente expresión [53]:

$$\rho = \frac{1}{\sigma} \quad (3.75)$$

Donde:

σ [S m^{-1}]: Conductividad de un medio. En particular, del electrolito.

Considerando la Ecuación 3.75, la resistividad es el inverso de la conductividad, por lo que se puede definir las conductividades de cada material como sigue:

SOFC [48]

$$\sigma_{material} = A \exp\left(\frac{B}{T}\right) \quad (3.76)$$

PEM [54], [49], [55], [56]

$$\sigma_{electrodos} = 2 \cdot 10^9 T^{-0,929} \quad (3.77)$$

$$\sigma_{Nafion} = 58,4 \exp\left(\frac{-893,6}{T}\right) \quad (3.78)$$

$$\sigma_{grafito} = 1,15 \cdot 10^5 \quad (3.79)$$

$$\sigma_{acero} = 1,45 \cdot 10^6 \quad (3.80)$$

Los términos generalizados en la Ecuación 3.76, las unidades y valores se encuentran señaladas en la Tabla A.4. Para el caso de los términos de las Ecuaciones 3.77, 3.78, 3.79, 3.80 están en unidades de $S \text{ m}^{-1}$.

Como se señaló anteriormente, los sistemas SOFC+R, SOFC+Int y PEMFC utilizan un electrolizador alcalino, por lo que el modelamiento que se realizará a continuación será válido para los 3 sistemas.

3.3.2. Electrolizador

Para el dimensionamiento de un electrolizador, la variable de diseño es el voltaje de esta celda. El voltaje se define como [52]:

$$V_{elz} = E_N + \eta_{act} + \eta_{con} + \Delta V_{ohm} \quad (3.81)$$

donde:

E_N [V]: Potencial de Nernst del electrolizador

η_{act} [V]: Sobrepotencial de activación del electrolizador

η_{con} [V]: Sobrepotencial de concentración del electrolizador

ΔV_{ohm} [V]: Es la resistencia óhmica del electrolizador

Cada uno de estos voltajes corresponde a una función de diversos parámetros tanto de operación, como físicos de la celda. Es por esto que la Ecuación 3.81 se escribirá de la forma en que fue planteada y cada término de ella será explorado por separado.

También se modelará este sistema, utilizando la Ecuación 3.4 para calcular la densidad de potencia.

En el caso del electrolizador, corresponde a una celda electrolítica, que requiere de energía para operar. Como puede verse en la Ecuación 3.81, el voltaje de la celda es creciente con

respecto a la densidad de corriente, entendiéndose que cada término de dicha ecuación es una función de la densidad de corriente. En este caso, ambas curvas de polarización que se obtendrán será crecientes, por lo que no habrá un máximo en la curva de densidad de potencia [46]. Para poder encontrar las condiciones de operación electroquímicas, se necesitarán supuestos adicionales que serán mencionados más adelante.

3.3.2.1. Potencial de Nernst E_N

El potencial de Nernst fue definido en la Ecuación 3.5. Adaptándolo a la reacción que ocurre en el electrolizador, queda como [52]:

$$E_{N,T} = E_{std,T}^0 - \frac{R^*T}{2F} \ln \left(\frac{a_{H_2O,KOH}}{p_{H_2} \sqrt{p_{O_2}}} \right) \quad (3.82)$$

donde:

E_{std}^0 [V]: Es el potencial estándar de la celda a la temperatura T. A 298 K tiene un valor de 1,229 V [52]

p_{H_2} [Pa] : Presión parcial de hidrógeno

p_{O_2} [Pa]: Presión parcial de oxígeno

$a_{H_2O,KOH}$ [$Pa^{3/2}$]: Actividad del agua en la solución del electrolito

3.3.2.2. Sobrepotencial de activación η_{act}

La cinética de los electrodos se describe con el sobrepotencial de activación. Éste corresponde a la energía necesaria para que las semireacciones ocurran en cada uno de los electrodos, lo que permite la transferencia de carga entre electrodos y especies químicas. El sobrepotencial de activación de la celda es una combinación del sobrepotencial de activación en el cátodo y en el ánodo, como se muestra a continuación [52]:

$$\eta_{act} = \eta_{act}^{an} + \eta_{act}^{cat} \quad (3.83)$$

donde:

η_{act}^{an} [V]: Sobrepotencial de activación del ánodo del electrolizador.

η_{act}^{cat} [V]: Sobrepotencial de activación del cátodo del electrolizador.

Asumiendo que el sobrepotencial de activación del electrolizador es mayor a 200 mV, el primer término exponencial de la Ecuación 3.6 es mayor en magnitud que el segundo, por lo que se puede despreciar [47]. Lo anterior es lo mismo que asumir que existe solo una etapa limitante en el mecanismo de reacción. Y aplicando estado transiente en cada electrodo, se obtiene la *Ecuación de Tafel*, válida para cátodo y ánodo [52]:

$$\eta_{act} = \frac{R^*T}{\alpha F} \ln \left(\frac{j}{j_0} \right) \quad (3.84)$$

donde:

α [-]: Coeficiente de transferencia de carga del electrodo en cuestión

j [A m^{-2}]: Densidad de corriente de la celda

j_0 [A m^{-2}]: Densidad de corriente efectiva de intercambio del electrodo en cuestión

Y la corriente de transferencia efectiva de intercambio de cada electrodo se define como [52]:

$$j_0 = \gamma_{M,elec} \exp\left(\frac{-\Delta G_c}{R^*} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{ref}}\right)\right) \cdot j_{0,ref} \quad (3.85)$$

donde:

γ_M [-]: Factor de rugosidad del electrodo en cuestión

$j_{0,ref}$ [A m^{-2}]: Densidad de corriente de intercambio a la temperatura de referencia T_{ref} .

ΔG_C [J mol^{-1}]: Energía libre de activación de la semirreacción asociada a cada electrodo.

T_{ref} [K]: Temperatura de referencia del estudio. 298 K.

Ambos electrodos están cubiertos por burbujas, ya sea porque entran a él como reactivo o porque se producen en él como producto. Pero el hecho de que exista cobertura de burbujas afecta en el sobrepotencial de los electrodos pues les genera un efecto de aislamiento, haciendo que el electrodo se inactive. Este efecto se puede agregar al sobrepotencial de celda según [52]:

$$V_{act} = \frac{R^*T}{\alpha F} \ln\left(\frac{j}{j_0(1 - \Theta_{elec})}\right) \quad (3.86)$$

donde:

Θ_{elec} [-]: Fracción de cobertura de burbujas en la superficie del electrodo en cuestión.

La fracción de cobertura de burbujas se puede calcular según la siguiente expresión [57]:

$$\Theta = \left(\left(-97,23 + 182 \cdot \frac{T}{T_{ref}} \right) - 84 \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^2 \right) \cdot \left(\frac{j}{j_{lim}} \right)^{0,3} \cdot \left(\frac{P}{P - P_{sat,H_2O-KOH}(T)} \right) \quad (3.87)$$

donde:

j_{lim} [A m^{-2}]: Corriente límite cuando se tiene 100 % de cobertura de burbujas. 300 kA m^{-2} [52].

$P_{sat,H_2O-KOH}(T)$ [Pa]: Presión de vapor del agua en la solución del electrolito a la temperatura de operación.

En la Tabla A.6 se presentan los valores utilizados para calcular el sobrepotencial de activación.

3.3.2.3. Sobrepotencial de concentración η_{con}

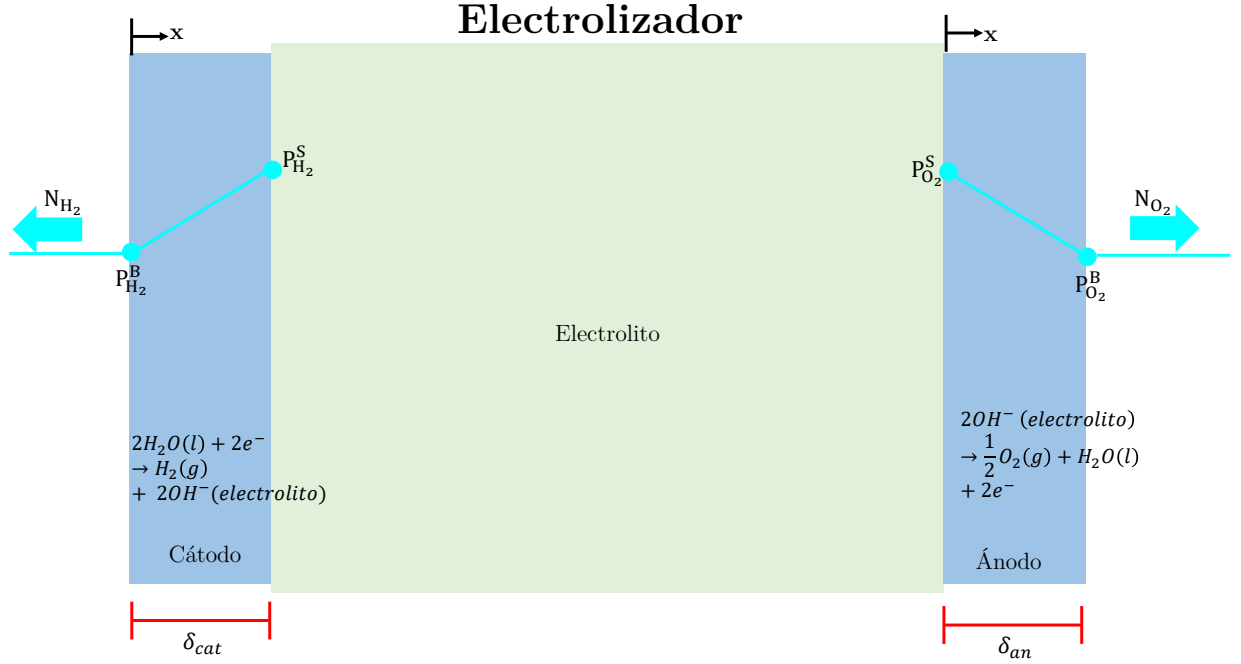


Figura 3.6: Geometría y puntos de referencia para el electrolizador

En la Figura 3.6 se muestra la geometría y los puntos de referencias con los que se hará el modelo del sobrepotencial de concentración.

El sobrepotencial de concentración ocurre porque existe un gradiente de concentración en los reactantes en el entorno del electrodo. Este gradiente de concentración ocurre debido a que las reacciones han ocurrido en los electrodos, por lo que parte de los reactivos se ha consumido. El flujo de materia a través de los electrodos porosos se puede modelar utilizando la Ley de Fick. Para calcular el sobrepotencial asociado al fenómeno difusivo, se combinará la Ley de Fick con la ecuación de Nernst como sigue:

$$\eta_{con} = \eta_{con}^{an} + \eta_{con}^{cat} \quad (3.88)$$

$$\eta_{con}^{an} = \frac{R^*T}{4F} \ln \left(\frac{P_{O_2}^S}{P_{O_2}^B} \right) \quad (3.89)$$

$$\eta_{con}^{cat} = \frac{R^*T}{2F} \ln \left(\frac{P_{H_2}^S}{P_{H_2}^B} \frac{a_{H_2O}^B}{a_{H_2O}^S} \right) \quad (3.90)$$

donde:

$P_{O_2}^S$ [bar]: Presión del O_2 en la superficie del ánodo

$P_{O_2}^B$ [bar]: Presión del O_2 en el seno del electrolito del lado del ánodo

$P_{H_2}^S$ [bar]: Presión del H_2 en la superficie del cátodo

$P_{H_2}^B$ [bar]: Presión del H_2 en el seno del electrolito del lado del cátodo

$a_{H_2O}^S$ [bar]: Actividad del H_2O en la superficie del cátodo

$a_{H_2O}^B$ [bar]: Actividad del H_2O en el seno del electrolito del lado del cátodo

Como el H₂O está en estado líquido, se asume que su actividad es 1 tanto para la superficie como para el seno del electrolito. Esta deducción es idéntica a como se realizó para el caso de las celdas de combustible.

El flux de cada especie se determina según la Ecuación 3.22. Para las especies O₂ en el ánodo y H₂ en el cátodo, queda:

$$N_{H_2} = \frac{D_{eff}^{H_2}}{R^*T} \frac{\partial P_{H_2}}{\partial x} \quad (3.91)$$

$$N_{O_2} = -\frac{D_{eff}^{O_2}}{R^*T} \frac{\partial P_{O_2}}{\partial x} \quad (3.92)$$

N_i [mol (cm² s)⁻¹]: Flux molar de la especie i

D_{eff}ⁱ [cm² s⁻¹]: Difusión efectiva de la especie i en el electrodo

P_i [Pa]: Presión parcial de la especie i

x [cm]: Dirección que representa el grosor del electrodo

El balance de masa en el volumen de control, que es cada electrodo, queda:

$$\frac{1}{R^*T} \frac{\partial P_{H_2}}{\partial t} = \frac{\partial N_{H_2}}{\partial x} + r_{H_2} \quad (3.93)$$

$$\frac{1}{R^*T} \frac{\partial P_{O_2}}{\partial t} = \frac{\partial N_{O_2}}{\partial x} + r_{O_2} \quad (3.94)$$

Considerando los supuestos que fueron tomados en la Sección 3.3.1.3.1, sobre el estado estacionario y la frontera de triple fase, para las Ecuaciones 3.93 y 3.94. Y combinando lo anterior con las Ecuaciones 3.91 y 3.92, se obtienen las ecuaciones diferenciales que se muestran a continuación:

$$\frac{\partial^2 P_{H_2}}{\partial x^2} = 0$$

$$\frac{\partial^2 P_{O_2}}{\partial x^2} = 0$$

Se sabe que este tipo de ecuaciones tiene solución de lineal, como se muestra en la Ecuación 3.30. Para conocer sus constantes a y b, en cada caso, se deben plantear condiciones iniciales. Se puede plantear que la presión en la cara del electrodo que se enfrenta a la entrada del gas tiene la misma presión que el seno de dicho gas. Es decir, que la transferencia de masa en la capa límite en torno al electrodo es despreciable y que por lo tanto, el seno del fluido tiene la misma presión que en la superficie del electrodo. De este modo, se plantean las condiciones de Dirichlet para el cátodo y el ánodo. Considerando la geometría mostrada en la Figura 3.6, las expresiones quedan como sigue:

$$P_{H_2}(x = 0) = P_{H_2}^B$$

$$P_{O_2}(x = 0) = P_{O_2}^S$$

Posteriormente, al igual que en la sección de celdas, planteando que la tasa de transferencia de masa en la frontera de triple fase (x=δ_{electrodo}) es igual a la tasa de reacción, se puede

plantear la Ley de Faraday para el flux de cada especie, como se plantea en la Ecuación 3.32. Combinando dicha expresión con las Ecuaciones 3.91 y 3.92, se obtiene:

$$\frac{D_{eff}^{H_2}}{R^*T} \frac{\partial P_{H_2}}{\partial x} = \frac{j}{\nu_e F} \quad (3.95)$$

$$-\frac{D_{eff}^{O_2}}{R^*T} \frac{\partial P_{O_2}}{\partial x} = \frac{j}{\nu_e F} \quad (3.96)$$

Con las expresiones anteriores, se obtiene la condición de Neumann para cada electrodo. De este modo, la solución de la ecuación diferencial para cada caso, es:

$$P_{H_2}(x) = \frac{j}{\frac{\nu_e F D_{eff}^{H_2}}{R^*T}} x + P_{H_2}^B \quad (3.97)$$

$$P_{O_2}(x) = \frac{j}{\frac{-\nu_e F D_{eff}^{O_2}}{R^*T}} x + P_{O_2}^S \quad (3.98)$$

Posteriormente, el valor de la presión en la superficie del electrodo es la presión evaluada en el espesor del electrodo, para ambos casos. De este modo, se tiene:

$$P_{H_2}^S = P_{H_2}(x = \delta_{cat}) = \frac{j}{\frac{-\nu_e F D_{eff}^{H_2}}{R^*T} \delta_{cat}} + P_{H_2}^B \quad (3.99)$$

$$P_{O_2}^B = P_{O_2}(x = \delta_{an}) = \frac{j}{\frac{-\nu_e F D_{eff}^{O_2}}{R^*T} \delta_{an}} + P_{O_2}^S \quad (3.100)$$

Reemplazando estas expresiones en la Ecuación 3.88, se pueden encontrar una expresiones para el sobrepotencial de concentración de ambos electrodos:

$$V_{con}^{cat} = \frac{R^*T}{2F} \ln \left(\frac{1}{1 + \frac{j}{j_{L,H_2}}} \right) \quad (3.101)$$

$$V_{con}^{an} = \frac{R^*T}{4F} \ln \left(\frac{1}{1 + \frac{j}{j_{L,O_2}}} \right) \quad (3.102)$$

Donde se define la densidad de corriente límite para H_2 y O_2 según:

$$j_{L,H_2} = \frac{\nu_e F D_{eff}^{H_2} P_{H_2}^B}{R^*T \delta_{cat}} \quad (3.103)$$

$$j_{L,O_2} = \frac{\nu_e F D_{eff}^{O_2} P_{O_2}^B}{R^*T \delta_{an}} \quad (3.104)$$

Ahora, volviendo a los términos difusivos que se han planteado. La difusión efectiva para

cada especie, se calcula como [52]:

$$\frac{1}{D_{eff}^{an}} = \frac{\varepsilon_{an}}{\tau_{an}} \left(\frac{1}{D_{eff}^{O_2-H_2O}} + \frac{1}{D_{eff}^{H_2O,K}} \right) \quad (3.105)$$

$$\frac{1}{D_{eff}^{cat}} = \frac{\varepsilon_{cat}}{\tau_{cat}} \left(\frac{1}{D_{eff}^{H_2-H_2O}} + \frac{1}{D_{eff}^{H_2O,K}} \right) \quad (3.106)$$

donde:

ε_{elec} [-]: Porosidad del electrodo en cuestion

τ_{elec} [-]: Tortuosidad del electrodo en cuestion

$D_{eff}^{H_2O,K}$ [$\text{cm}^2 \text{s}^{-1}$]: Difusividad de Knudsen del agua.

$D_{eff}^{O_2-H_2O}$ [$\text{cm}^2 \text{s}^{-1}$]: Difusividad efectiva binaria de oxígeno en agua.

$D_{eff}^{H_2-H_2O}$ [$\text{cm}^2 \text{s}^{-1}$]: Difusividad efectiva binaria de hidrógeno en agua.

La difusión de Knudsen es un proceso de difusión en el cual las moléculas difundiéndose, colisionan más frecuentemente con las pares de los poros de una estructura, que con otras moléculas difundiéndose. Este fenómeno es relevante cuando la distancia entre las moléculas es mayor que el diámetro de los poros. De este modo, si se asume que existe presión uniforme en el sistema, se pueden despreciar las difusividades de Knudsen para el H_2 ni del O_2 y solamente quedaría estimar la del H_2O . Luego, la difusividad de Knudsen para el H_2O , se puede modelar como [51]:

$$D_{eff}^{H_2O,K} = \frac{4}{3} r \sqrt{\frac{R^* T}{\pi M_{H_2O}}} \quad (3.107)$$

donde:

r [cm]: Radio medio de poros del electrodo.

M_{H_2O} [kg mol^{-1}]: Masa molar del agua.

Por otro lado, considerando la teoría de gases ideales de Chapman-Enskog, las difusividades efectivas binarias se escribirían como [52]:

$$D_{eff}^{O_2-H_2O} = 0,00133 \left(\frac{1}{M_{O_2}} + \frac{1}{M_{H_2O}} \right)^{1/2} \left(\frac{T^{3/2}}{P_{an}} \sigma_{O_2-H_2O}^2 \Gamma_{D,O_2-H_2O} \right) \quad (3.108)$$

$$D_{eff}^{H_2-H_2O} = 0,00133 \left(\frac{1}{M_{H_2}} + \frac{1}{M_{H_2O}} \right)^{1/2} \left(\frac{T^{3/2}}{P_{cat}} \sigma_{H_2-H_2O}^2 \Gamma_{D,H_2-H_2O} \right) \quad (3.109)$$

donde:

M_{O_2} [kg mol^{-1}]: Masa molar del oxígeno

M_{H_2} [kg mol^{-1}]: Masa molar del hidrógeno

$\sigma_{O_2-H_2O}$ [Å°]: Radio molecular promedio de las especies $\text{O}_2\text{-H}_2\text{O}$

$\sigma_{H_2-H_2O}$ [Å°]: Radio molecular promedio de las especies $\text{H}_2\text{-H}_2\text{O}$

Γ_{D,O_2-H_2O} [-]: Integral de difusión colisional del par $\text{O}_2\text{-H}_2\text{O}$

Γ_{D,H_2-H_2O} [-]: Integral de difusión colisional del par $\text{H}_2\text{-H}_2\text{O}$

La integral de difusión colisional para cada par de especies¹³ y los radios moleculares

¹³ $\text{O}_2\text{-H}_2\text{O}$ y $\text{H}_2\text{-H}_2\text{O}$

promedio para cada par de especies, se pueden expresar como sigue [52]:

$$\Gamma_D = \frac{1,06}{\tau^{0,156}} + \frac{0,193}{\exp(0,467\tau)} + \frac{1,036}{\exp(1,53\tau)} + \frac{1,765}{3,894\tau} \quad (3.110)$$

$$\sigma_{O_2-H_2O} = \frac{\sigma_{O_2} + \sigma_{H_2O}}{2} \quad (3.111)$$

$$\sigma_{H_2-H_2O} = \frac{\sigma_{H_2} + \sigma_{H_2O}}{2} \quad (3.112)$$

donde:

σ_{O_2} [A°]: Radio molecular medio del oxígeno. 3,467 A° [52].

σ_{H_2} [A°]: Radio molecular medio del hidrógeno. 2,827 A° [52].

σ_{H_2O} [A°]: Radio molecular medio del agua. 2,641 A° [52].

Y por último, las tortuosidades, se pueden escribir como [52]:

$$\tau_{O_2-H_2O} = \frac{T}{\sqrt{86330,97}} \quad (3.113)$$

$$\tau_{H_2-H_2O} = \frac{T}{\sqrt{48303,27}} \quad (3.114)$$

En la Tabla A.7 se muestran las condiciones de operación del sistema con las cuales se calcula el sobrepotencial de concentración. Y en la Tabla A.8 se muestran valores utilizados para calcular algunos términos necesarios en para el sobrepotencial de concentración.

3.3.2.4. Resistencia óhmica ΔV_{ohm}

La resistencia óhmica está definida en la Ecuación 3.71. Adaptándola a los materiales del electrolizador, se obtiene [52]:

$$\Delta V_{ohm} = I(R_e + R_{el} + R_d) \quad (3.115)$$

donde:

R_e [Ω]: Resistencia de los electrodos: cátodo y ánodo

R_{el} [Ω]: Resistencia del electrolito

R_d [Ω]: Resistencia del diafragma

Cada resistencia se define como sigue:

Electrodos

En la investigación de M. Gray *et al.* (Energy, 2017) se determinó que la resistencia de ambos electrodos de un electrolizador alcalino es del orden de $10^{-9}[\Omega]$ [52], por lo que para efectos de este modelo, el término R_e será despreciado.

Electrolito

Los electrolizadores alcalinos tienen presencia de burbujas que se producen en los electrodos debido a las reacciones que ocurren en ellos. Estas burbujas se producen por la cara del electrodo está en contacto con el electrolito. La presencia de burbujas corresponde a un factor más que contribuye en la resistencia total del sistema. De modo que para agregar el efecto de las burbujas al modelo, se definirán dos zonas dentro del electrolito: una zona libre de burbujas (bf¹⁴) y una zona de burbujas (bz¹⁵). La zona libre de burbujas tiene un ancho $l_{an-s} - \beta_{an}$ y la zona de burbujas tiene un ancho dado β_{an} . Empíricamente se ha determinado que el rango del espesor de la zona de burbujas está entre 0,4 y 0,6 mm [52].

Separando la contribución de la zona de burbujas de la resistencia total del electrolito para el lado del ánodo, la expresión queda como sigue [52]:

$$R_{el}^{an} = R_{bf}^{an} + R_{bz}^{an} = \rho_{el} \frac{l_{an-d} - \beta_{an}}{A_e} + \rho_{bz}^{an} \frac{\beta_{an}}{A_e} \quad (3.116)$$

donde:

ρ_{el} [Ω cm]: Resistividad de la zona libre de burbujas del electrolito

l_{an-d} [cm]: Ancho del electrolito desde el ánodo hasta el diafragma

β_{an} [cm]: Ancho de la zona de burbujas

A_e [cm²]: Área del electrodo. Por simplicidad del modelo, se asumirá que el área del ánodo y el cátodo son la misma, por lo que simplemente se usará el subíndice 'e' para referirse a cualquiera de ellos.

El término ρ_{bz}^{an} es la resistividad efectiva del electrolito en la zona libre de burbujas del ánodo, que se define como [52]:

$$\rho_{bz}^{an} = \frac{\rho_{el}}{(1 - \phi_{an})^{3/2}} \quad (3.117)$$

donde:

ϕ_{an} [-]: Fracción de vacío del sistema. Corresponde a la fracción de volumen que ocupan las burbujas en el electrolito. Por simplicidad del modelo, se asumirá que este término es igual para cátodo y ánodo y se denotará simplemente por ϕ . El estudio de F. Hine *et al.* (J. Electrochem. Soc., 1980), determinó que $\phi = 0,3$ [58].

Considerando la Ecuación 3.75, la resistividad de un medio es el inverso de la conductividad. Por ello, la expresión que se utilizará para la conductividad del electrolito en cuestión, depende de la composición del electrolito y la temperatura y está dada por [53]:

$$\sigma(\omega, T) = a_{ec} - b_{ec}T - c_{ec}\omega + d_{ec}T^2 + e_{ec}\omega^2 + f_{ec}\omega - g_{ec}T^3 + h_{ec}\omega^3 - i_{ec}T\omega^2 + j_{ec}T^2\omega \quad (3.118)$$

Donde los coeficientes se declaran en la Tabla A.10:

Las expresiones que se utilizan para el cátodo son análogas que para el ánodo. De este modo, la resistencia total del electrolito se expresa como [52]:

$$R_{el} = R_{el}^{an} + R_{el}^{cat} \quad (3.119)$$

¹⁴Del inglés: *bubble free*

¹⁵Del inglés: *bubble zone*

$$R_{el} = \frac{\rho_{el,ref}}{1 - \kappa_{el}(T - T_{ref})} \left(\frac{l_{an-d} - \beta_{an}}{A_e} + \frac{l_{cat-d} - \beta_{cat}}{A_e} + \frac{1}{(1 - \phi_{an})^{3/2}} \frac{\beta_{an}}{A_e} + \frac{1}{(1 - \phi_{cat})^{3/2}} \frac{\beta_{cat}}{A_e} \right) \quad (3.120)$$

donde:

$\kappa_{el} [K^{-1}]$: Coeficiente de temperatura de la resistividad del electrolito.

En la Tabla A.11 se presentan los datos utilizados para calcular la resistencia del electrolito.

Diafragma

El separador debe permitir una transferencia iónica continua mientras bloquea la mezcla de gases, lo que se logra teniendo una superficie extendida usando poros en su estructura. La fracción de volumen de estos poros se denomina *porosidad* y se denota por ε_d y el largo efectivo de este diafragma l_{eff} , determinan la tortuosidad como [52]:

$$\tau_d = \frac{l_{eff}}{\delta_d} \quad (3.121)$$

donde:

$l_{eff} [cm]$: Largo efectivo del diafragma

$\delta_d [cm]$: Espesor del diafragma

También, se define la *mojabilidad* ω_d como la razón de volumen del electrolito que es absorbida dentro de los poros por el volumen total de poros. De este modo, la porosidad efectiva será $\omega_d \varepsilon_d$. Si se asume una distribución uniforme de la corriente en la sección transversal del separador A_d , la resistencia del diafragma queda expresada como [52]:

$$R_d = \rho_{el} \frac{\tau_d^2 \delta_d}{\omega_d \varepsilon_d A_d} \quad (3.122)$$

En la Tabla A.12 se presentan los datos utilizados para calcular la resistencia del diafragma.

3.3.3. Baterías de ion-litio

El modelo utilizado para estimar la cantidad de baterías del sistema está asociado a balances energéticos para un circuito. Por lo tanto, este modelo se centrará principalmente en aspectos de la celda como un equipo unitario, más que la fenomenología dentro de él.

La unidad de relevancia en el caso de las baterías corresponde a su capacidad de descarga. Se le abrevia D_C^{16} , por su sigla en inglés, la que típicamente se mide en unidades de Ah [59].

¹⁶*Discharge capacity*

Para conocer la energía que debe almacenar el total de celdas, se calcula el tiempo de descarga por la potencia de la descarga. Esto se define de esta manera puesto que para el sistema a dimensionar es relevante la energía de salida. Se busca minimizar en que la fuente energética no está entregando energía al sistema. Es decir, se busca minimizar la intermitencia en el suministro. La energía a almacenar queda definida como [59]:

$$E_P = \dot{E}_P \cdot t_{\text{suministro}} \quad (3.123)$$

donde:

E_P [W-h]: Energía que debe almacenar el sistema de baterías. En adelante: *Energía del Pack*

\dot{E}_P [W]: Potencia de salida de energía del sistema de baterías

$t_{\text{suministro}}$ [h]: Tiempo en el que el sistema de baterías va a estar entregándole energía a las líneas de transmisión

Por otro lado, la potencia del pack, se puede determinar por [59]:

$$\dot{E}_P = V_P \cdot I_P \quad (3.124)$$

donde:

V_P [V]: Voltaje del pack de baterías

I_P [A]: Corriente que fluye en el pack de baterías

Para conocer el número de baterías, se debe conocer el voltaje nominal de cada una de ellas. El voltaje nominal de una batería corresponde al voltaje normal de trabajo para el que se ha diseñado dicha batería [60]. Luego, el número de baterías se puede conocer utilizando [59]:

$$V_P = V_{\text{nominal}} \cdot N_{\text{bateria}} \quad (3.125)$$

donde:

V_{nominal} [V]: Voltaje nominal de una batería unitaria

N_{bateria} [-]: Número de baterías unitarias que posee el pack

La energía del sistema también se puede determinar considerando la capacidad de descarga, lo que se expresa como [59]:

$$E_P = V_P \cdot D_C \quad (3.126)$$

donde:

D_C [A h]: Capacidad de descarga del sistema de baterías

Las baterías suelen dejar un margen de carga por razones de seguridad. Por lo que se define un concepto que se denomina 'Profundidad de descarga', que se abrevia como DOD, por su sigla en inglés¹⁷. La DOD corresponde a la medida porcentual de cuánta energía del pack será utilizada en la práctica. Esto corresponde a poner un límite a la cantidad de energía que se utiliza de la batería para prevenir sobrevoltaje en la carga y controlar bajo voltaje en la descarga [59]. Esto significa que si una batería tiene una DOD del 80 % y una capacidad de almacenamiento de 100 W-h, dispondrá de 80 W-h para ser usados y 20 W-h no disponibles

¹⁷*Depth of Discharge*

que serán almacenados por razones de seguridad. Estas razones de seguridad se asocian a la estabilidad interna de la baterías. Cuando no fluye carga a través de ellas, en un estado de descarga completa, la estructura interna como los electrodos de la batería, los espacios vacantes para almacenar los iones, se reducen, pues las redes internas se tienen a acoplar. Esto implica que la batería tiene menos sitios activos para almacenar los iones y por lo tanto, la capacidad de almacenamiento se reduce. En algunos casos, los electrodos pueden llegar a trizarse, reduciendo la vida útil de la batería [59].

Al considerar la DOD en los cálculos, se puede concluir que las baterías deben tener incluso más capacidad de almacenamiento, puesto que debe existir energía siempre dentro de ellas. En ese sentido, se deben redefinir las ecuaciones considerando la DOD, para tener las dimensiones reales. De este modo, la energía almacenada está dada por [59]:

$$E_{P,real} = \frac{E_P}{DOD} \quad (3.127)$$

donde:

$E_{P,real}$ [W-h]: Energía real del pack

E_P [W-h]: Energía del pack, como fue calculada en la Ecuación 3.123

DOD [-]: Profundidad de descarga de la batería del pack

Ahora, en términos de planta, se plantean los cálculos para los valores relacionados con la operación de las baterías. La potencia se define alternativamente como [59]:

$$\dot{E} = I^2 \cdot R \quad (3.128)$$

donde:

\dot{E} [W]: Potencia del sistema, en particular del pack de baterías

I [A]: Corriente del sistema, en particular del pack de baterías

R [Ω]: Resistencia total del sistema, en particular del pack de baterías

La Ecuación 3.128 resulta al combinar la Ley de Ohm con la Ley de Joule. Haciendo un manejo algebraico de dicha ecuación, se puede obtener una dependencia con el potencial, la cual se escribe como [59]:

$$\dot{E} = \frac{V^2}{R} \quad (3.129)$$

donde:

V [V]: Voltaje del sistema, en particular del pack de baterías

Por otro lado se puede definir la potencia *peak* del sistema, que corresponde a la potencia que tiene el circuito en condiciones sin corriente, como [59]:

$$\dot{E}_{peak} = \frac{V_{OC}^2}{4R} \quad (3.130)$$

donde:

V_{OC} [V]: Voltaje de circuito abierto del sistema

Se definen las condiciones de operación en carga y descarga. La descarga máxima continua es la corriente máxima que el sistema puede entregar a la red de transmisión. Esta corriente está dada por [59]:

$$I_{max,continuo} = N_{paralelo} \cdot I_C \cdot C_{max} \quad (3.131)$$

donde:

$I_{max,continuo}$ [A]: Corriente máxima continua que el pack entrega al sistema de transmisión eléctrica

$N_{paralelo}$ [-]: Número de baterías que están en paralelo

C_{max} : *C-rate* máximo de la batería

El *C-rate* de una batería corresponde a la cantidad de corriente que la batería puede entregar a un circuito en un periodo de tiempo. Es decir, que para un tiempo t , una batería de capacidad de descarga γ y con un *C-rate* de εC entregará un total de $\gamma \cdot \varepsilon$ A de corriente [59].

Y por último, se definen los voltajes máximo y mínimo de carga. Estos están dados por:

$$V_{ch,q} = N_S \cdot V_{C,q} \quad (3.132)$$

donde:

$q \in \{max, min\}$

$V_{C,q}$ [V]: Voltaje máximo o mínimo de la batería. Este dato lo entrega el fabricante en el la hoja de datos del producto

N_S [-]: Número de baterías que están en serie

3.4. Balances de masa y energía

A continuación se definen los balances de masa y energía que se realizaron para cada uno de los sistemas mostrados.

3.4.1. Sistema SOFC+R

Tanto en la sección de balance de masa como la de balance de energía, se definirán las expresiones genéricas de cada balance. El desarrollo para cada equipo de cada sistema está detallado en la sección de Anexos. Adicionalmente, se menciona que se definirán las ecuaciones concernientes al sistema SOFC+R. Para los demás sistemas, se agregarán y/o descartarán ecuaciones específicas en la sección propia.

3.4.1.1. Balance de masa

Para un equipo que opera a flujo constante y que no tienen reacción, el flujo de entrada es igual al de salida. Esto es válido para compresores, bombas, válvulas, calentadores y turbinas.

Considerando lo anterior, se puede plantear un balance de moles en dichos equipos. La conservación del flujo molar¹⁸ de la especie i queda expresada por:

$$n_i^e = n_i^s \quad (3.133)$$

Para los equipos donde el flujo no es constante y no hay reacción, se pueden dividir en 2 categorías: equipos que tienen una entrada y una salida, equipos que tienen más de una entrada y/o más de una salida. Para los equipos que tienen una entrada y una salida, se realiza un balance de moles¹⁹. Es decir, los moles de entrada de la especie i al equipo son iguales a los moles de salida de la especie i al equipo. La cantidad total de moles se calcula como el flujo molar ponderado por el tiempo durante el cual dicho flujo entra/sale al/del mencionado equipo, según corresponda. Lo anterior se expresa como:

$$N_i^e = N_i^s \quad (3.134)$$

$$n_i^e \cdot t_e = n_i^s \cdot t_s \quad (3.135)$$

El balance señalado en la Ecuación 3.135 se usará para los tanques.

Luego, se deduce el balance para equipos que separan íntegramente especies entre sí. Se considera que entra una corriente con 2 especies al equipo. Dada las especies que hay en el sistema, la separación es entre un gas y un líquido saturado o comprimido²⁰ que no requieren una separación fisicoquímica más compleja, como podría ser una destilación²¹. Es decir, las corrientes vienen juntas pero en el equipo se separan físicamente, al encontrarse en distintos estados físicos (líquido comprimido y gas o líquido saturado y gas). Por lo tanto, si en la entrada entran las especies j e i , en la salida 1 sale la especie i y en la salida 2 sale la especie j , el balance de moles es:

$$n_i^e = n_i^{s1} \quad (3.136)$$

$$n_j^e = n_j^{s2} \quad (3.137)$$

Las Ecuaciones 3.136 y 3.137 son válidas para condensadores.

El balance de moles para equipos en los que no ocurre una reacción y que juntan corrientes de 2 entradas de la misma especie es como sigue:

$$n_i^{e1} + n_i^{e2} = n_i^s \quad (3.138)$$

¹⁸Se remarca que se puede hacer un balance al flujo molar porque primero, el flujo es constante, por lo que no es necesario multiplicar por el tiempo. Para transformar un balance en el otro, se pondera por la masa molar de la especie

¹⁹Se puede hacer un balance de moles porque al no haber reacción, estos no van a cambiar. Es decir, hacer un balance de moles es equivalente a hacer un balance de masa, pues para transformar el balance de moles a balance de masa, se debe ponderar por el peso molecular.

²⁰Para los sistemas SOFC+R y SOFC+Int, el líquido está en estado de líquido saturado. En el sistema PEM el líquido está en estado de líquido comprimido.

²¹Se considera que la destilación es más compleja que la separación en cuestión dado que la destilación requiere un diseño del equipo de separación basado en el equilibrio de fases de las especies a separar. En este caso, eso no es necesario., por lo que se considera 'menos complejo'.

La Ecuación 3.138 es válida para los mezcladores.

Para equipos donde hay 2 corrientes que no intercambian masa y no ocurre reacción, el balance de moles es como sigue:

$$n_i^{e1} = n_i^{s1} \quad (3.139)$$

$$n_j^{e2} = n_j^{s2} \quad (3.140)$$

La Ecuación 3.139 es válida para intercambiadores de calor.

Finalmente, el caso de los equipos donde se produce reacción, se tiene el caso del electrolizador y la celda de combustible. En ambos casos, como la reacción que se produce es una reacción electroquímica, el flujo molar que reacciona se puede conocer a través de la Ley de Faraday, que se expresa como sigue [46]:

$$n = \frac{1}{\mu_e F} A \cdot j \quad (3.141)$$

donde:

n [mol s⁻¹]: Flujo molar de especie química producida o consumida por la reacción

μ_e [mol (mol-eq)⁻¹]: Coeficiente de transferencia de carga eléctrica

F [C (mol-eq)⁻¹]: Constante de Faraday

A [m²]: Área del electrodo involucrado en la reacción

j [A m²]: Densidad de corriente que fluye por la celda

Por otro lado, el dimensionamiento de los equipos electroquímicos está dado por [46]:

$$A_{T,i} = \frac{\dot{W}_i}{j_{op,i} \cdot U_{op,i}} \quad (3.142)$$

donde:

$i \in \{\text{FC}; \text{El}\}$

Combinando las Ecuaciones 3.142 y 3.141 y considerando este sistema en particular, se puede expresar:

$$n_{H_2}^1 = \frac{1}{\nu_e F} \cdot \frac{W_{El}}{U_{El}} \quad (3.143)$$

$$n_{H_2O}^7 = \frac{1}{\nu_e F} \cdot \frac{W_{FC}}{U_{FC}} \quad (3.144)$$

donde:

W_{El}, W_{FC} [W]: Potencia del electrolizador y de la celda de combustible, respectivamente

U_{El}, U_{FC} [V]: Voltaje de operación del electrolizador y de la celda, respectivamente

Por último, se define el coeficiente de utilización de combustible como la razón entre el flujo molar de salida de combustible del equipo y el flujo molar de entrada de combustible del equipo. La expresión queda definida por:

$$x_f := \frac{n_{H_2}^s}{n_{H_2}^e} \quad (3.145)$$

Para efectos de este estudio, se tomará que $x_f = 0,8$ [61]. En la Tabla A.16 se encuentra un resumen de las corrientes, en las que plantea una relación algebraica entre las corrientes para poder resolver el sistema.

Para mayor detalle sobre el desarrollo de los balances de masa del sistema SOFC+R ver el Anexo A.2.3.1.1.

3.4.1.2. Balance de Energía

El balance de energía se hizo considerando los siguientes supuestos:

- Las bombas, compresores y turbina no absorben ni disipan energía en forma de calor.
- Los calentadores, condensadores, intercambiadores de calor y el tanque 3 no absorben ni ejercen trabajo.
- Los tanques 1 y 2, mezclador y válvulas y cañerías del sistema están aislados energéticamente.
- Las bombas y turbinas funcionan isoentrópicamente.
- El sistema funciona de manera ideal y no se presentan pérdidas de masa.
- Las energías potencial y cinética son en magnitud, despreciables con respecto a la energía térmica en las corrientes.
- Las transferencias de energía en el sistema ocurren idealmente.
- El sistema funciona en estado estacionario.

A continuación se definen las expresiones generales del balance de energía que rigen a los equipos asociados a este sistema. Se reconocen las siguientes categorías de equipos en términos energéticos:

1. Equipos que no transfieren energía con el exterior
 - Equipos que no transfieren energía. La energía a la salida es igual a la de entrada
 - Equipos que transfieren energía internamente, entre las corrientes le fluyen por dentro
2. Equipos que solamente tienen entrada de trabajo \dot{W}_e
3. Equipos que solamente tienen salida de trabajo \dot{W}_s
4. Equipos que solamente tienen entrada de calor \dot{Q}_e
5. Equipos que solamente tienen salida de calor \dot{Q}_s
6. Equipos que tienen salidas y/o entradas de calor y/o trabajo

El balance para un equipo que no transfiere energía, cuya salida es igual a la entrada, se expresa como:

$$n_i^e \cdot h_i^e = n_i^s \cdot h_i^s \quad (3.146)$$

En la Ecuación 3.146 se muestra la energía caracterizada por la ponderación entre el flujo molar de la especie i con la entalpía molar de la especie i . En este estudio, las entalpías se

usarán en unidades de kJ kmol^{-1} , por lo que deben ser multiplicadas por el flujo molar. De este modo, el balance queda en unidades de W. Este balance es válido para válvulas y para los Tanques 1 y 2.

Para equipos que transfieren internamente su energía, se pueden dar 2 casos: que se trate de un intercambiador de calor o de un equipo de mezcla sin reacción²². En el caso del intercambiador de calor, una corriente compuesta por el conjunto k1 de especies entrega su calor a otra corriente compuesta por el conjunto k2 de especies²³, sin compartir masa. El balance de energía se expresa como:

$$\sum_{k1} n_{k1}^{e1} \cdot h_{k1}^{e1} + \sum_{k2} n_{k2}^{e1} \cdot h_{k2}^{e1} = \sum_{k1} n_{k1}^{s1} \cdot h_{k1}^{s1} + \sum_{k2} n_{k2}^{s2} \cdot h_{k2}^{s2} \quad (3.147)$$

El conjunto k2 de especies entra en la entrada e1 y sale en la salida s1 y el conjunto de especies k2, entra en la entrada e2 y sale en la salida s2.

En el segundo caso, el equipo realiza una mezcla de 2 corrientes de la misma especie. Su balance se expresa como:

$$n_i^{e1} \cdot h_i^{e1} + n_i^{e2} \cdot h_i^{e2} = n_i^s \cdot h_i^s \quad (3.148)$$

Para los equipos que reciben trabajo neto en la entrada, el balance se expresa como:

$$n_i^e \cdot h_i^e + \dot{W}_e = n_i^s \cdot h_i^s \quad (3.149)$$

La Ecuación 3.149 es válida para bombas y compresores. Sin embargo, es preciso aclarar que la estructura de esta ecuación también es válida para que hayan más especies y corrientes tanto en la entrada como en la salida del equipo.

Para los equipos que ejercen un trabajo neto sobre su entorno, el balance queda como:

$$n_i^e \cdot h_i^e = n_i^s \cdot h_i^s + \dot{W}_s \quad (3.150)$$

La Ecuación 3.150 es válida para turbinas.

Para los equipos que reciben calor neto desde el exterior, el balance es como sigue:

$$n_i^e \cdot h_i^e + \dot{Q}_e = n_i^s \cdot h_i^s \quad (3.151)$$

La Ecuación 3.151 es válida para calentadores.

Para los equipos que disipan un calor neto sobre su entorno, el balance queda como:

$$n_i^e \cdot h_i^e = n_i^s \cdot h_i^s + \dot{Q}_s \quad (3.152)$$

La Ecuación 3.152 es válida para condensadores y el Tanque 3.

²²Pueden existir equipos de mezcla con reacción, sin embargo, en este estudio no se consideran.

²³Las especies del conjunto k1 y k2 pueden ser las mismas, pero se diferencian para remarcar que las corrientes son distintas entre sí y que no se mezclan.

En el electrolizador, el equipo recibe una entrada neta de trabajo desde el exterior y disipa calor neto sobre el exterior. De este modo el balance de energía está dado por:

$$n_i^e \cdot h_i^e + \dot{W}_e = \sum_k n_k^s \cdot h_k^s + \dot{Q}_s \quad (3.153)$$

donde k es el conjunto de las especies que salen del equipo. Como se mencionó anteriormente, la Ecuación 3.153 es válida para el Electrolizador.

En la celda de combustible, recibe una entrada neta de calor desde el exterior y ejerce un trabajo neto sobre el exterior. De este modo el balance de energía es:

$$\sum_k n_k^e \cdot h_k^e + \dot{Q}_e = \sum_l n_l^s \cdot h_l^s + \dot{W}_s \quad (3.154)$$

donde k es el conjunto de especies que entran al equipo y l es el conjunto de especies que salen del equipo.

Considerando todas las ecuaciones anteriores y de acuerdo con la Tabla A.16 se encuentra una expresión que relaciona a $n_{H_2O}^8$ con $n_{H_2}^1$, se puede resolver el sistema.

Finalmente, para corroborar los cálculos, se realiza un balance de energía global del sistema, donde se debe cumplir que la energía total que entra al sistema es igual a la energía total que sale del sistema $E = S$. Para ello se toma el sistema como un todo y se consideran las entradas y salidas de energía únicamente. El balance global de energía es como sigue:

$$E = (\dot{W}_{El} + \dot{W}_{C1} + \dot{W}_{C2} + \dot{W}_{B1}) \cdot t_{alm} + (\dot{Q}_{cal1} + \dot{Q}_{cal2} + \dot{Q}_{FC} + \dot{W}_{B2}) \cdot t_{su} \quad (3.155)$$

$$S = (\dot{Q}_{El} + \dot{Q}_{T3}) \cdot t_{alm} + (\dot{Q}_{cond1} + \dot{Q}_{cond2} + \dot{W}_{Tur} + \dot{W}_{FC}) \cdot t_{su} \quad (3.156)$$

Y junto con lo anterior, se define el error del cálculo como la diferencia porcentual simple entre los valores y el máximo de ellos:

$$Error = \frac{|E - S|}{\max\{E; S\}} \times 100 \quad (3.157)$$

Para mayor detalle sobre el desarrollo y deducción de los balances de energía del sistema SOFC+R, ver el Anexo A.2.3.1.2. Además, en el Anexo A.2.3.1 se encuentran la Tabla A.17 y la Tabla A.18 las que contienen un resumen de los parámetros utilizados y los datos termodinámicos de cada corriente, respectivamente, con los que se resuelve el balance de energía.

3.4.2. Sistema SOFC+Int

3.4.2.1. Balance de masa

Se utilizan las mismas ecuaciones que se describieron en las sección de balance de masa para Sistema SOFC+R. Es decir se usa la Ecuación 3.133 para compresores, bomba, válvulas,

calentadores y para este sistema, esta ecuación también es válida para el Disipador de Calor. La Ecuación 3.135 para los Tanques 1, 2 y 3. La Ecuación 3.138 para el Mezclador. La Ecuación 3.136 para el Condensador 1. La Ecuación 3.139 para los intercambiadores de calor. Las Ecuaciones 3.143 y 3.144 para el electrolizador y la celda de combustible y para esta última, se utiliza el coeficiente de utilización de combustible según la Ecuación 3.145. Y el dimensionamiento de los equipos electroquímicos, se realiza según la Ecuación 3.142.

En la Tabla A.21 se encuentra un resumen de las corrientes, en las que plantea una relación algebraica entre las corrientes para poder resolver el sistema.

Para mayor detalle sobre el desarrollo y deducción de los balances de masa del sistema SOFC+Int, ver el Anexo A.2.3.2.1.

3.4.2.2. Balance de energía

Se utilizan las mismas ecuaciones y los supuesto que se describieron en la sección de balance de energía para Sistema SOFC+R, pero considerando las particularidades de este sistema. Es decir, se usa la Ecuación 3.146 para válvulas y Tanques 1 y 2. La Ecuación 3.147 para los intercambiadores de calor. La Ecuación 3.148 para el Mezclador. La Ecuación 3.149 para compresores y Bomba 1. La Ecuación 3.151 para los calentadores. La Ecuación 3.152 para el Calentador 1, Tanque 3 y en particular en este sistema, para el Disipador de Calor. La Ecuación 3.153 para el Electrolizador. La Ecuación 3.154 para la Celda de Combustible.

La entrada global de energía se calcula utilizando la Ecuación 3.155 y la salida, con la Ecuación 3.156, pero eliminando los términos para los equipos que no están presentes en este sistema, como la Turbina y agregando equipos que son solo parte de este sistema como el Disipador de Calor. Además, el error se calcula utilizando la Ecuación 3.157.

Para mayor detalle sobre el desarrollo y deducción de los balances de energía del sistema SOFC+Int, ver el Anexo A.2.3.2.2. Además, en el Anexo A.2.3.2 se encuentran la Tabla A.22 la cual contiene los datos termodinámicos de las corrientes del sistema. Y en el Anexo A.2.3.1 se encuentra la Tabla A.17, la cual contiene los parámetros del sistema, que son los mismos utilizados en el sistema SOFC+R.

3.4.3. Sistema PEM

3.4.3.1. Balance de masa

Se utilizan las mismas ecuaciones que se describieron en las sección de balance de masa para Sistema SOFC+R. Es decir se usa la Ecuación 3.133 para compresores, bomba, turbinas y válvulas. La Ecuación 3.135 para los Tanques 1, 2 y 3. La Ecuación 3.138 para el Mezclador. La Ecuación 3.136 para el Condensador 1. Las Ecuaciones 3.143 y 3.144 para el electrolizador y la

celda de combustible y para esta última, se utiliza el coeficiente de utilización de combustible según la Ecuación 3.145. Y el dimensionamiento de los equipos electroquímicos, se realiza según la Ecuación 3.142.

En la Tabla A.25 se encuentra un resumen de las corrientes, en las que plantea una relación algebraica entre las corrientes para poder resolver el sistema.

Para mayor detalle sobre el desarrollo y deducción de los balances de masa del sistema SOFC+Int, ver el Anexo A.2.3.3.1.

3.4.3.2. Balance de energía

Se utilizan las mismas ecuaciones y supuestos que se describieron en la sección de balance de energía para Sistema SOFC+R, pero considerando las particularidades de este sistema. Es decir, se usa la Ecuación 3.146 para válvulas y Tanques 1 y en este caso particular, para el Separador de Fases. La Ecuación 3.148 para el Mezclador La Ecuación 3.149 para los compresores y Bomba 1. La Ecuación 3.150 para las turbinas. La Ecuación 3.151 para el Tanque 3. Las Ecuaciones 3.153 y 3.154 para el Electrolizador y la Celda de Combustible, respectivamente.

La entrada global de energía se calcula utilizando la Ecuación 3.155 y la salida, con la Ecuación 3.156, pero eliminando los términos para los equipos que no están presentes en este sistema como los condensadores, calentadores y disipadores de calor. Además, el error se calcula utilizando la Ecuación 3.157.

Para mayor detalle sobre el desarrollo y deducción de los balances de energía del sistema PEM, ver el Anexo A.2.3.3.2. Además, en el Anexo A.2.3.3 se encuentran las Tabla A.26 y la Tabla A.27 las cuales contienen los parámetros y los datos termodinámicos, respectivamente utilizados en el sistema PEM.

3.4.4. Baterías de ion-litio

En el caso de las baterías, no se requiere un balance de energía ni de masa dado que no fluyen corrientes de especies químicas hacia el sistema y tampoco hay cambios termodinámicos en el modelo.

El balance energético que se realiza en el sistema es de forma de energía eléctrica que entra y sale del sistema y corresponde a las ecuaciones de dimensionamiento que se mencionaron en la Sección 3.3.3.

Capítulo 4

Parámetros

Para hacer la comparación de las tecnologías de almacenamiento anteriormente mencionadas, se utilizarán dos parámetros técnicos y económicos. Estos parámetros tienen la función de cuantificar aspectos sobre el funcionamiento técnico de cada sistema así como los costos de operación e iniciales.

4.1. Parámetros Técnicos

Los parámetros técnicos escogidos son la energía de retorno y la eficiencia. El primero, da cuenta de la capacidad del sistema para compensar la energía invertida en su construcción, al entregar energía a la red. El segundo parámetro, muestra la capacidad operacional del sistema, para aprovechar la energía que entra a él.

4.1.1. Energía de Retorno (ESOI)

El almacenamiento de la energía renovable para su posterior uso es importante para que la matriz energética se descarbonice. Sin embargo, no se debe olvidar que cualquier infraestructura de almacenamiento también utiliza energía para construirse. Es natural preguntarse entonces ¿De dónde sale esa energía?, ¿El equipo construido es capaz de entregar más energía que la que se requirió para fabricarlo? En este estudio se responderá la segunda pregunta.

La investigación de M. Pellow *et al.* (Energy & Environ. Sci., 2015) plantea una herramienta de evaluación técnica que permite comparar la energía necesaria para construir un equipo de almacenamiento con respecto a la energía que el equipo entrega en su vida útil. Esta herramienta se denomina $ESOI_{el}$, que viene del inglés *Energy Stored on Invested*, pero que para efectos de este estudio, se denominará 'Energía de Retorno'. El subíndice *el*

se refiere a energía eléctrica, de manera que esta herramienta se centrará en el estudio de la energía eléctrica asociada a un equipo o infraestructura de almacenamiento.

La Energía de Retorno es una análisis de energía neta que permite estudiar los costos y beneficios energéticos. Es decir, el análisis de energía neta permite comparar las salidas de energía al operar un equipo con las entradas de energía para producirlo. La Energía de retorno es en esencia un Análisis de Ciclo de Vida (LCA¹, por sus siglas en inglés) que compara esas energías, puesto que se debe hacer una revisión de los procesos necesarios para la manufactura y la operación de cada equipo del sistema. No obstante, como este estudio no se centra en realizar un LCA, ese detalle no se realizará, solamente se tomarán los datos de estudios previos.

Por último, como este estudio se realiza para una planta de almacenamiento de energía que es de uso humano, se puede interpretar que la $ESOI_{el}$ es una medida de beneficio energético que la sociedad recibe a cambio de la energía que invirtió en la construcción de dicho sistema energético.

En virtud de lo anterior, la Energía de Retorno o $ESOI_{el}$ se define como [6]:

$$ESOI_e = \frac{[E_s^{vu}]_{el}}{[E_e^{vu}]_{el}} \quad (4.1)$$

donde:

$[E_s^{vu}]_{el}$ [J]: Energía total que el sistema es capaz de entregar a la red a lo largo de su vida útil (v.u.)

$[E_e^{vu}]_{el}$ [J]: Energía total que ingresa al sistema durante su vida útil, ya sea operacionalmente o por concepto de manufactura

4.1.1.1. Alcances, Limitaciones e Interpretación de Valores

Esta herramienta solamente se centra en algunos aspectos de un sistema. El enfoque y las limitaciones de esta herramienta se mencionan a continuación:

- La energía contabilizada será la energía eléctrica. Existen algunos datos de LCA que están asociados a $[J]_{prim}$. Esto hace referencia a la energía bruta que fue necesaria para la fabricación de dicho equipo. Esa energía, normalmente no es puramente eléctrica sino que una combinación de otras fuentes de energía. Para transformar toda esta energía a energía eléctrica, se utilizará la eficiencia de la red eléctrica $\eta_{red} = 0,3$ [6].
- El cálculo de energía de entrada se asocia a equipos que reciben o realizan trabajo y equipos que reciben calor. La herramienta no toma en cuenta a los equipos que eliminan trabajo como lo son los condensadores. Ese calor se considera residual y por lo mismo no es un calor útil. Esta herramienta solo considera a las salidas útiles o aprovechables, que en este caso son las turbinas o celdas.

¹Life Cycle Assesment

- Se desprecia el término de intensidad energética para las especies O_2 y H_2O . Esto se debe a que el análisis está en base al Poder Calorífico Inferior de un combustible, es decir, no aplica para las otras 2 especies. Por lo tanto, se considerará que el conjunto de especies concernientes al cálculo de $ESOI_{el}$ se remite solamente al H_2 .
- El término τ para un equipo, en principio es válido para todos los equipos del sistema. Esto porque todos los equipos se deben reemplazar en algún momento. Sin embargo, para efectos de esta estudio, se asume que solamente se deben reemplazar el *stack* de celdas, ya sea de electrolizadores o celdas de combustible. En la práctica, esto es lo mismo que asumir que los equipos tienen una vida útil más larga que el tiempo de evaluación utilizado en este estudio.
- Se excluyen todos los equipos menores como tuberías, codos, llaves, válvulas y controladores. Si bien se asume que existen para que el sistema funcione, no se consideran para el cálculo del $ESOI_{el}$.
- Se asume que todos los equipos incluidos en el análisis tienen un funcionamiento idéntico en el tiempo de evaluación. Es decir, para efectos de cálculo, los equipos operan con una tasa de calor o trabajo invariante en el tiempo. En otras palabras, no se toman en cuenta fallas en el sistema, pérdidas, degradación del material. Si un equipo requiere cambio, su funcionamiento es invariante hasta que se cumpla el tiempo de vida útil.
- Se tomará como supuesto que los valores no operacionales² para dos mismos equipos serán los mismos, independiente si los equipos son físicamente distintos. Esto se asume para simplificación de cálculo.

Puede verse que, si la $ESOI$ toma un valor cercano a cero, significa que la energía que el equipo entrega en toda su vida útil, no es capaz de compensar a la energía que fue necesaria para su fabricación. Es decir, es un gasto energético que no es posible de recuperar durante toda la vida útil del equipo. Si la $ESOI$ toma un valor cercano a 1, significa que el equipo solo es capaz de compensar su fabricación, durante su vida útil. Y si toma valores mayores a 1, quiere decir que el equipo es capaz de entregarle a la red más energía de la que fue necesaria para su construcción. En otras palabras, la inversión energética para su construcción está saldada y el equipo sigue entregando energía adicional a la red.

Además, es preciso señalar que la $ESOI$ entrega una comparación sencilla para el balance neto de salida de energía al sistema, lo cual es útil para tomar una decisión más acertada sobre si construir la infraestructura de almacenamiento, o no producir energía en exceso.

4.1.1.2. Modelo matemático para los sistemas

A continuación se detalla la deducción del modelo matemático para encontrar el $ESOI_{el}$ para los sistemas: RHFC y baterías.

²La intensidad energética y el tiempo de vida útil. Los valores operacionales son el tiempo de operación y la potencia de operación

4.1.1.2.1 RHFC

Tomando la Ecuación 4.1 se redefine cada uno de sus términos. Por lo tanto, la entrada de energía eléctrica al sistema k, se define como [6]:

$$[E_s^{vu}]_{el,k} = \left(\sum_k P_{k,i} \cdot T_{k,i} \right)_{el} \quad (4.2)$$

donde:

$k \in \{\text{SOFC+R; SOFC+Int; PEM}\}$

$P_{k,i}$ [W]: Potencia de salida del equipo i perteneciente al sistema k

$T_{k,i}$ [s]: Tiempo total de operación en la vida útil del equipo i perteneciente al sistema k

$$i = \left\{ \begin{array}{ll} k = \text{SOFC} + R, & \{\text{SOFC; Turbina}\} \\ k = \text{SOFC} + \text{Int}, & \{\text{SOFC}\} \\ k = \text{PEM}, & \{\text{PEMFC; Turbina 1; Turbina 2}\} \end{array} \right\}$$

La salida de energía eléctrica del sistema k se define como:

$$[E_e^{vu}]_{el,k} = \left(\sum_j P_{j,i} \cdot \zeta_{j,i} + \sum_N \left(P_{N,i} \cdot \zeta_{N,i,stack} \cdot \left(\frac{\dot{T}_{N,i}}{\tau_{N,i,stack}} \right) + P_{N,i} \cdot \zeta_{N,i,BOS} \right) + \sum_n S_{n,i \in n,i} \right)_{el,k} \quad (4.3)$$

donde:

$k \in \{\text{SOFC+R; SOFC+Int; PEM}\}$

$$\left. \begin{array}{l} \text{SOFC} \\ \left\{ \begin{array}{l} j, \quad \{\text{Compresor 1; Compresor 2; Bomba 1; Bomba 2; Calentador 1; Calentador 2; Turbina}\} \\ N, \quad \{\text{SOFC; Electrolizador}\} \\ n, \quad \{\text{H}_2\text{O; H}_2; \text{O}_2\} \end{array} \right\} \end{array} \right\} =$$

$$\text{SOFC} + \text{Int} = \left\{ \begin{array}{l} j, \quad \{\text{Compresor 1; Compresor 2; Bomba, Calentador 1, Calentador 2}\} \\ N, \quad \{\text{SOFC; Electrolizador}\} \\ n, \quad \{\text{H}_2\text{O; H}_2; \text{O}_2\} \end{array} \right\}$$

$$\text{PEM} = \left\{ \begin{array}{l} j, \quad \{\text{Compresor 1; Compresor 2; Bomba}\} \\ N, \quad \{\text{PEMFC; Electrolizador}\} \\ n, \quad \{\text{H}_2\text{O; H}_2; \text{O}_2\} \end{array} \right\}$$

$P_{j,i}$ [W]: Potencia producida o consumida por el equipo i perteneciente al conjunto de equipos j

$P_{N,i}$ [W]: Potencia producida o consumida por el equipo electroquímico i perteneciente al conjunto de equipos N

$\dot{T}_{N,i}$ [s]: Tiempo total de funcionamiento en la vida útil del equipo electroquímico i perteneciente al conjunto de equipos N

$\tau_{N,i,stack}$ [s]: Tiempo de vida útil del *stack* de equipos electroquímicos i pertenecientes al conjunto de equipos N

$\zeta_{j,i}$ [MJ MW⁻¹]: Intensidad energética del equipo i perteneciente al conjunto de equipos j

$\zeta_{N,i,stack}$ [MJ MW⁻¹]: Intensidad energética del *stack* de equipos electroquímicos i pertenecientes al conjunto de equipos N

$\zeta_{N,i,BOS}$ [MJ MW⁻¹]: Intensidad energética del *Balance of System* (BOS) de equipos electroquímicos i pertenecientes al conjunto de equipos N

$\varepsilon_{n,i}$ [MJ MJ⁻¹]: Intensidad energética del almacenamiento energético de la especie i perteneciente al conjunto de especies n
 $S_{n,i}$ [MJ]: Capacidad de almacenamiento de la especie i perteneciente al conjunto de especies n

Sobre los conceptos que se mencionaron anteriormente, se definen a continuación:

Intensidad Energética ζ : Corresponde a la cantidad de energía en MJ necesaria para producir un equipo, el cual produce o consume 1 MW de potencia [6]. En el caso del tanque de almacenamiento el concepto es el mismo pero el símbolo es distinto para recalcar que el cálculo se hace en base al Poder Calorífico Inferior del combustible que se almacena en el equipo.

Stack: Conjunto de celdas electroquímicas que están conectadas entre sí directamente [6].

BOS: Balance of System. Corresponde a toda la estructura que le da el soporte físico a una celda electroquímica. Está compuesta de las carcasas metálicas, cables de conexión, sistema de regulación térmica, etc. Es decir, todos los materiales y estructuras adicionales al equipo, que no tienen funciones electroquímicas [6].

S: Capacidad de almacenamiento de H₂ en MJ. Esta capacidad se refiere a cuánta energía se puede almacenar en el sistema, tomando como referencia el Poder Calorífico Inferior del H₂ [6].

Poder Calorífico Inferior (PCI): Es la cantidad total de calor desprendido en MJ, en la combustión completa de combustible sin contar la parte correspondiente al calor latente del vapor de agua de la combustión, ya que no se produce cambio de fase, sino que se expulsa en forma de vapor [62].

Los términos de cada sistema que serán considerados para el cálculo del ESOI_{el}, se muestran en la Tabla A.29.

Para algunos de los términos involucrados para cada sistema, fue complejo encontrar el valor de la intensidad energética, como el caso de las turbinas, compresores y bombas. De modo que se tuvo que estimar de una forma alternativa. La idea fue estimar la intensidad del equipo como una ponderación de la intensidad energética del material con el que fueron construidos por la masa del material mencionado ocupado en el equipo. Lo anterior se expresa como sigue:

$$\zeta_i = \frac{\sum_{j,i} \bar{\zeta}_j \cdot M_j}{P_i} \quad (4.4)$$

donde:

$\bar{\zeta}_j$ [J kg⁻¹]: Intensidad energética del material j que compone al equipo i

M_j [kg]: Masa del material j que está presente en el equipo i

P_i [W]: Potencia máxima del equipo i

En la Tabla A.31 se muestran los resultados de estas estimaciones y un resumen de otros parámetros que se obtienen desde los balances de masa. Finalmente, en la Tabla A.30 se muestran los datos que se extrajeron directamente desde el estudio de M. Pellow *et. al* (Energy & Environ. Sci., 2015).

4.1.1.2.2 Baterías de ion-litio

La expresión para el caso de las baterías es más simple que para el RHFC, porque el sistema no cuenta con tanta diversidad de equipos. Es más, en las baterías, la energía se separa directamente dentro de ellas. La expresión para el ESOI_{el} en baterías, es como sigue [6]:

$$\text{ESOI}_{\text{el,bat}} = \frac{\lambda \text{ DOD}}{\varepsilon_{\text{el,bat}}} \quad (4.5)$$

donde:

λ [-]: Número de ciclos de carga/descarga

DOD [%]: Profundidad de descarga de las baterías

$\varepsilon_{\text{el,bat}}$ [J J⁻¹]: Intensidad energética para las baterías

En este caso, la intensidad energética η_B de las baterías es una cantidad adimensional, al igual que el caso de los tanques.

Considerando la eficiencia de la batería, que se describe en la sección a continuación, la energía de retorno queda como [63]:

$$\text{ESOI}_{\text{el,bat}} = \frac{\eta_B \text{ DOD} \lambda}{\varepsilon_{\text{el,bat}}} \quad (4.6)$$

4.1.2. Eficiencia Energética (η)

Otro factor importante de monitorear en un equipo es la capacidad de entregar a la red la energía que le fue entregada, para cada ciclo de carga y descarga. Esto es importante porque pueden existir procesos de deterioro interno, reacciones indeseadas o incluso irreversibilidades del proceso que generen una disminución en la energía entregada comparada con la que fue cargada. En ese sentido, se define la eficiencia energética (η) como el índice que compara la salida de energía del equipo (E_{salida}) con respecto a la entrada de energía al equipo (E_{entrada}), para cada ciclo de carga y descarga. Así, la expresión es [6]:

$$\eta = \frac{E_{\text{salida}}}{E_{\text{entrada}}} \quad (4.7)$$

La eficiencia energética es un parámetro que entrega información inmediata sobre el funcionamiento del equipo de almacenamiento. Esto es útil porque permite monitorear el equipo en cada ciclo de carga y descarga. Entonces, la eficiencia es un parámetro que es función del tiempo, por lo que se podría extender la definición y estudiar la eficiencia para el tiempo de vida útil de cada equipo. De este modo se compararía la energía total que el equipo entregó a la red durante todo su tiempo operativo, versus la energía total que recibió desde la red en ese periodo. Sin embargo, se considera valioso el hecho que el parámetro estudie el funcionamiento del equipo para cada ciclo de carga y descarga, puesto que entrega información en tiempo real sobre el desempeño del equipo. Esta información el ESOI no es capaz de entregarla, dado que hace el análisis integrando la operación en toda su vida útil. Esta es la razón por la cual se utilizarán ambos parámetros para hacer la evaluación técnica.

4.1.2.1. Alcances, Limitaciones e Interpretación de valores

Las principales limitaciones de este parámetros, de la manera en que se plantea en este estudio son:

- Se asume que el sistema funciona de manera ideal. Esto implica que el sistema no se contamina internamente y que su capacidad de almacenamiento no se va deteriorando con cada ciclo de carga y descarga. Por lo tanto, este parámetro será constante durante toda la evaluación del estudio.
- Se desprecian las energías cinéticas y potenciales. Esto implica que la energía que se obtiene de los balances de masa es menor a la real, por lo que la eficiencia que se obtenga también está distorsionada al no contabilizar esas formas de energía.
- Turbinas, compresores y bombas, operan isoentrópicamente. Es decir, la potencia en cada caso está alejada de la realidad. La eficiencia debería ser menor, si se consideraran pérdidas isoentrópicas en dichos equipos.

Puede verse que si η toma un valor cercano a 0, la energía que el equipo está entregando a la red es tan pequeña comparada con la que entra, que el equipo está perdiendo energía. Si el valor está entre 0 y 1, indicaría que el equipo es capaz de entregar la energía que entra en él, sin embargo, pierde parte de ella. Esto podría deberse a imperfecciones internas del equipo. La mayoría de los equipos tiene un funcionamiento en este rango [44]. Si el valor, es cercano a 1, significa que prácticamente toda la energía que entra al equipo pudo ser entregada nuevamente a la red, lo cual es un aspecto deseable para cualquier equipo de almacenamiento. La eficiencia no puede tomar un valor superior a 1, puesto que eso significaría que dentro del equipo se estaría creando energía, lo cual contradice el Primer Principio de la Termodinámica.

4.1.2.2. Modelo matemático para los sistemas

A continuación se detalla la deducción del modelo matemático para encontrar la eficiencia η para los sistemas: RHFC y baterías.

4.1.2.2.1 RHFC

Para un ciclo de potencia, la eficiencia térmica se define como la capacidad del sistema de transformar la energía térmica en trabajo útil. Ésta se define como [44]:

$$\eta_{\text{térmica}} = \frac{W_{\text{neto}}}{Q_{\text{entrada}}} \quad (4.8)$$

donde:

W_{neto} [J]: Trabajo neto realizado por sistema

Q_{entrada} [J]: Calor total de entrada del sistema

Además, estos términos se definen como:

$$W_{\text{neto},j} = \sum_i W_{s,j}^i - \sum_k W_{e,j}^k \quad (4.9)$$

$$Q_{\text{entrada},j} = \sum_k Q_{e,j}^k \quad (4.10)$$

donde:

$W_{\text{neto},j}$ [J]: Trabajo neto del sistema j

$W_{s,j}^i$ [J]: Trabajo de salida del equipo i, perteneciente al sistema j

$W_{e,j}^k$ [J]: Trabajo de entrada del equipo k, perteneciente al sistema j

$Q_{\text{entrada},j}$ [J]: Calor de entrada total del sistema j

$Q_{e,j}^k$ [J]: Calor de entrada del equipo k, perteneciente al sistema j

Los equipos involucrados en cada sistema se muestran en la Tabla 4.1.

Tabla 4.1: Resumen de términos ocupados en el cálculo de la eficiencia de los RHFC, junto con el tiempo en que opera cada equipo.

Tipo de Energía	SOFC+R	Tiempo	SOFC+Int	Tiempo	PEM	Tiempo
Q_e	Electrolizador	t_{alm}	Electrolizador	t_{alm}	Electrolizador	t_{alm}
	Calentador 1	t_{su}	Calentador 1	t_{su}	Tanque 3	t_{alm}
	Calentador 2	t_{su}	Calentador 2	t_{su}		
W_s	Celda SO	t_{su}	Celda SO	t_{su}	Celda PEM	t_{su}
	Turbina 1	t_{su}			Turbina 1	t_{su}
					Turbina 2	t_{su}
W_e	Compresor 1	t_{alm}	Compresor 1	t_{alm}	Compresor 1	t_{alm}
	Compresor 2	t_{alm}	Compresor 2	t_{alm}	Compresor 2	t_{alm}
	Bomba 1	t_{alm}	Bomba 1	t_{alm}	Bomba 1	t_{alm}
	Bomba 2	t_{su}				

Tomando los elementos de la Tabla 4.1 y las Ecuaciones 4.9 y 4.10, se calcula la eficiencia de cada sistema.

4.1.2.2.2 Baterías de ion-litio

La eficiencia de las baterías será extraída directamente de los datos otorgados por el fabricante. Esto, porque este valor se encuentra estudiado por la empresa para conocer el funcionamiento de los productos que venden. De este modo, este dato se considerará como una constante para el presente estudio.

4.2. Parámetro Económico

Para realizar la evaluación económica se utilizará como parámetro el costo de inversión, para visualizar el costo que tiene la construcción de estas tecnologías de almacenamiento.

4.2.1. Costos de Inversión

Son más conocidos como CAPEX, que vienen del inglés *Capital Expenditures*. El CAPEX corresponde al monto total de dinero que se necesita para la construcción y puesta en marcha de las dependencias y equipos de una planta. Este costo se divide en 2 grandes secciones [64]:

1. Costos directos: Se refieren principalmente a los equipos del proceso y todo lo asociado a ellos, como las instalaciones eléctricas, los equipos de control, mejoras en el terreno, etc.
2. Costos indirectos: Se refieren a la ingeniería y supervisión, construcciones, contingencias, pago de sueldos, etc.

Para la estimación de los costos, la estimación se centrará en el costo de los equipos. Esto quiere decir, que el resto de los ítems en cada categoría de costos, será calculado como un porcentaje del valor del costo total de los equipos. Esta metodología es propuesta por Max Peters y Klaus Timmerhaus en su libro *'Plant Design and Economics for Chemical Engineers'* (4° Ed., 1991) con el fin de hacer una estimación de dichos costos para la etapa de ingeniería conceptual del diseño de una planta, etapa en la que se centra el presente estudio [64].

4.2.1.1. Estimación de costos

Puede darse el caso que no hayan datos disponibles para el valor de un equipo con la capacidad deseada. Sin embargo, de conocerse el costo para el mismo equipo pero de distinta capacidad, se puede estimar el costo mediante una relación logarítmica entre dichas capacidades y sus respectivos precios. Esta regla se conoce como la 'Regla de los seis décimos', la cual se plantea a continuación [64]:

$$CO_2 = CO_1 \left(\frac{CAP_2}{CAP_1} \right)^\alpha \quad (4.11)$$

donde:

CO_1 [Unidad monetaria]: Costo del equipo para una capacidad, que corresponde al valor encontrado

CO_2 [Unidad monetaria]: Costo del equipo para la capacidad que requiere el sistema en estudio

CAP_1 [Capacidad específica]: Capacidad del equipo cuyos datos fueron encontrados

CAP_2 [Capacidad específica]: Capacidad del equipo que requiere el sistema en estudio

Como puede notarse, la Ecuación 4.11 es válida para cualquier par de unidades monetarias y capacidad específica, mientras éstas sean igual para 1 y 2.

Existen coeficientes α específicos para algunos equipos. Por esto, se recomienda utilizar el valor $\alpha = 0,6$ solamente cuando no hay información específica. Este valor que le da el nombre a esta regla [64].

Además de encontrar un valor para una capacidad diferente a la requerida, puede darse el caso que el valor encontrado también no sea de la fecha actual. Es decir, un valor de meses a años de antigüedad, por lo que deba ser actualizado. La actualización se hace con la siguiente ecuación [64]:

$$CO_{actual} = CO_{pasado} \left(\frac{IT_{actual}}{IT_{pasado}} \right) \quad (4.12)$$

donde:

CO_{actual} [Unidad monetaria]: Costo del equipo para el tiempo de la evaluación

CO_{pasado} [Unidad monetaria]: Costo del equipo para un tiempo pasado

IT_{actual} [-]: Indicador de ajuste temporal para el tiempo de la evaluación

IT_{pasado} [-]: Indicador de ajuste temporal para el tiempo pasado

Es preciso señalar que el costo utilizado en la Ecuación 4.12 corresponde a equipos que tienen la misma capacidad. Por otro lado, se menciona que los indicadores de ajuste temporal son un valor fijo para cada año. Estos valores se muestran en la Tabla A.32.

Para el caso que los equipos provengan del extranjero, el precio que señala la cotización, suele ser el precio de manufactura sin transporte conocido como FOB³. Este valor significa corresponde al precio del equipo producido y embalado en la fábrica. Pero a este valor se le debe agregar los costos de transporte y envío, generalmente por mar, y de costos de entrada al país como impuestos y del seguro por pérdidas o daños. Ese valor actualizado se conoce como CIF⁴ y representa el valor del equipo en territorio nacional. La transformación entre precio FOB y precio CIF, se realizará de forma general con la siguiente expresión [65]:

$$\text{\$CIF} = 1,2 \cdot \text{\$FOB} \quad (4.13)$$

4.2.1.2. Estructura de costos

Como se mencionó anteriormente, el valor de los equipos, representa normalmente el centro de los costos de inversión [64]. De modo que el resto de costos se calculará como porcentaje de aquel valor. El costo de los equipos se define como:

$$CO_{equipos}^j = \sum_i CO_i^j \cdot N_i \quad (4.14)$$

donde:

$CO_{equipos}^j$ [Unidad monetaria nacional]: Costo total de los equipos que componen el sistema j

³Del inglés *Free on board*

⁴Del inglés *cost, insurance and freight*

CO_i^j [Unidad monetaria nacional]: Costo unitario del equipo i que pertenece al sistema j
 N_i [-]: Cantidad de equipos i que se requieren

Cabe mencionar que el costo descrito en la Ecuación 4.14 corresponde a valores que han sido actualizados temporalmente, que han sido ajustados a moneda nacional y que están estimados para la capacidad requerida por el sistema en estudio. En ese sentido, las Ecuaciones 4.11, 4.12 y 4.13 se utilizarán si es necesario.

Sin embargo, puede darse el caso de que cuando se hace la investigación, hayan valores que no sea necesario modificar o que solo haya que modificarle alguno de los 3 aspectos mencionados: moneda, capacidad o temporalidad. Por lo tanto, las Ecuaciones 4.11, 4.12 y 4.13 se utilizan solo si es necesario.

Considerando lo anterior, el CAPEX del sistema j , se define según su relación con el costo de los equipos por la siguiente expresión:

$$CAPEX^j = \frac{CO_{equipos}^j}{\beta_{equipos}} \quad (4.15)$$

donde:

$\beta_{equipos}$ [%]: Porcentaje del CAPEX que representa el costo de los equipos del sistema j
 $CAPEX^j$ [Unidad monetaria nacional]: Costos de inversión del sistema j

La estructura de los otros ítems de costos, se determina al ponderar el valor del CAPEX del sistema j por el porcentaje que representa determinado ítem, como se muestra a continuación:

$$COS_k^j = CAPEX^j \cdot \beta_k^j \quad (4.16)$$

donde:

COS_k^j [Unidad monetaria nacional]: Costo del ítem k asociado al sistema j
 β_k^j [%]: Porcentaje del CAPEX del sistema j que representa el ítem k

En la Tabla 4.2 se muestra el porcentaje β utilizado para cada ítem del estudio. En la Tabla A.39, se muestran los valores utilizados para cada ítem y cada tipo de sistema de almacenamiento en estudio.

Tabla 4.2: Estructura de costos y porcentajes escogidos para la estimación del CAPEX [64]. Estos valores se obtienen como un promedio del rango de valores que se muestra en '*Plant Design and Economics for Chemical Engineers*' y ajustados hasta sumar 100 %.

	RHFC	Baterías
Ítem	β / %	β / %
Directos		
Equipos	25	25
Instalación equipos	8	8
Instrumentación y Control	4	5
Piping	9	0,5
Instalación Eléctrica	5	7
Construcciones y edificación	7	8
Mejoras del terreno	2	2
Instalaciones de servicios	10	10
Terreno	1	1
Indirectos		
Ingeniería y Supervisión	10	12,5
Gastos de Construcción	8	9
Honorarios de Contratista	3	4
Contingencia	8	8
Sub total directos / %	71	66,5
Sub total indirectos / %	29	33,5
Total / %	100	100

Capítulo 5

Resultados

A continuación se presentan los resultados obtenidos en este estudio. Los resultados se dividirán en 2 partes: resultados para el sistema regenerativo de celdas de combustible (RHFC) y resultados para sistema de baterías. Para el caso de los resultados económicos, se mostrarán juntos.

5.1. Resultados Técnicos

5.1.1. RHFC

5.1.1.1. Curvas de operación de equipos electroquímicos

En la Figura 5.1 se muestran las curvas de polarización y densidad de potencia eléctrica del electrolizador alcalino. Se recuerda que este equipo opera a una densidad de corriente que fue encontrada como referencia de 4.000 A m^{-2} . Tomando esta densidad de corriente se puede obtener de las curvas de polarización que el voltaje de la celda es de $5,493 \text{ V}$ y la densidad de potencia es de 21.971 W m^{-2} .

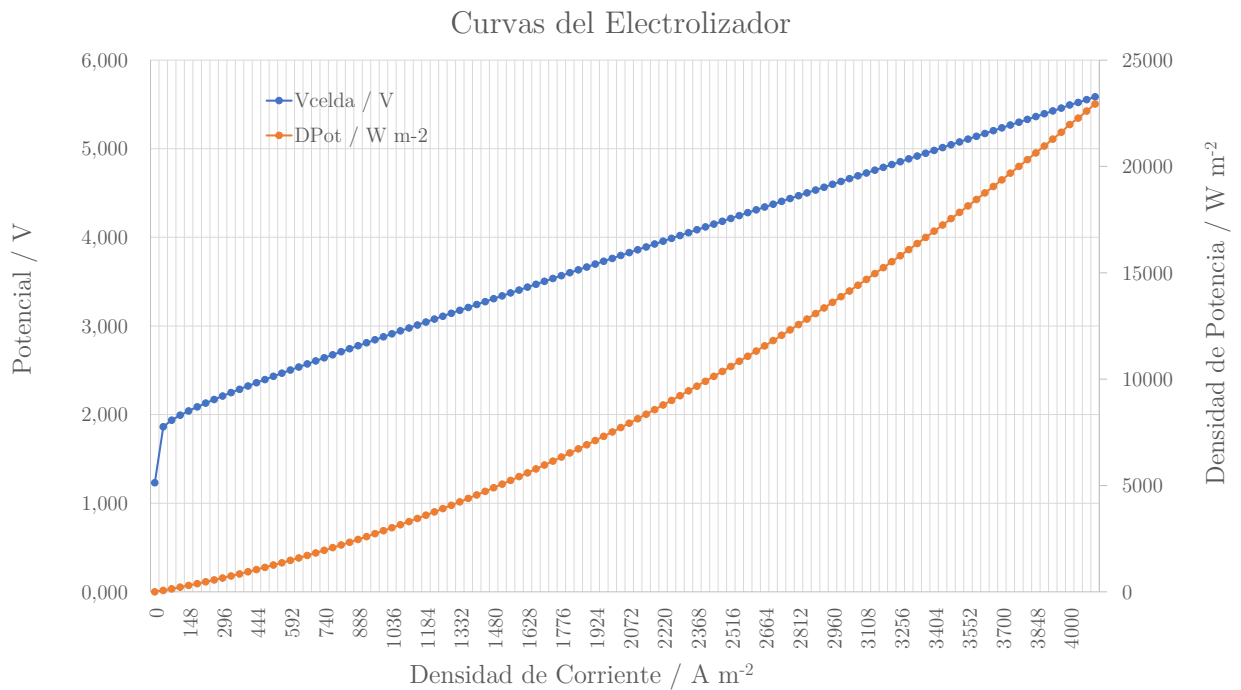


Figura 5.1: Curvas de operación del electrolizador alcalino que opera a 9 bar y 80°C. Este electrolizador es idéntico para los sistemas SOFC+R y SOFC+Int.

En la Figura 5.2 se muestran las curvas de polarización y densidad de potencia eléctrica de la celda de combustible con membrana de intercambio protónico. Según lo que se puede apreciar de las curvas, ésta opera con una densidad de corriente de 4,75 A m⁻², un voltaje de 0,534 V y densidad de potencia de 2,496 W m⁻².

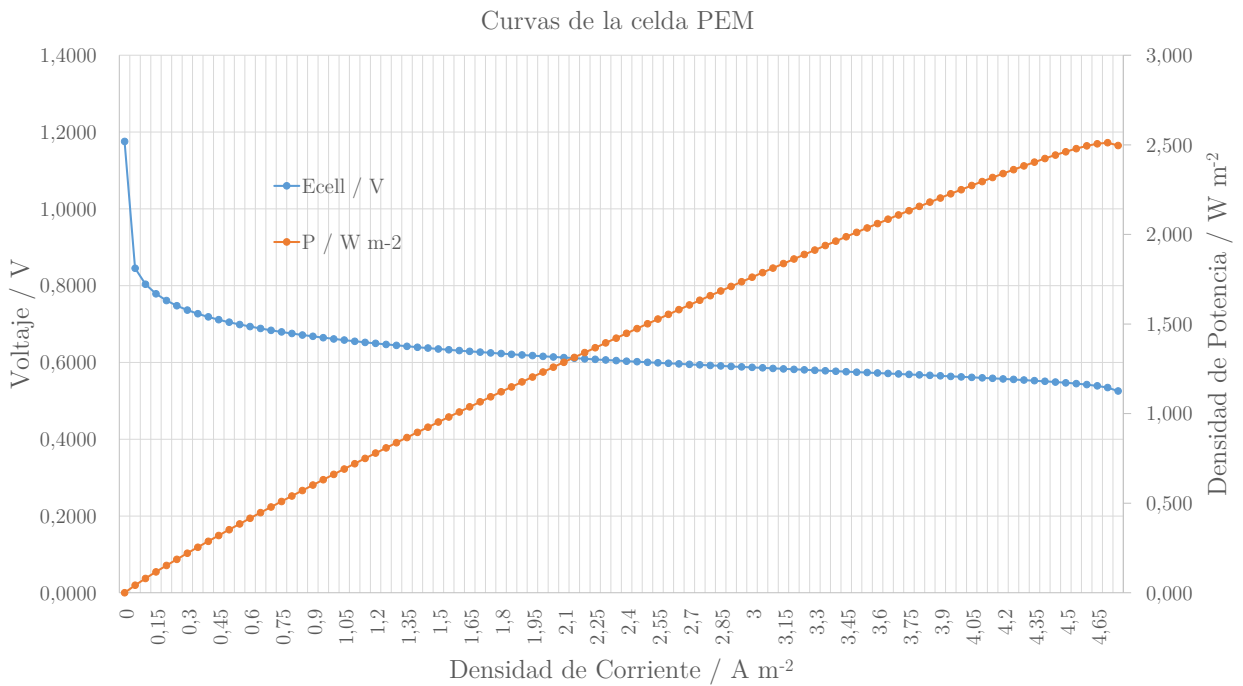


Figura 5.2: Curvas de operación de la celda de combustible con membrana de intercambio protónico que opera a 1,4 bar y 80°C.

Por último, en la Figura 5.3 se muestran las curvas de polarización y de densidad de potencia eléctrica de celda de combustible de óxido sólido. Según lo que se puede apreciar de las curvas, ésta opera con una densidad de corriente de 13.316 A m⁻², un voltaje de 0,56 V y densidad de potencia de 7.459 W m⁻².

Curva polarización SOFC/O

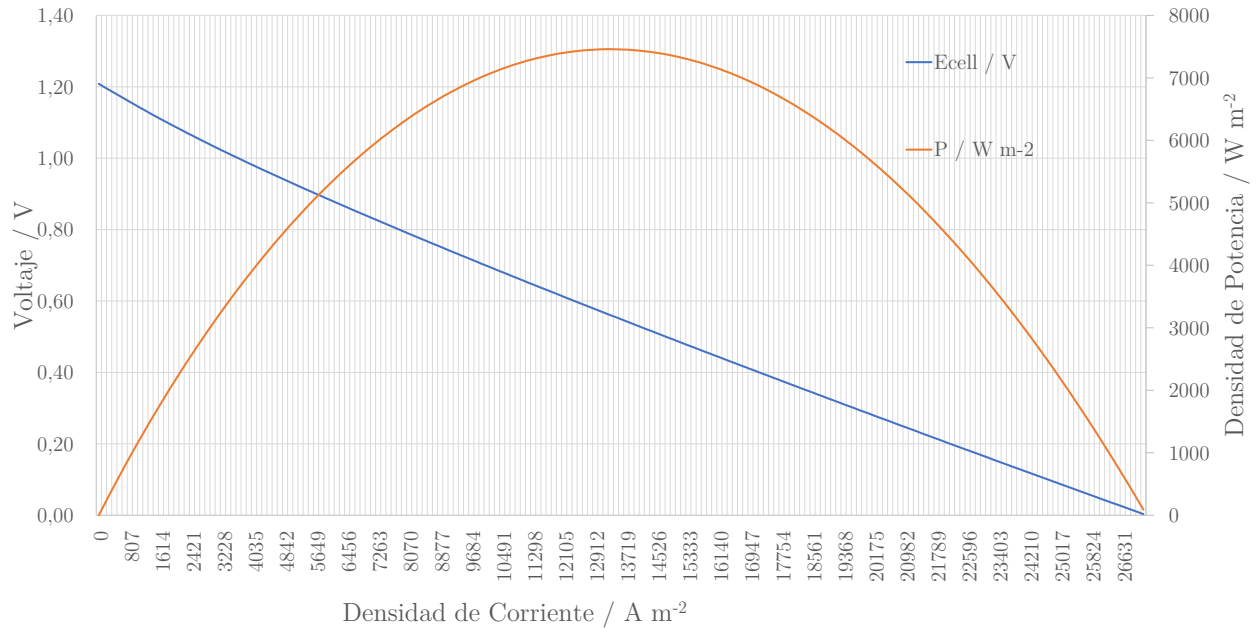


Figura 5.3: Curvas de operación de la celda de combustible de óxido sólido que opera a 1 bar y 800°C.

5.1.1.2. Resultados de los balances de masa y energía

La cantidad de equipos y sus áreas, para los equipos electroquímicos necesarios, se muestran en la Tabla 5.1.

Tabla 5.1: Dimensiones y números de *stacks* de los equipos electroquímicos del sistema.

Equipo	Área / m ²	Celdas por Stack / -	N° Celdas / -	N° Stack / -
Electrolizador	0,03	50 [45]	90.050	1.822
SOFC	0,01	50 [45]	49.670	1.324
PEMFC	0,0126	50 [45]	111.180.960	2.223.620

Además, en la Tabla 5.2 la cantidad de estanques para cada tipo de corriente. Estos dimensionamientos son válidos para los tres sistemas.

Tabla 5.2: Número de tanques que son necesarios para el almacenamiento. Para las corrientes gaseosas, se utiliza como referencia la capacidad de almacenamiento de los estanques utilizados en el proyecto de almacenamiento de energía de Galicia, que es de $8,8 \text{ Nm}^3$ [45] y para la corriente de agua, se usa como referencia tanques de almacenamiento no aislados de 10 m^3 .

Equipo	Magnitud	Unidades	$N_{tanques}$
T1	4.682	Nm^3	532
T2	2.341	Nm^3	266
T3	38	m^3	4

5.1.1.2.1 Sistema SOFC+R

Los resultados del balance de energía para el sistema SOFC+R se resumen en la Tabla 5.3.

Tabla 5.3: Resultados del balance de energía en el sistema con celda de óxido sólido y ciclo de Rankine acoplado.

Parámetro	Magnitud	Unidades
$h_{H_2}^5$	12.763	kJ kmol^{-1}
$A_{T,El}$	2.731	m^2
$A_{T,FC}$	495	m^2
$n_{H_2}^1$	56,60	mol s^{-1}
$n_{H_2}^4$	34,12	mol s^{-1}
$n_{H_2O}^{18}$	21,36	mol s^{-1}
$U_{op,El}$	5,493	V
$U_{op,FC}$	0,56	V
\dot{Q}_{cal1}	793.778	W
\dot{Q}_{cal2}	395.395	W
\dot{Q}_{cond1}	1.360.736	W
\dot{Q}_{cond2}	857.930	W
\dot{Q}_{El}	59.503.077	W
\dot{Q}_{FC}	4.597.259	W
\dot{Q}_{T3}	64.787	W
\dot{W}_{B1}	3.060	W
\dot{W}_{B2}	2.002	W
\dot{W}_{C1}	183.189	W
\dot{W}_{C2}	13.496	W
\dot{W}_{FC}	3.688.436	W
\dot{W}_{Turb}	262.318	W

En la Tabla 5.4 se muestran los resultados del balance de masa del sistema SOFC+R:

Tabla 5.4: Resultados del balance de masa del sistema con celda de óxido sólido y ciclo de Rankine acoplado

Corriente	Valor / mol s ⁻¹
Ciclo RHFC	
n _{H₂} ¹	56,60
n _{H₂} ²	56,60
n _{H₂} ³	34,13
n _{H₂} ⁴	34,13
n _{H₂} ⁵	170,66
n _{H₂} ⁶	170,66
n _{H₂O} ⁷	34,13
n _{H₂} ⁷	136,53
n _{H₂O} ⁸	34,13
n _{H₂} ⁸	136,54
n _{H₂} ⁹	136,53
n _{H₂O} ¹⁰	34,13
n _{H₂O} ¹¹	56,60
n _{H₂O} ¹²	56,60
n _{O₂} ¹³	28,30
n _{O₂} ¹⁴	28,30
n _{O₂} ¹⁵	17,06
n _{O₂} ¹⁶	17,06
n _{O₂} ¹⁷	17,06
Ciclo Rankine Acoplado	
n _{H₂O} ¹⁸	72,08
n _{H₂O} ¹⁹	72,08
n _{H₂O} ²⁰	72,08
n _{H₂O} ²¹	72,08

El balance de energía del sistema SOFC+R cierra con un error del $2 \cdot 10^{-8} \%$, calculado usando la Ecuación 3.157. Los datos se resumen en resumen en la Tabla 5.5.

Tabla 5.5: Cierre del balance de energía para el sistema con celda de óxido sólido y ciclo Rankine acoplado.

Cierre		
Entrada	715,5	MW-h
Salida	715,5	MW-h
Error	$2 \cdot 10^{-8} \%$	-

5.1.1.2.2 Sistema SOFC+Int

Tabla 5.6: Resultados del balance de masa y energía en el sistema con celda de óxido sólido e integración energética.

Parámetro	Magnitud	Unidades
$h_{H_2}^5$	11.161	kJ kmol^{-1}
$h_{H_2}^6$	31.284	kJ kmol^{-1}
$h_{O_2}^{20}$	11.137	kJ kmol^{-1}
$A_{T,El}$	2.731	m^2
$A_{T,FC}$	495	m^2
$n_{H_2}^1$	56,6	mol s^{-1}
$n_{H_2}^4$	34,1	mol s^{-1}
$U_{op,El}$	5,493	V
$U_{op,FC}$	0,56	V
\dot{Q}_{cal1}	14.226	W
\dot{Q}_{cal2}	389.154	W
\dot{Q}_{cond1}	1.360.645	W
\dot{Q}_{dis}	332.789	W
\dot{Q}_{El}	59.503.145	W
\dot{Q}_{FC}	4.597.539	W
\dot{Q}_{T3}	64.787	W
\dot{W}_{B1}	3.060	W
\dot{W}_{C1}	183.189	W
\dot{W}_{C2}	13.493	W
\dot{W}_{FC}	3.688.436	W

En la Tabla 5.7 se muestran los resultados del balance de masa del sistema SOFC+Int.

Tabla 5.7: Resultados del balance de masa en el sistema con celda de óxido sólido e integración energética

Flujo	Valor / mol s ⁻¹
$n_{H_2}^1$	56,60
$n_{H_2}^2$	56,60
$n_{H_2}^3$	34,12
$n_{H_2}^4$	34,12
$n_{H_2}^5$	170,66
$n_{H_2}^6$	170,66
$n_{H_2}^7$	170,66
$n_{H_2}^8$	136,52
$n_{H_2O}^8$	34,13
$n_{H_2}^9$	136,52
$n_{H_2O}^9$	34,12
$n_{H_2}^{10}$	136,52
$n_{H_2O}^{10}$	34,12
$n_{H_2}^{11}$	136,52
$n_{H_2O}^{11}$	34,12
$n_{H_2O}^{12}$	8,53
$n_{O_2}^{13}$	34,12
$n_{H_2O}^{14}$	56,60
$n_{H_2O}^{15}$	56,60
$n_{O_2}^{16}$	28,3
$n_{O_2}^{17}$	28,3
$n_{O_2}^{18}$	17,06
$n_{O_2}^{19}$	17,06
$n_{O_2}^{20}$	17,06
$n_{O_2}^{21}$	17,06

El balance de energía cierra con un error del 0,0001 %, calculado usando la Ecuación 3.157. Los datos se resumen en la Tabla 5.8.

Tabla 5.8: Cierre del balance de energía para el sistema con celda de óxido sólido e integración energética

Cierre		
Entrada	702,1	MW-h
Salida	702,1	MW-h
Cuadratura	0,0001 %	-

5.1.1.2.3 Sistema PEM

Los resultados del balance de energía del sistema PEM, se resumen en la Tabla 5.9.

Tabla 5.9: Resultados del balance de masa y energía en el sistema con celda de intercambio protónico.

Parámetro	Magnitud	Unidades
$h_{H_2}^6$	10.059	kJ kmol^{-1}
$A_{T,El}$	2.731	m^2
$A_{T,PEM}$	1.400.880	m^2
$n_{H_2}^1$	56,6	mol s^{-1}
$n_{H_2}^5$	34,12	mol s^{-1}
$U_{op,El}$	5,493	V
$U_{op,FC}$	0,534	V
\dot{Q}_{El}	59.503.145	W
\dot{Q}_{FC}	3.205.529	W
\dot{Q}_{T3}	19.380	W
\dot{W}_{B1}	3.060	W
\dot{W}_{C1}	183.173	W
\dot{W}_{C2}	13.493	W
\dot{W}_{FC}	3.518.562	W
\dot{W}_{Tur1}	110.412	W
\dot{W}_{Tur2}	8.134	W

En la Tabla 5.10 se muestran los resultados del balance de masa del sistema PEM.

Tabla 5.10: Resultados del balance de masa del sistema con celda de intercambio protónico

Corriente	Valor / mol s^{-1}
$n_{H_2}^1$	56,60
$n_{H_2}^2$	56,60
$n_{H_2}^3$	34,12
$n_{H_2}^4$	34,12
$n_{H_2}^5$	34,12
$n_{H_2}^6$	170,64
$n_{H_2}^7$	136,51
$n_{H_2O}^7$	34,12
$n_{H_2}^8$	136,51
$n_{H_2O}^9$	34,12
$n_{H_2O}^{10}$	56,60
$n_{H_2O}^{11}$	56,60
$n_{O_2}^{12}$	28,3
$n_{O_2}^{13}$	28,3
$n_{O_2}^{14}$	17,06
$n_{O_2}^{15}$	17,06
$n_{O_2}^{16}$	17,06

El balance de energía cierra con un error del 0,0003 % calculado usando la Ecuación 3.157. Los datos se resumen en resumen en la Tabla 5.11.

Tabla 5.11: Cierre del balance de energía para el sistema con celda de intercambio protónico.

Cierre		
Entrada	671,7	MW-h
Salida	671,7	MW-h
Error	0,0003 %	-

En la Tabla 5.12, se muestra un resumen de los parámetros técnicos para los sistemas en estudio.

Tabla 5.12: Resultados de los parámetros técnicos de los sistemas en estudio.

Sistema	η / -	ESOI / -
SOFC+R	11,11	35
SOFC+Int	9,72	29
PEM	9,61	8
Baterías	96 [66]	33,9

5.1.1.3. Variaciones de parámetros

En la Figura 5.4 se muestra el comportamiento del flujo de H_2 producido por el electrolizador y la potencia de salida de cada RHFC con respecto a cambios en la densidad de corriente de operación en el electrolizador.

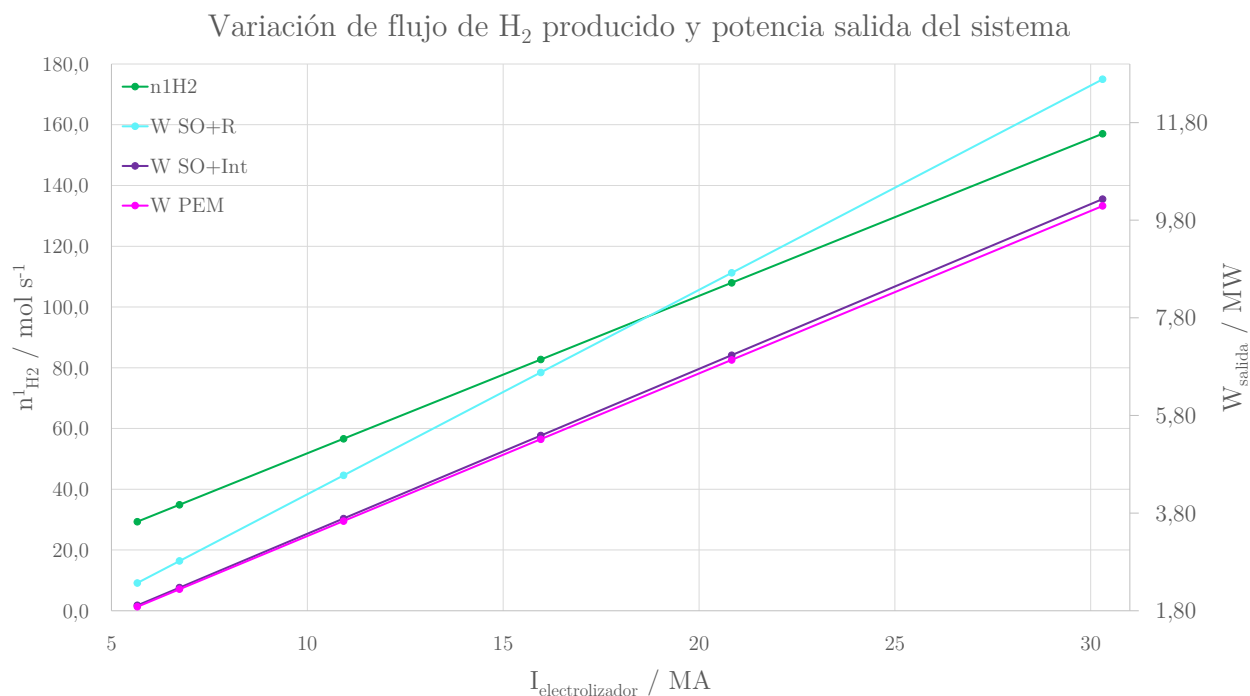


Figura 5.4: Comportamiento del flujo de H₂ producido por el electrolizador y la potencia de salida por cada RHFC respecto a cambios en la densidad de corriente del electrolizador.

En la Figura 5.5 se muestra el comportamiento de las áreas de los equipos electroquímicos respecto a cambios en la densidad de corriente de operación en el electrolizador.

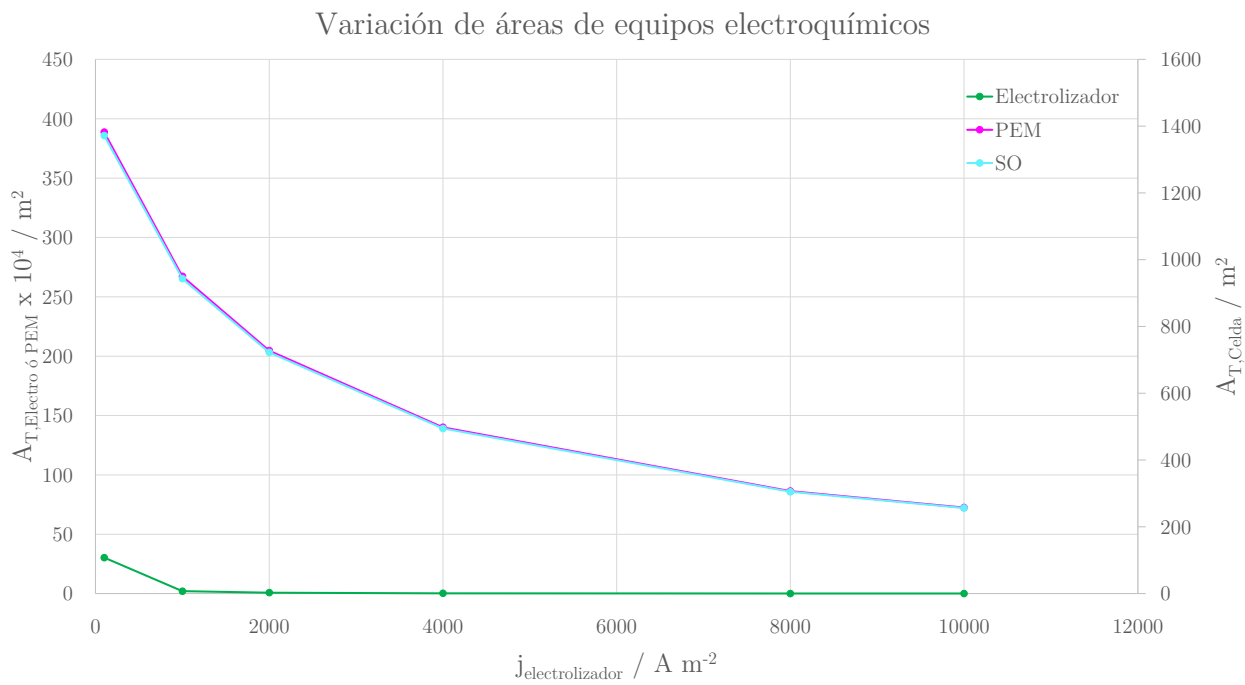


Figura 5.5: Comportamiento de las áreas del electrolizador, celda de óxido sólido y celda de intercambio protónico respecto a cambios en la densidad de corriente del electrolizador.

En la Figura 5.6 se muestra el comportamiento de la eficiencia y ESOI de cada RHFC respecto a variaciones en la densidad de corriente de operación en el electrolizador.

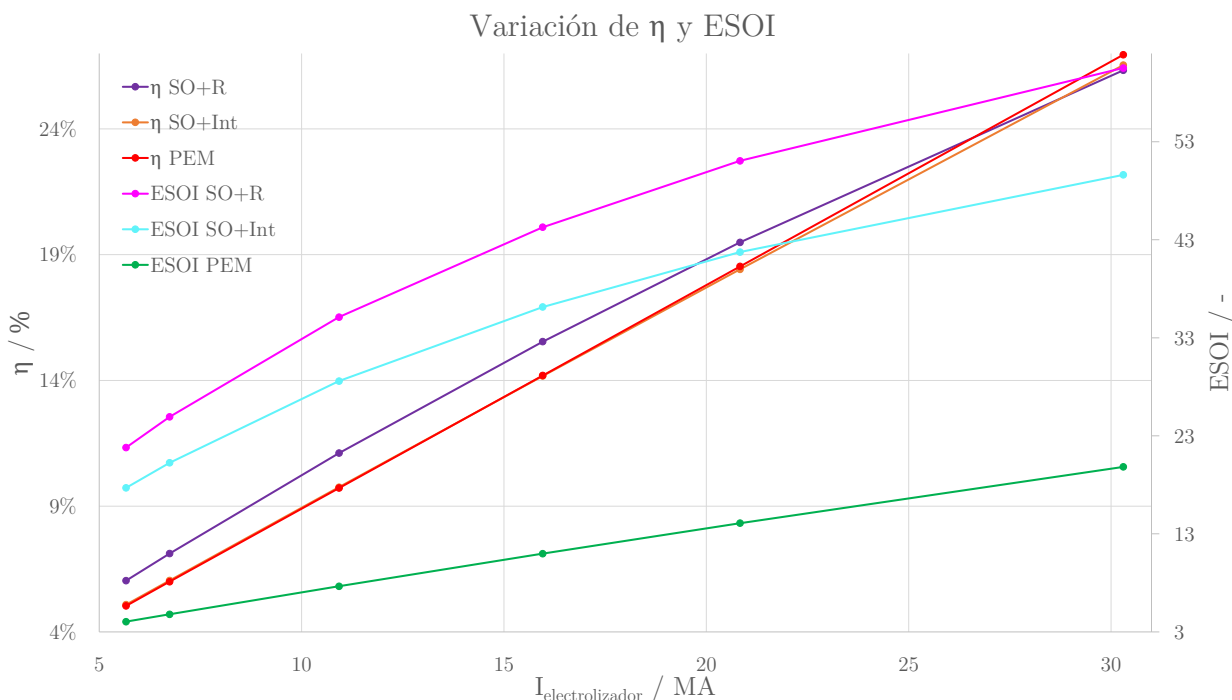


Figura 5.6: Comportamiento de Eficiencia y la ESOI respecto a cambios en la densidad de corriente del electrolizador.

5.1.2. Baterías

Son necesarias 106.800 baterías de ion-litio de 24V y una capacidad de carga/descarga de 300 A-h. Éstas se conectan en 36 *strings* en paralelo con 4.919 celdas conectadas en serie en cada uno de ellos.

En la Tabla 5.13 se muestran los resultados para la eficiencia del sistema de baterías de ion-litio de 24V y una capacidad de carga/descarga de 300 A-h.

Tabla 5.13: Resultados de los parámetros de operación para las baterías de ion-litio de 24V y una capacidad de 300 A-h.

Parámetro	Magnitud	Unidades
R_{bat}	109.500	Ω
I_c	23.408	A
η_B	0,96	-
ESOI	33,9	-

5.1.2.1. Variación de Parámetros

En la Figura 5.7 se muestra la variación del número de baterías con respecto a cambios en la profundidad de descarga.

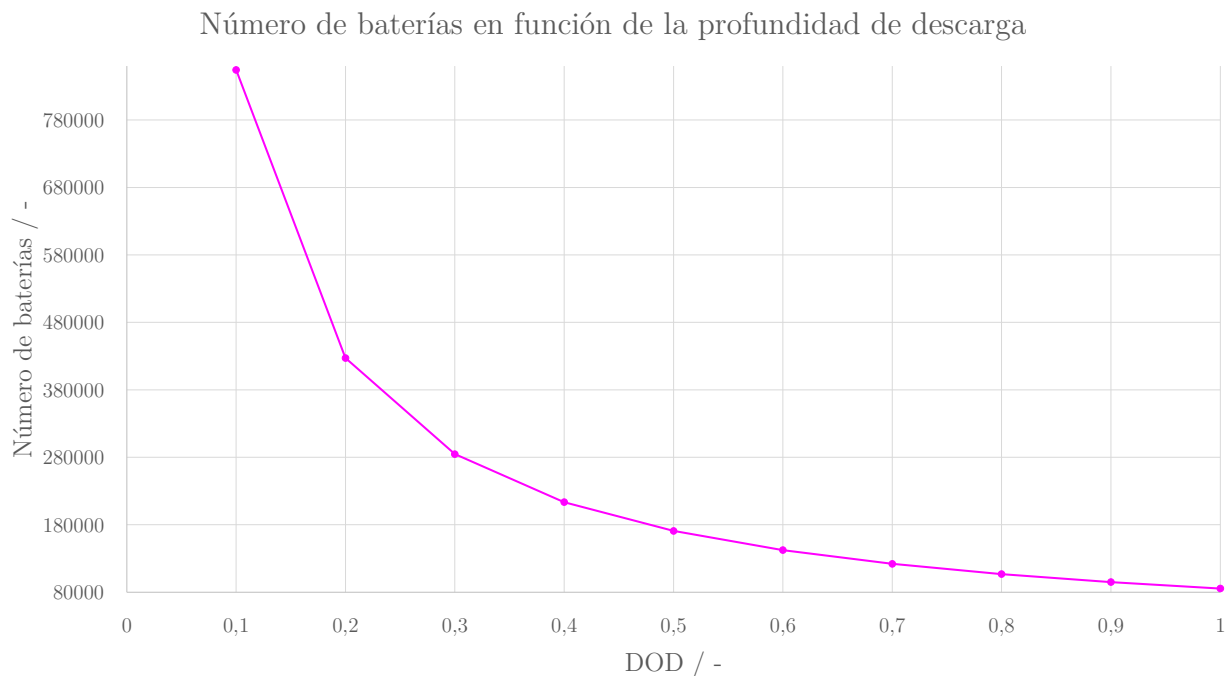


Figura 5.7: Variación del número de baterías con respecto a cambios en la profundidad de descarga de las baterías.

5.2. Resultados Económicos

En la Tabla 5.14 se muestra el costo de los equipos considerados para la cotización de cada sistema.

Tabla 5.14: Costo de los equipos para todos los sistemas en estudio, en moneda nacional, con valores actualizados a diciembre 2019 y considerando ajustes de tamaño y costos de transporte y de impuestos

Sistema	Precio / CLP
SOFC+R	90.048.867.266
SOFC+Int	89.918.410.781
PEM	115.890.580.563
Baterías	167.317.750.080

En la Tabla 5.15 se muestran los resultados del costo de capital para todos los sistemas

en estudio, con el desglose de costos en pesos chilenos.

Tabla 5.15: Costo de los equipos para todos los sistemas en estudio, en moneda nacional, con valores actualizados a diciembre 2019 y considerando ajustes de tamaño y costos de transporte y de impuestos

CAPEX	SOFC+R	SOFC+Int	PEM	Baterías
Directos				
Equipos	90.048.867.266	89.918.410.781	115.890.580.563	167.317.750.080
Instalación equipos	28.815.637.525	28.773.891.450	37.084.985.780	53.541.680.026
Instrumentación y Control	14.407.818.763	14.386.945.725	18.542.492.890	33.463.550.016
Piping	32.417.592.216	32.370.627.881	41.720.609.003	3.346.355.002
Instalación Eléctrica	18.009.773.453	17.983.682.156	23.178.116.113	46.848.970.022
Construcciones y edificación	25.213.682.835	25.177.155.019	32.449.362.558	53.541.680.026
Mejoras del terreno	7.203.909.381	7.193.472.862	9.271.246.445	13.385.420.006
Instalaciones de servicios	36.019.546.906	35.967.364.312	46.356.232.225	66.927.100.032
Terreno	3.601.954.691	3.596.736.431	4.635.623.223	6.692.710.003
Indirectos				
Ingeniería y Supervisión	36.019.546.906	35.967.364.312	46.356.232.225	83.658.875.040
Gastos de Construcción	28.815.637.525	28.773.891.450	37.084.985.780	60.234.390.029
Honorarios de Contratista	10.805.864.072	10.790.209.294	13.906.869.668	26.770.840.013
Contingencia	28.815.637.525	28.773.891.450	37.084.985.780	53.541.680.026
CAPEX	360.195.469.065	359.673.643.124	463.562.322.251	669.271.000.320

Capítulo 6

Discusiones

6.1. Contexto

Sobre el hecho que la fuente energética sea solar no representa mayor diferencia con respecto a otras fuentes de energía que son intermitentes, como la energía eólica. Esto se debe a que el sistema en el estudio tiene un límite de batería que no considera a la planta fotovoltaica como objeto de estudio. Por lo tanto, la energía que entra a la planta es energía eléctrica y no solar (o eólica), es decir, es energía que tendrá un uso directo en el electrolizador o batería y que ya fue transformada en eléctrica en etapas anteriores. Sin embargo, la diferencia radicaría en como se manifiesta la intermitencia de la fuente. Esto se debe a que el caso de la fuente solar, la intermitencia de producción se puede estimar al conocer la trayectoria del sol en cada día y cada época. Esto permite conocer anticipadamente la duración del día y la intensidad de la radiación que se recibirá [10]. Sin embargo, el caso de la energía eólica depende de factores climáticos. Si bien, se pueden hacer pronósticos de las condiciones climáticas que permitan la disponibilidad de viento, estas condiciones van cambiando y se van modificando cada vez más con las crecientes emisiones de efecto invernadero [2]. Por esto último, es que diseñar un sistema de almacenamiento para una planta eólica para largo plazo, requiere la evaluación de la disponibilidad de la energía, considerando una mayor incertidumbre que para el caso solar. Pero resuelta esa diferencia, el sistema de almacenamiento es el mismo para ambos casos.

El estudio se centra en el norte de Chile, sin embargo es replicable en otros lugares. La particularidad de la zona elegida para su realización es la disponibilidad de la energía solar, pero como el sistema de almacenamiento es idéntico para otra fuente de energía, en particular podría ubicarse en otro punto de Chile o del planeta. Sin embargo, como se mencionó en la Sección 1.2, la presencia de nubes en el cielo, hace que la radiación incidente en el sistema fotovoltaico sea menor al caso sin nubes. Por esta razón es que en Chile, el lugar más favorable para capturar la energía solar es el Norte que se caracteriza por su aridez. El Sur de Chile, corresponde a un sistema de latitudes medias, que se caracteriza por presencia constante de nubes y precipitaciones [67]. Aun considerando este aspecto, si se contara con una planta que

generara la misma potencia que la de estudio, los sistemas de almacenamiento se podrían replicar en tal ubicación.

Con respecto al tamaño de la planta fotovoltaica, la potencia de ésta es 100 MW. Sin embargo, la potencia que entra al sistema de almacenamiento es de 60 MW, debido a que 40 MW pasan directamente al consumo domiciliario de la región. La entrada de estos 60 MW al sistema de almacenamiento ocurre durante 10,25 horas, cantidad que corresponde a la duración del día para el solsticio de invierno [68], día con la menor duración de un año. De lo anterior se puede mencionar que la planta fotovoltaica podría ser de potencia menor para efectos de este estudio y el sistema de almacenamiento no vería cambios. Esto porque los 40 MW que se destinan directamente a consumo humano están fuera del límite de batería de este estudio, es decir, es energía que el sistema de almacenamiento nunca recibe. Esto podría implicar que la planta fotovoltaica podría ser de una potencia menor, hasta un mínimo de 60 MW y el sistema de almacenamiento no cambiaría sus dimensiones.

Si ocurriera que el sistema de almacenamiento fuera de menor potencia que 60 MW entonces podría ocurrir que las dimensiones encontradas fueran menores. Sin embargo, esta reducción no ocurriría en todos los casos. Esto porque el sistema fue dimensionado para una potencia de entrada y un tiempo fijos, lo que da como resultado una energía a almacenar de 615 MW-h. Por lo que existe una combinación de tiempo de almacenamiento y potencia de entrada en la que el sistema de almacenamiento sería del mismo tamaño al dimensionado, combinación que se muestra en la Tabla 6.1.

Tabla 6.1: Combinación de potencia de entrada desde la planta fotovoltaica al sistema de almacenamiento y tiempo de entrada de dicha potencia, para que el sistema de almacenamiento sea del mismo tamaño al dimensionado en este estudio (615 MW-h).

t_{alm} / h	Potencia de entrada / MW
10,25	60
10,5	58,6
10,75	57,2
11	55,9
11,25	54,7
11,5	53,5
11,75	52,3
12	51,3
12,25	50,2
12,5	49,2
12,75	48,2
13	47,3
13,25	46,4
13,5	45,6
13,75	44,7
14	43,9

Como se ve en la Tabla 6.1, se tiene un máximo en esta combinación para 14 h [69]. Este

máximo corresponde al solsticio de verano, día más largo del año. Por lo que el sistema de almacenamiento sería del mismo tamaño al dimensionado si para el solsticio de verano, la potencia de entrada fuera de 43,9 MW, lo que puede tener sentido respecto del consumo en la temporada de verano, pues el consumo en el verano no es el máximo del año [70]. (Más detalle en el Anexo A.1).

Con respecto al tiempo de almacenamiento del sistema que es de 10,25 h, se puede mencionar que este tiempo se eligió por tratarse del tiempo de duración del día en el solsticio de invierno, que corresponde al día más corto del año. Esto corresponde al caso menos favorable para la radiación, es decir a la menor entrada de energía en el año. La idea se basa en estudiar la capacidad del sistema de almacenamiento de entregar la energía a la red. Por esto se pone en el caso más desfavorable para corroborar si dicha energía es la energía que la población consume. Sin embargo, es importante mencionar que el resto del año, la energía disponible será mayor por lo que el sistema tendrá mayor energía para almacenar.

Por otro lado, la decisión para el tiempo de salida corresponde al dato de tiempo de energía disponible que se usa en la planta de concentración solar Cerro Dominador. En dicha planta, se concentra la energía solar para fundir sales las cuales permiten generar energía al ser una fuente de calor para procesos de potencia. El tiempo de salida de energía que tiene este sistema de almacenamiento es de 17 a 24 h [92], por lo que se tomó el menor caso posible, por la misma razón que para el tiempo de entrada. Sin embargo, es importante señalar que el tiempo de salida es mayor al tiempo de entrada, por lo que, en un caso ideal donde no se perdiera energía, por Principio Termodinámico, la potencia que saldría del sistema sería necesariamente menor a la de entrada. Es decir, en esas condiciones, la potencia de salida sería de 36,17 MW. Pero como se mencionó anteriormente, se reitera que el valor de 17 h, corresponde a un sistema de almacenamiento de energía de una fuente renovable no convencional, por lo que también se prefirió hacer el estudio con información disponible y para que se utiliza en un caso real. En caso de tener un sistema de almacenamiento ideal sin disipaciones de energía y que entrega una potencia de 40 MW, el tiempo de salida tendría que ser 15,38 h aproximadamente. La otra referencia que se conoce para el tiempo de salida corresponde a la propuesta por M. Pellow *et al.* (Energy & Environ Sci., 2015) de 5 h [6], sin embargo este dato corresponde a una propuesta teórica, por lo que para el presente estudio se prefirió utilizar un dato de una planta real.

Ahora, el hecho de que el tiempo de salida sea mayor al de entrada también genera que el sistema de almacenamiento no se llene completamente cuando ya se comienza a vaciar. Para un caso ideal sin disipaciones de energía, el sistema ingresa 420 MW-h (60 MW durante 7 h), posteriormente 77,5 MW-h (23,83 MW durante 3,25 h) y finalmente retiraría 497,5 MW-h (36,17 MW durante 13,75 h). Esto quiere decir que en el punto de máxima ocupación del sistema, éste estaría utilizado hasta 497,5 MW-h y no hasta los 615 MW-h para los cuales fue dimensionado. Esto le permite al sistema tener un margen de 117,5 MW-h adicionales para almacenar, que en un mismo tiempo de salida de 17 h, corresponderían a 6 MW adicionales. Por lo tanto, esta capacidad disponible le permite al sistema enfrentar situaciones donde la potencia de entrada aumente, que es lo que ocurriría en los meses de primavera y verano. Sin embargo, en la práctica, esta capacidad no se alcanzaría, porque como se comentará más adelante, la potencia de salida del sistema es menor a los 36,17 MW debido a las ineficiencias que generan todos los equipos involucrados.

La potencia de entrada en la que se basa este estudio está estimada al considerar el consumo de la población de la región. Es decir, los 60 MW se obtienen al estimar que la población consume 40 MW. Sin embargo, esa cantidad corresponde al consumo domiciliario de la región, de modo que no se considera al consumo industrial. Como el propósito central de este estudio está orientado hacia la descarbonización de la matriz energética, es importante notar que agregar el consumo industrial es parte necesaria de considerar en el estudio para que la descarbonización ocurra efectivamente. En ese sentido, los sistemas de almacenamiento dimensionados en este estudio, no tienen capacidad suficiente como para abastecer al sector industrial de la región. Tal caso, requeriría estimar el consumo industrial promedio para que la fuente energética entregase una potencia mayor. El efecto de considerar este aspecto, sería que al necesitar más potencia desde la fuente, la potencia de entrada sería mayor, por lo que el sistema de almacenamiento sería más grande.

6.2. Tecnología

La combinación de tecnologías fue escogida debido a que se pretendió seguir la base del estudio realizado por M. Pellow *et al.* (Energy & Environ. Sci., 2015) donde se considera un RHFC con un electrolizador alcalino, tanques de acero inoxidable y una celda PEM. Por el lado de las baterías se sugerían de ion-litio. El estudio finaliza mencionando que un siguiente estudio se realizaría considerando un RHFC con celda de óxido sólido. Tomando esta proyección, es que el presente estudio consideró las SOFCs. De modo que las tecnologías que se eligieron, se escogieron teniendo en cuenta esa base teórica y metodológica.

6.3. Metodología

Las configuraciones elegidas son importantes de mencionar. En el caso del sistema de baterías, el sistema podría haberse ordenado en 4.919 *strings* de 36 celdas cada uno o 36 *strings* de 4.919 celdas cada uno. Si bien el tomar una opción sobre la otra tiene que ver con el voltaje del sistema, en términos generales, esta configuración se considera sencilla debido a que el sistema consiste en las baterías y las conexiones. Es decir, no hay otro tipo de equipo involucrado, por lo que la configuración del sistema solamente consistiría en ese formato de ordenamiento de *strings* y celdas en serie.

Con respecto al caso de la configuración de los RHFC se puede mencionar que una de las diferencias entre los sistemas SOFC y el sistema PEM, es que los sistemas SOFC no incorporan turbinas a la salida de los tanques de almacenamiento de O_2 y H_2O . Esto se debe a que el diseño basal de este estudio, no consideraba turbina más que en el ciclo de Rankine acoplado. Sin embargo, el sistema PEM no llega a las condiciones de temperatura y presión de operación en la celda de combustible si no utilizara dichas turbinas, como se explicó en la Sección 3.2.3. Para el caso de los sistemas SOFC, esto sí se puede lograr sin utilizar turbinas. Por lo tanto, se prefirió tomar los sistemas más simples para el diseño. Sin perjuicio de lo

anterior, se recalca el hecho de que al usar turbinas, la eficiencia térmica de los sistemas SOFC podría aumentar.

También se menciona el hecho de que este estudio considere el almacenamiento de las líneas de O_2 y de H_2O . En estudio de M. Pellow *et al.* (Energy & Environ. Sci., 2015) se propone solamente el almacenamiento del H_2 . Esto se puede explicar en la dificultad para obtener el H_2 con respecto a la disponibilidad del O_2 que está en el aire y el H_2O que tiene diversas fuentes [24]. En este estudio se almacenan esas líneas con el fin de estudiar qué efectos tiene en los parámetros técnico y económico, la incorporación de dichos equipos.

Un aspecto que los tres RHFC es el agotamiento del O_2 en la celda de combustible respectiva. Es decir, la totalidad del O_2 se consume en la combustión. Esto en la práctica no ocurre de esa manera, sino que se suele utilizar solamente un 20 % de la corriente alimentada para evitar que se genere un sobrepotencial de concentración grande a la salida del electrodo. El no hacerlo, implica que incluso si el sistema opera a una corriente constante, el voltaje de la celda se dispara debido a que la presión del gas dentro del electrodo converge a cero. Eso significaría que no se estaría trabajando en un estado estacionario y con un voltaje muy grande¹. Para solucionar eso, se podría utilizar una recirculación del O_2 a la corriente antes de calentarse. La principal razón por la que el presente estudio no consideró este aspecto fue para simplificar el sistema.

Por otro lado, puede mencionarse que al considerar dichas líneas de almacenamiento, también se están agregando más equipos auxiliares que requieren energía para operar, como compresores. Recordando que el sistema SOFC opera a presión atmosférica, esta presión se podría obtener desde el aire atmosférico. Agregar más equipos al sistema de almacenamiento implica que hay más términos involucrados en el cálculo de la η y la ESOI, equipos que se tienen que adquirir, aumentando los el valor del CAPEX. Por lo tanto, otros sistemas RHFC no incorporan esas líneas porque para el cálculo de la eficiencia y ESOI, reducen su valor, generan más posibilidades de que el sistema falle y hacen que el sistema sea más caro de montar que un sistema que no los incluyera [71].

Las condiciones de operación para los equipos secundarios en los sistemas RHFC están en función de las condiciones de operación de los equipos principales. Por lo tanto, de por sí, no podrían modificarse. Si ocurriera que las celdas o el electrolizador funcionaran a una temperatura o presión distintas, entonces las condiciones de operación del resto de equipos deberían cambiar.

Ahora, también es posible que los supuestos sobre la operación fueran distintos, como el tiempo de entrada, el tiempo de salida, la densidad de corriente en el electrolizador y la potencia de entrada. Esto será discutido en la Sección 6.3.3.1.

Con respecto al régimen de operación del sistema, se puede mencionar que éste podría considerarse como semi continuo. Esto porque en estricto rigor, no hay continuidad en la operado pues hay periodos en los que el electrolizador deja de funcionar y otros periodos donde las celdas dejan de funcionar. Sin embargo, si se mira al sistema de almacenamiento

¹Se refiere a un voltaje que, matemáticamente, converge a infinito.

en una escala de tiempo más grande que 1 día de almacenamiento, podría argumentarse que el sistema opera con una periodicidad que podría considerarse como continua.

Como se mencionó, existen periodos en que los equipos electroquímicos, y consecuentemente los equipos auxiliares vinculados a ellos, no operan. Esto puede generar problemas operacionales debido a que por ejemplo, la celda de óxido sólido debe calentarse hasta los 800°C para operar. Del mismo modo, los equipos auxiliares como los calentadores, también tendrían que utilizar un periodo para llegar hasta las condiciones de operación deseadas. Lo anterior, sumado a que el encendido y apagado de equipos pueden generar desgaste [72]. De este modo, una forma de resolver esta situación sería poner el sistema a operar en un tiempo de salida más largo que el actual, de manera de no dejar de operar durante el día. Es decir, que el tiempo de salida de la energía fuera por hasta 24 h. Este cantidad está dentro de los valores esperados de tiempos de almacenamiento, pues en el sistema de concentración solar de Cerro Dominador se trabaja con un rango de 17 hasta 24 h [92], como se mencionó anteriormente. Este aumento en el tiempo de salida, implicaría que la potencia de salida fuera menor a la obtenida, por lo que se alejaría todavía más de la demanda energética domiciliaria de la región. Ahora, para abordar esta misma situación pero en la entrada de energía al sistema de almacenamiento es más complejo, porque de la misma forma, necesitaría poder recibir esa entrada de energía durante 24 h al día. Pero esto es no factible debido a que rompería con la premisa principal del estudio que consiste en realizar este estudio para fuentes de energía que precisamente no tienen la característica de poder entregar un suministro continuo a lo largo del día.

6.3.1. Celdas y Electrolizador

6.3.1.1. Modelos

Con respecto a las ecuaciones para las RHFC, se puede mencionar lo siguiente. Para la densidad de corriente de intercambio en cada electrodo, se tienen expresiones mostradas en las Ecuaciones 3.8, 3.9, 3.10 y 3.11. Estas expresiones son específicas para cada tipo de celda y consideran factores de corrección, como la presión parcial de las especies en cada electrodo, a la Ecuación 3.7. Por esto, se cree que esto permite que los resultados sean más parecidos a la realidad.

Como se mencionó en la Sección 3.3.1.2, la Ecuación 3.6 no tiene solución analítica para el sobrepotencial de activación. Por esto, es que se utiliza la Aproximación de Seno Hiperbólico de dicha expresión, mostrada en la Ecuación 3.12. El estudio de D.A. Noren y M.A. Hoffman (J. Power Sources, 2005) para una celda de óxido sólido que opera a 800°C señala que dicha aproximación se ajusta a la simulación numérica de la Ecuación de Butler-Volmer, con una diferencia del orden de 10^{-2} V, para un rango de densidad de corriente de 0 a 15.000 A m⁻². Pero que presenta diferencias del orden de 0,3 V para casos donde el coeficiente de transferencia de electrones es mayor a 0,7. Para casos donde es 0,5, se asume que la aproximación de Seno Hiperbólico es la que mejor predice el comportamiento del sobrepotencial de activación de dicha celda [47]. Por esto, que se considera que esta

aproximación generaría diferencias de a lo más de 10^{-1} V, con respecto a una simulación matemática de la Ecuación.

Distinto es el caso del electrolizador, donde se utiliza la Ecuación 3.84, conocida como Ecuación de Tafel. Esto se decide principalmente para seguir el modelo planteado en el estudio de Z. Abdin *et al.* (Energy, 2017), donde se realiza el modelamiento de un electrolizador alcalino. De todos modos, se comenta que la Ecuación 3.84 genera desviaciones de la Ecuación de Butler-Volmer para rangos de densidad de corriente pequeños, es decir, cuando la razón $\frac{j}{j_0} \leq 1$ debido a que la Ecuación 3.84 se indetermina. Por lo tanto, esta aproximación no se acerca a los valores reales para dicho rango de valores. Sin embargo, si la relación $\frac{j}{j_0} > 1$, en particular para el rango > 4 , el estudio de D.A. Noren y M.A. Hoffman (J. Power Sources, 2005) señala que el valor entregado por la Ecuación de Tafel, difiere en un rango menor a 10^{-2} V, por lo que sería aceptable utilizarlo. En caso de este estudio, la densidad de corriente de operación escogida es de 4.000 A m^{-2} , por lo que la razón $\frac{j}{j_0}$ es 2,41 para el cátodo y 2×10^8 para el ánodo, por lo que se considerará aceptable en términos de lo expuesto anteriormente.

Por otro lado, en la Ecuación 3.86 puede verse que se agrega la fracción de cobertura de burbujas en la superficie del electrodo como un parámetro que modifica el sobrepotencial de activación. Esto se agrega con el fin de hacer el cálculo, más preciso. La cobertura de burbujas ocurre debido a que en la reacción de electrólisis, se producen gases en los electrodos y las burbujas de estos gases pueden aislar la superficie activa del electrolizador al cubrir los sitios de reacción. Por esto es que al considerar la cobertura de burbujas se espera que el el sobrepotencial de activación sea mayor a un caso donde no se considerara, debido a que se tendría que utilizar energía para poder favorecer la cinética de la reacción [52]. Sin embargo, se consideró que la cobertura de burbujas es idéntica en ambos electrodos y representa el 30 % de la superficie de ambos electrodos, situación que puede no ocurrir en la realidad. Es decir, que ambos electrodos tuvieran coberturas distintas. Esa información no fue posible de encontrar en la revisión bibliográfica por lo que se optó por asumirlo como valores iguales.

La cobertura de burbujas no fue considerada en los modelos de las celdas de combustible, porque los gases entran a cada electrodo desde el *bulk*, es decir, desde la zona exterior a la celda. De este modo, no se genera una zona de burbujas que represente una resistencia óhmica o resistencia a la transferencia de otras especies a través de ese gas.

No obstante, se considera que como la cobertura de burbujas es un parámetro que está dentro de una función logarítmica, el efecto que genera en el sobrepotencial de activación tiene un comportamiento logarítmico². Los efectos significativos se manifestarían cuando $\Theta = 1 - \frac{j}{j_0}$ ó $\Theta = 1$, pues en ambos casos, el sobrepotencial de activación se indetermina.

Entre las Secciones 3.3.1.3 y 3.3.2.3 pueden apreciarse también diferencias en la forma de las ecuaciones difusivas. Esto se refiere a las Ecuaciones utilizadas para modelar la transferencia de masa por difusión en cada sistema. En el caso de las Celdas de Combustible, se utilizaron las Ecuaciones 3.24, 3.25, 3.26, 3.27 para describir las difusividades de Efectiva de H_2 y O_2 , de Knudsen y Molar respectivamente. En circunstancias que en el Electrolizador de usaron las Ecuaciones 3.108, 3.109, 3.107. Esta diferencia se debe principalmente a que

²De crecimiento lento, frente a variaciones

se cuenta con un modelo matemático de referencia el cual fue realizado por Z. Adbin *et al.* (Energy, 2017), donde se encuentran detallados los términos de la difusividad y sus valores. Es por esto que en el modelo del Electrolizador se utiliza la Teoría de Chapman-Enskog para el cálculo de la difusividad efectiva, lo que también considera el cálculo de la integral de difusión colisional y las tortuosidades de las especies. El caso del modelo para las Celdas de Combustible, utiliza ecuaciones de Difusividad que son generales, dejando de lado interacciones moleculares entre las especies del sistema, como sí se considera en la Ecuación 3.110, al considerar la integral de difusión colisional.

Como se puede ver en las Secciones 3.3.1.3 y 3.3.2.3, el modelo considerado se realiza para la dimensión x en las ecuaciones. Esto implica asumir que el fenómeno, ya sea difusivo o cinético, ocurre indistintamente a lo largo del electrodo. Sin embargo, en la realidad es esperable que se genere una distribución de los reactivos a lo largo del electrodo, es decir que haya una difusión también en el eje y . Esto implicaría que hacia los bordes superior e inferior de cada electrodo, habría una gradiente de concentración y que por lo tanto, se generara una distribución de corriente a lo largo del electrodo. Si bien un modelo de esas características es más completo que asumir que la corriente es idéntica en todos los puntos del electrodo, la utilidad de hacerlo está asociada a la optimización y mejoramiento del diseño de equipos. Esto quiere decir que se estudia el comportamiento de la celda, para proponerle mejoras al diseño ya sea físico como de operación. El nivel de detalle del presente estudio consiste en un escalamiento industrial³ el cual no cumple la misma misión, por lo que se considera que no es necesario realizar el modelo con tal detalle.

Por último, con respecto a los modelos utilizados para la resistencia óhmica, se puede mencionar que también existen diferencias entre Celdas de Combustible y Electrolizador. En la Ecuación 3.116 en el modelo del Electrolizador, pueden notarse 2 zonas para el cálculo de la resistencia: una zona cubierta por burbujas y una zona libre de burbujas. Esta distinción es coherente con la incorporación del efecto de las burbujas en el sobrepotencial de activación.

Sin embargo, este factor nuevamente no aparece reflejado en el modelo para Celdas de Combustible. Como se mencionó anteriormente, la cobertura de burbujas tiene efectos en la cinética al cubrir los sitios activos. Y también, al ser especies en estado gaseoso generan una resistencia física al paso de la corriente a través de sí, por lo que se agrega para el cálculo de la resistencia óhmica del electrolizador. Se considera que el contemplar este efecto sobre la resistencia, hace que el modelo sea más detallado.

6.3.1.2. Datos

Con respecto a los datos, se puede mencionar que para el modelo del Electrolizador, se tomaron distintos supuestos con respecto a la cobertura de burbujas. En primer lugar se asumió que la fracción de vacío del sistema es del 30%. Sin embargo, este valor es una función del flujo molar de reactivos alimentados y de la densidad de corriente. En el estudio de F. Hine *et al.* (J. Electrochem. Soc., 1980) se estudia el comportamiento de la fracción de vacío con respecto a las variables anteriormente mencionadas. En el presente estudio, se

³De orden de MW

tomó como dato el valor más alto obtenido en dicho estudio que corresponde a $\phi = 0,3$ [58]. La inclusión o no de este factor, modifica la resistencia óhmica del electrolizador, lo cual es sensible para el sistema, porque para el rango de la densidad de corriente de operación del electrolizador, el voltaje de la celda está controlado por la resistencia óhmica, como puede verse en la Figura 5.1.

Por otro lado, con respecto a las dimensiones físicas de los sistemas mostradas en la Tabla A.1, se puede mencionar que estas dimensiones son típicas para celdas planas de laboratorio [48], [49]. Este tamaño de $0,01 \text{ m}^2$ está estandarizado por lo que también se usa comercialmente, debido a que permite optimizar el apilamiento de celdas en *stacks*. Por lo tanto, se considera que dicho tamaño corresponde a un tamaño común de encontrar en la realidad. Eso no significa que puedan haber celdas más grandes, pero no serán más comunes.

Por otro lado, ambos electrodos, en todos los equipos, ya sea electrolizador como celdas se asume que tienen la misma superficie para que a través de ellos fluya la misma densidad de corriente.

6.3.1.3. Condiciones de operación

Con respecto a las condiciones de operación, se puede mencionar que en el caso del electrolizador, la temperatura de operación de 80°C se elige como recomendación del estudio de Z. Abdind *et al.* (Energy, 2017) en el cual se señala que a dicha temperatura se minimiza la cobertura de burbujas en los electrodos en los electrolizadores alcalinos [52]. De todos modos, éstas pueden operar un rango más amplio de temperaturas hasta los 120°C [52]. Para las celdas PEM, se asumió su temperatura como 80°C para que se encontrara a la misma temperatura que el electrolizador alcalino y que en consecuencia, no se requirieran equipos para ajustar la temperatura entre un ambos equipos. De todos modos, ocurren procesos termodinámicos intermedios que modifican la temperatura, los equipos utilizados para reajustarla, como las turbinas, no requieren energía adicional sino que extraen energía al generar dicho ajuste. Aun así, las celdas PEM pueden operar en un rango de 23 a 120°C [49], por lo que una forma de complementar el presente estudio es revisar el efecto de operar a distintas temperaturas en el par Electrolizador+Celda PEM.

Con respecto a la temperatura de operación de la celda de óxido sólido, se sabe que éstas pueden operar desde 600 a 1.000°C . Sin embargo, las temperaturas de 1.000°C se utilizan regularmente en las celdas de diseño tubular [61]. La temperatura de 800°C se utiliza como recomendación del estudio de C. Singhal (Solid State Ion., 2000), que menciona que para celdas de óxido sólido de diseño planar, es posible utilizar temperaturas menores como 800°C [61]. Como ya se ha comentado anteriormente, la temperatura favorece la cinética, haciendo que el sobrepotencial de activación sea cada vez más pequeño. Sin embargo, el alcanzar temperaturas de 800°C ya implica tener equipos que logren mantener dicha temperatura o calentar los reactivos hasta esa temperatura, por lo que se requiere una entrada externa al sistema que hace que la eficiencia del sistema disminuya. De todos modos, se comenta que se podría complementar el presente estudio considerando el uso de celdas tubulares y así utilizar temperaturas de hasta 1.000°C .

6.3.1.4. Curvas de operación

La principal diferencia entre la curva de voltaje en las celdas de combustible y el electrolizador, es que para las celdas, el voltaje es decreciente con respecto a la densidad de corriente, como puede verse en las Figuras 5.2 y 5.3. En el electrolizador ocurre el caso contrario, como puede verse en la Figura 5.1. Esto se debe a que el electrolizador corresponde a una celda electrolítica, como se definió en la Ecuación 3.81, mientras que las celdas de combustible son galvánicas, como se definió en la Ecuación 3.1. Esto significa que el electrolizador necesita una entrada de energía para operar, mientras que las celdas de combustible extraen energía del sistema químico. Por lo tanto, la forma de las curvas presentan la forma esperada [46].

Con respecto a la forma de la curva de densidad de potencia, ésta alcanza un punto máximo en las celdas de combustible mientras que en el electrolizador es creciente, debido a la relación entre el voltaje de la celda y la densidad de corriente anteriormente mencionada. De todos modos, se puede señalar que para el caso del electrolizador, la densidad de corriente de intercambio límite es del orden de 10^7 A m^{-2} . Eso significa que para tal rango de densidad de corriente, el voltaje del electrolizador y por tanto, la densidad de potencia, se indeterminarán.

Con respecto a la forma misma de las curvas se puede notar que existen diferencias en entre las celdas de combustible. En la Figura 5.2 se aprecia que para densidades de corrientes cercanas a 0, presenta una caída de voltaje de aproximadamente 0,4 V. La celda de óxido sólido presenta la misma caída de voltaje con una variación de aproximadamente 8.000 A m^{-2} , como puede verse en la 5.3. Esto se debe a que la celda de intercambio protónico opera a una temperatura de 80°C y la de óxido sólido a 800°C . Como puede verse en la Ecuación 3.6, el sobrepotencial de activación es función de la temperatura. Eso quiere decir que a mayores temperaturas, la cinética se favorece. Por lo que, temperaturas altas, el término del sobrepotencial de activación tiene menor magnitud que en el caso de celdas con temperaturas más bajas, como 80°C [49].

En la zona de control por resistencia óhmica de las curvas, el caso de la celda PEM tiene una menor pendiente que la celda SO. De hecho, la celda SO tiene una apariencia lineal en caso todo el rango de la simulación. Esto quiere decir que el fenómeno dominante en la celda SO es la resistencia óhmica [73], incluso no mostrando el efecto de los otros fenómenos (difusivo o cinético), en circunstancias que en la celda PEM sí se pueden apreciar. Esto se ve influenciado por aspectos del diseño y los materiales de la celda, como el espesor de los componentes y sus conductividades. En este caso particular, se aprecia que la celda PEM no tienen dominancia por la resistencia óhmica, sino que por el sobrepotencial de activación [49].

Para el caso del electrolizador, la curva también se aprecia predominantemente lineal, donde la magnitud de la resistencia óhmica es superior a los otros fenómenos dentro de este equipo, incluso si la temperatura de este equipo sea igual a la de la celda PEM. Esto se debe a la resistencia del diafragma que es $0,016 \Omega$ siendo que la resistencia total de la celda de óxido sólido es de $0,002 \Omega$, por lo que la resistencia óhmica en el electrolizador es el fenómeno que domina la cinética [52].

De las condiciones de operación obtenidas desde las curvas de polarización se muestran en la Sección 5.1.1.1, puede notarse una diferencia entre los valores de las densidades de corriente. Mientras que para la celda de óxido sólido es 13.316 A m^{-2} , para la celda de intercambio protónico es $4,75 \text{ A m}^{-2}$. Esta diferencia se debe a la temperatura de operación de cada una, pues como se mencionó anteriormente, la cinética se ve favorecida con mayor temperatura. Aunque la principal diferencia se atribuye a la cinética de la celda, como puede verse en la 6.2, la densidad de corriente límite del ánodo para la PEMFC es de $4,78 \text{ A m}^{-2}$ mientras que para la SOFC es de $2,6 \times 10^7 \text{ A m}^{-2}$. La diferencia entre ambos casos es tan grande que independiente de que se pueda aumentar la temperatura de la PEMFC, la densidad de corriente límite no permitirá que se opere en un rango mayor. Si bien, la densidad de corriente límite sí es una función de la temperatura, el aumento de dicha temperatura no es capaz de contrarrestar a los otros factores involucrados, como la difusividad efectiva. En la Tabla 6.2 se aprecia que las difusividades en el caso de la PEMFC son por lo menos 5 órdenes de magnitud, menores que para la SOFC. Esto señala que la capacidad de los materiales de los electrodos para transferir especies a través de sí, es bajo. Por lo tanto, se cree que los valores utilizados para calcular la difusividad efectiva en la PEMFC, no son apropiados.

Tabla 6.2: Comparativa entre los valores de la cinética difusional entre las PEMFC y SOFC.

	PEMFC	SOFC
$j_{L,O_2} / \text{A m}^{-2}$	4,1	$2,4 \times 10^{11}$
$j_{L,H_2} / \text{A m}^{-2}$	4,78	$2,68 \times 10^{10}$
$j_{L,H_2O} / \text{A m}^{-2}$	No aplica	$1,45 \times 10^{10}$
$D_{\text{eff}}^{O_2} / \text{m}^2 \text{ s}^{-1}$	$1,1 \times 10^{-10}$	$1,92 \times 10^{-5}$
$D_{\text{eff}}^{H_2} / \text{m}^2 \text{ s}^{-1}$	$2,59 \times 10^{-11}$	$7,95 \times 10^{-5}$
$D_{\text{eff}}^{H_2O} / \text{m}^2 \text{ s}^{-1}$	No aplica	$4,3 \times 10^{-5}$

Para el caso del electrolizador, el valor de la densidad de corriente es un valor obtenido ocupado por electrolizadores alcalinos industriales. Los valores del voltaje de operación y subsecuentemente, de la densidad de potencia se obtienen de dicho supuesto.

6.3.2. Baterías

6.3.2.1. Modelo

Haciendo una revisión general del modelo planteado para las baterías de ion-litio en la Sección 3.3.3, puede notarse que no hay un análisis fenomenológico como ocurre en el modelo para celdas y electrolizador. Lo que se aprecia, es un modelo orientado a parámetros operacionales del sistema: voltaje de operación, capacidad de almacenamiento y densidad de descarga. Es decir, no se considera en el modelo, aspectos como el transporte de iones dentro de la batería o de potenciales en los electrodos. Esta diferencia se debe a que las baterías son una tecnología de mayor relevancia en el mercado, es decir, que se comercializa en grandes volúmenes, con un mercado avaluado en 30.186,8 millones de dólares en 2017 [74], mientras que el mercado de las celdas de combustible de un avalúo de 342 millones de dólares en

2019 [75]. Esto implica que el desarrollo tanto tecnológico como comercial de las baterías de ion-litio ha optimizado su diseño hasta un punto en el que para dimensionar un sistema de baterías, se necesitan valores operacionales solamente [59] y no necesariamente un análisis fenomenológico.

Otra diferencia fundamental entre el modelo de baterías y el modelo de celdas es el considerar la temperatura. El modelo de baterías no considera la temperatura de operación como un parámetro de operación. Si bien las baterías de ion-litio tienen una temperatura de funcionamiento entre los -25 y los 40°C [38], el no considerar este aspecto implica que desde el modelo no se puede ajustar la operación de los equipos a otras condiciones más que las que señale el fabricante. En virtud de lo anterior, se puede señalar que los equipos tienen menor versatilidad, operacionalmente hablando, que el RHFC.

Sin embargo, el presente estudio se realiza con esta diferencia debido a que se busca realizar este estudio con las herramientas metodológicas y de modelo más actuales y contingentes, para ser más cercanos a la aplicación industrial. Por lo tanto, se reconoce la diferencia entre los modelos, pero se recalca que ambos representan el nivel de desarrollo comercial de cada tecnología.

6.3.2.2. Datos

Los datos utilizados para la eficiencia están sacados de la hoja de datos del fabricante de las baterías. En este caso se señala que las baterías tienen una eficiencia del 96 %, que se condice con la eficiencia del 94-99 % encontrada en el estudio de Z. Yang *et al.* (Chen. Rev., 2011) [38]. Y ese es el valor que se utiliza en el modelo. Si bien se puede plantear un modelo para calcular la eficiencia, no se considerará, pues las baterías, al ser una tecnología madura en el mercado, solamente se tomarán como referencia para este estudio, por lo que el foco de este estudio era definir las ecuaciones para dimensionar un sistema de baterías. Una forma de mejorar el presente estudio sería precisamente, deducir un modelo para el cálculo de la eficiencia de las baterías considerando condiciones de operación.

Otro aspecto importante de mencionar tiene que ver con el uso de las baterías. El sistema fue dimensionado utilizando las dimensiones y datos de operación para baterías de automóvil. Es decir, baterías adaptadas para la electromovilidad. Esto genera una diferencia respecto de las baterías más adecuadas para una aplicación *grid*. La diferencia radica en que las baterías para automóviles están diseñadas para carga rápida y para ser lo más livianas posible [38]. Mientras que las baterías para usos estacionarios tienen como principal objetivo el tener larga vida útil⁴ y largos ciclos de carga y descarga⁵ [38]. Por lo tanto, las baterías mostradas en este estudio podrían tener un desempeño de menor calidad que las baterías diseñadas para este tipo de aplicación. De este modo, la energía de retorno y la eficiencia de este sistema podrían ser mayores a las calculadas.

⁴Mayor a 15 años.

⁵Mayor a 10.000 ciclos.

6.3.2.3. Condiciones de operación

El sistema opera en un voltaje de 24 V porque son las condiciones sugeridas por el fabricante de las baterías utilizadas y porque es el mismo voltaje que se utiliza en el caso referencial de Berlín, Alemania [93]. De todos modos, un sistema de baterías puede operar a menor voltaje, llegando hasta 12 V para sistemas de 200 kW o menos [76]. Para sistemas del orden de MW, se puede aumentar el voltaje a 36 o 48 V, pero este factor se debe revisar en conjunto con la capacidad de las baterías mismas.

De todos modos, la implicancia directa de operar a un mayor voltaje es que el número de baterías sería menor a las unidades calculadas.

6.3.2.4. Resultados en baterías

De las ecuaciones de diseño se obtiene que la cantidad de celdas es de 110 unidades, ordenadas en 10 *strings* de 11 celdas cada uno. El ordenamiento se hace en *strings* porque si no se hiciera de esta manera, uno de ellos podría tener un voltaje distinto al resto y eso generaría que la corriente que fluye por cada *string* no fuera la misma. Si esto ocurriera, el sistema podría terminar generando un corto circuito que haga que un flujo mayor de corriente pase por el *string* que genere menor resistencia arruinando las baterías mismas u otras partes de un sistema. De este modo, siempre se debe asegurar que los *strings* tengan siempre el mismo voltaje.

6.3.3. Balance de masa y energía

En primer lugar se menciona el régimen de operación: la energía entra al sistema por 10,25 h y sale por 17 h. Para un ciclo de 24 h, existen 7 h de entrada neta y 13,75 h de salida neta del sistema. Entonces, en estricto rigor, el sistema es continuo solamente durante 3,25 h. Sin embargo las ecuaciones se plantean como si el sistema fuera indistintamente continuo. Esto se realiza así debido que al conocer la frecuencia con la que el sistema tiene entrada neta y salida de energía, se puede decir que el sistema es continuo en un margen de tiempo más grande que 24 h. Por lo tanto, al tener la certeza de la duración de los periodo de entrada y salida neta, permite que el sistema sí pueda considerarse como continuo.

Por otro lado, se asume que los equipos donde existe separación de especies como los condensadores o el separador de fases, realizan dicha operación íntegramente. Esto quiere decir, que a la salida de dichos equipos las corrientes son de especies puras. Esto no necesariamente ocurre, por lo que sería probable que existiera contaminación en ambas corrientes. Eso significaría que por ejemplo, la corriente de H₂ llegara al electrolizador con cierta humedad o que el H₂O llegara al electrolizador con trazas de H₂.

También, se asume que el sistema no tiene reacciones adicionales. es decir, no se producen reacciones parasitarias en ningún equipo electroquímico o no existen entradas de especies

parasitarias que puedan contaminar las corrientes y reaccionar con ellas. Si bien esto podría pasar, no es simple predecir qué pueda contaminar las corrientes porque eso depende de diversas variables como el lugar en el que se ha ubicado la planta o si hay otros procesos ocurriendo cerca de la planta, la humedad ambiental del lugar, la temperatura, que puedan favorecer la degradación de las tuberías y con ello la contaminación de las corrientes.

Las ecuaciones del balance de masa no consideran las pérdidas de masa, es decir, no son capaces de predecir si se presentan fugas y tampoco pérdidas. Estas situaciones a la larga se pueden presentar de todos modos en los sistemas y si tal fuera el caso, se tendría que recargar el sistema con H_2O en algún momento de la operación. Pero para estimar dicha cantidad o las reparaciones físicas que se deben realizar, se debe hacer una revisión a parte que este estudio no aborda.

Mismo es el caso con el aislamiento térmico del sistema. Algunos equipos y en particular las tuberías y conexiones se asumen adiabáticos. Pero en la práctica, el calor de todos modos es probable que se disipe. En ese sentido, las temperaturas de operación no se alcanzarían en los equipos y por ello sería necesario aumentar la potencia de algunos equipos para realizar dicho ajustes.

6.3.3.1. Resultados del balance de masa y energía

El balance de masa para los tres RHFC es idéntico, salvo por el sistema SOFC+R que tiene un ciclo cerrado de agua para el ciclo Rankine. Pero el ciclo principal presenta los mismo valores de producción de H_2 en el electrolizador y de consumo de H_2 en las celdas de combustible, como puede verse en las Tablas 5.4, 5.7 y 5.10. Esto se debe a que en los 3 casos, el balance de masa se hace como función del flujo de H_2 que se produce en el electrolizador. Es decir, todas las otras corrientes quedan expresadas como una función de dicho flujo. Y dado que la potencia de entrada al electrolizador y su densidad de corriente son datos de este estudio, los 3 sistemas presentan los mismo flujos. El hecho de que todos los flujos sean iguales, permite realizar la comparación del funcionamiento de los sistemas, pues la única diferencia entre ellos será el funcionamiento de los equipos auxiliares y cada celda de combustible, para finalmente encontrar diferencias en la η y ESOI.

Un caso similar de RHFC donde se almacena energía de una fuente de ERNC. El caso de la planta eólica de Galicia presenta una celda PEM y un electrolizador alcalino. En este sistema, el flujo volumétrico de H_2 producido es de $60 \text{ Nm}^3 \text{ h}^{-1}$ y el flujo consumido por la celda es de $70 \text{ Nm}^3 \text{ h}^{-1}$. La potencia que recibe el sistema es de 17,6 MW y la potencia de las celdas es de 55 kW [77]. El sistema encontrado en el presente estudio tiene un flujo de H_2 producido en el electrolizador de $456,7 \text{ Nm}^3 \text{ h}^{-1}$ y de flujo consumido en la celda de $275,4 \text{ Nm}^3 \text{ h}^{-1}$. Puede notarse que la producción específica de H_2 en el caso de Galicia es de $3,4 \text{ Nm}^3 (\text{h MW})^{-1}$ mientras que para este estudio es de $7,6 \text{ Nm}^3 (\text{h MW})^{-1}$. Esta diferencia podría producirse, entre otras cosas, por la presión de operación del electrolizador del caso en Galicia pues opera a 10 bar [77]. Aunque también se ve directamente influenciado por la cinética elegida para el electrolizador. Esto porque el flujo de especies gaseosas a almacenarse proviene directamente desde el electrolizador. De este modo, al haber elegido una densidad de corriente de operación

menor, el número de estanques se reduciría consecuentemente. Considerando lo anterior, se puede mencionar que el sistema planteado en el presente estudio tiene una capacidad mayor de producción de H_2 , es decir, 1 Nm^3 producido tiene mayor rendimiento respecto de la energía necesaria producirlo que en el caso de Galicia. De todos modos, para tal referencia hace falta conocer la densidad de corriente del electrolizador, que no está reportada para el caso de Galicia. En el estudio de K. Agbossou (Int. J. Hydrog. Energy, 2012) se menciona que los electrolizadores alcalinos industriales pueden tener una producción de H_2 de hasta $760 \text{ Nm}^3 \text{ h}^{-1}$. Y además, que el objetivo de las empresas fabricantes de electrolizadores, es construir equipos cuya densidad de corriente sea de 1.000 A m^{-2} para mejorar la eficiencia global de los sistemas que operan a presiones mayores a 10 bar [53]. Si tales condiciones se aplicaran al presente estudio, la eficiencia del sistema aumentaría a 16,7% y la ESOI a 41 para el caso del sistema SOFC+R y se prevé la misma tendencia para los sistemas SOFC+Int y PEM. Por lo tanto, la densidad de corriente escogida de 4.000 A m^{-2} podría reducirse y con ello aumentaría la eficiencia y la ESOI de los sistemas. El punto en contra que se encuentra con este cambio es que el área de los electrolizadores aumentaría a 12.281 m^2 , por lo que aumentaría considerablemente el valor del proyecto, considerando que el valor actual es de 2.731 m^2 , como puede verse en la Figura 5.5

Como se ve en la Tabla 5.9, el área requerida para las celdas PEM es de $1.400.880 \text{ m}^2$, que para celdas de $0,0126 \text{ m}^2$ corresponde a un total de 111.180.960 celdas. Esto es 5 órdenes de magnitud más grande que el caso de la cantidad de celdas de SO que son 49.470 unidades y el electrolizador con 91.050 unidades. Esta gran diferencia en sus valores, se debe a la densidad de corriente de operación de la PEMFC, que es 4 órdenes de magnitud menor que para la SOFC o el electrolizador, es decir, el número de equipos se ve directamente relacionado con la cinética de estos, por lo que queda en evidencia el contar con valores cinéticos apropiados para el diseño que se va a realizar. Lo anterior genera que la principal dificultad técnica sea el espacio para montar el proyecto. Si las PEMFC organizadas en 2.223.620 *stack* se ubicaran una al lado de la otra, ocuparían 28.000 m^2 , que corresponde a la superficie de 4 canchas de fútbol⁶ [78] aproximadamente. Este aspecto hace que el sistema con PEMFC pierda relevancia para el estudio, porque su tamaño lo hace automáticamente inviable.

Con respecto al tamaño de los equipos electroquímicos dimensionados, se puede mencionar que los proyectos industriales que se conocen, no declaran la cantidad de celdas o el área de estas, ya sea de electrolizadores o celdas de combustible como se realiza en el estudio de G. Gahleitner (Int. J. Hydrog. Energy, 2013) donde se revisan 28 proyectos de RHFC en el mundo [79]. En tal caso se puede mencionar el proyecto 'DTE Energy Hydrogen Technology Park.^{en} Michigan, Estados Unidos, en el cual se utilizan cuatro celdas PEM de 10 kW de potencia cada una y un electrolizador alcalino de 99 kW de potencia que produce H_2 a una tasa de 48 kg día^{-1} [79]. Entonces, si bien, no se conocen las áreas de los equipos, se puede hacer una comparación de su producción específica: en el caso estadounidense, la producción específica es de $484,8 \text{ kg (día MW)}^{-1}$ y el caso de este estudio es de $70,3 \text{ kg (día MW)}^{-1}$. De este modo, se puede intuir que dado que la producción específica es menor para el presente estudio, el sistema tiene menor capacidad productiva por cada MW consumido, de modo que tiene menor área la del caso estadounidense. De todos modos, esto podría explicarse desde el punto de vista cinético, lo que fue discutido previamente. Debido a esta comparación, se

⁶De superficie de $7.040 \text{ m}^2 = 64 \text{ m} \times 110 \text{ m}$

creo que las celdas de combustible también estarían sobre estimadas.

6.3.3.2. Variación de parámetros

Con el fin de ver el impacto del cambio en el sistema RHFC, se genera la variación de parámetros para algunos valores relevantes del sistema. En la Figura 5.4 se puede ver el comportamiento del flujo de H_2 producido en el electrolizador y la potencia de salida de cada sistema con respecto a cambios en la corriente del electrolizador. Puede notarse que a medida que la corriente aumenta, el flujo de H_2 es mayor. Es decir, mientras más corriente fluya por el sistema, mayor será la producción del gas, tal como señala la Ley de Faraday. Y debido consecuentemente con el aumento del flujo de H_2 , eso implica que hay más disponibilidad de combustible para utilizarse en las celdas de combustible. Por lo que también aumenta la potencia de salida de los sistemas.

Otro aspecto que se puede ver en la Figura 5.4 corresponde a la tendencia en la potencia entre los sistemas. Es decir, el sistema que presenta mayor potencia de salida es el sistema SOFC+R y el de menor potencia es el sistema PEM y ese orden se mantiene a en el rango de evaluación.

En la Figura 5.5 se hace una comparación entre las áreas de los equipos y la densidad de corriente del electrolizador. Esto se hace con el fin de reforzar la idea de que en este sistema el área total de los equipos electroquímicos no es fija, sino que se obtiene desde los balances de masa y energía. Por otro lado, en la Figura 5.5 también puede apreciarse la sensibilidad de dimensionamientos los equipos electroquímicos respecto de la densidad corriente de operación del electrolizador. Puede notarse que para corrientes menores a 500 A m^{-2} , el área total de los sistemas tiene un crecimiento considerable. Esto se debe a que en ese rango, el voltaje del electrolizador está siendo dominado por el sobrepotencial de activación el cual tiene un comportamiento logarítmico y como tan, para valores cercanos a 0, se indetermina.

6.4. Parámetros técnicos

Con respecto a la Energía de Retorno se puede mencionar que esta herramienta solamente considera a la energía eléctrica de cada equipo. De este modo, se deben ajustar los valores de la estimación por un coeficiente de corrección que corresponde a la eficiencia de la red eléctrica que es 0,3 [6]. Sin embargo, este parámetro corresponde a la eficiencia de conversión de una red eléctrica que no es chilena, por lo dicho coeficiente podría no ser el más adecuado para el caso de Chile. En ese sentido, los resultados obtenidos podrían estar desviados de la realidad.

Por otro lado, el ESOI tampoco considera a los equipos que disipen calor, como los condensadores. Una definición modificada del ESOI que considerara este aspecto tendría un valor menor debido a que estos equipos sí forman parte de los sistemas propuestos y

sí se utiliza energía para fabricarlos, de modo que el no considerarlos en el cálculo, hace que la herramienta no cuantifique la capacidad de los equipos de retornar energía invertida en ellos. Similar es el caso para los tanques de almacenamiento de las especies O_2 y H_2O . Estos tanques tampoco se contabilizan en la ESOI, porque para contabilizar un tanque, se necesita ponderar por el poder calorífico de la especie que está dentro de sí. Sin embargo, el poder calorífico se calcula solamente para especies que son combustibles, característica que no tienen el O_2 ni el H_2O . Por esto mismo, se refuerza la idea de que el ESOI, podría tener una definición corregida y en tal caso su valor sería menor al calculado.

Con respecto al caso del tiempo de vida útil τ de los equipos no electroquímicos es más largo que el tiempo de evaluación, genera desviaciones de la realidad. Esto porque los equipos pueden fallar en un periodo más corto. Por ejemplo, los compresores tienen una vida útil de 10 a 15 años [80], las bombas de 2 a 5 años [81] y las turbinas de 7 a 14 años [82]. Como puede notarse, estos equipos tienen distintas vidas útiles, por lo que considerar este aspecto en el cálculo es relevante pues aumentará la tasa con la que se tienen que renovar los equipos y eso implica directamente que hay más energía invertida en construcción, haciendo que el valor del ESOI disminuya. Y por último, tampoco se consideraron en el cálculo, valores como las tuberías, conexiones eléctricas, controladores, válvulas, llaves de paso, etc. Estos factores son relevantes para el funcionamiento del sistema sin embargo, no fueron considerados. Si estos términos se agregasen, en una ESOI corregida, su valor sería menor al calculado en este estudio.

La ESOI para las baterías solamente depende de la eficiencia de las baterías como valor operacional. Una definición que esté en función de los parámetros operacionales del sistema sería más cercana a la realidad para este sistema. Los valores de los coeficientes de la Ecuación 4.6 pueden no ser los mismos que para las baterías escogidas. Es decir, pueden haber diferencias en la estimación de dichos coeficientes respecto de los coeficientes que tendrían las baterías elegidas para este estudio. En ese sentido, el valor de la ESOI podría modificarse si se conocieran esos coeficientes correctamente.

Con respecto a la eficiencia, se menciona que por como está definida para los sistemas SO corresponde a una eficiencia térmica de ciclo. Es decir, la energía de salida del sistema es el trabajo neto que el sistema genera y este valor se compara con el calor total de entrada que el sistema recibe. Esta definición se considera debido a que para el RHFC, esto representa la eficiencia conjunta de todos los equipos, funcionando como un sistema de almacenamiento. Es decir, la eficiencia térmica del RHFC tiene sentido porque representa el funcionamiento de todos los equipos, que componen el sistema de almacenamiento, pues el propósito de este estudio es retratar la eficiencia del sistema de almacenamiento como un todo. Esto se menciona para contrastar esta eficiencia con la eficiencia de las baterías. En el caso de las baterías, la definición de la eficiencia corresponde a la fenomenología eléctrica de los equipos y no considera aspectos termodinámicos. Es decir, los aspectos que generan pérdidas de eficiencia se asocian a resistencias eléctricas del sistema con las respectivas corrientes, mientras que en el RHFC se consideran pérdidas térmicas. Si bien estas definiciones se ven sumamente diferentes, se cree que lo más relevante para el presente estudio es retratar la eficiencia del sistema de almacenamiento completo. Por ello que a pesar que las eficiencias se definan de manera distinta, ambas definiciones responden al cálculo de la eficiencia de un sistema de almacenamiento, incluyendo a todos los equipos que cada sistema involucre.

Por lo tanto, considerando que el RHFC tiene mayor diversidad de equipos y cambios termodinámicos en las distintas etapas, se cree que esto generará que su valor sea menor al valor del sistema de baterías, pues el ciclo de Carnot tiene una eficiencia máxima de 40 % [44].

De todos modos se calculó la eficiencia de conversión de los equipos electroquímicos de cada RHFC: electrolizador y celda de combustible, para tener una eficiencia que pudiese compararse con el caso de las baterías, en términos electroquímicos.

6.4.1. Resultados de parámetros técnicos

6.4.1.1. Eficiencia

Como puede verse en la Tabla 5.12, el sistema de baterías tiene la mayor eficiencia y la mayor ESOI. Esto implica que este sistema es el que presenta el mejor desempeño técnico.

Por otro lado, si se comparan las configuraciones de las celdas de óxido sólido, puede notarse que la utilización de un ciclo de Rankine acoplado tiene mejor desempeño que precalentar las corrientes de H_2 y de O_2 . Es decir, la potencia que se genera en la turbina del sistema SOFC+R es mayor que el calor requerido por los calentadores 1 y 2 en el sistema SOFC+Int.

Con respecto a las dos celdas en estudio, puede apreciarse que ambos sistemas SOFC tienen tanto η como ESOI mayor que el sistema PEM. Esta diferencia se debe a que los sistemas SO poseen una mayor potencia total de salida: 4,57 MW en el SOFC+R, 3,69 MW en el SOFC+Int versus 3,64 MW en el PEM. Es decir, incluso si el sistema PEM opera a menor temperatura y se generan cambios termodinámicos en la misma magnitud que en los sistemas SOFC, es más conveniente que dichos cambios sí ocurran. Por lo tanto, es más conveniente operar a 800°C que a 80°C.

Luego, si se realiza la comparación entre los sistemas RHFC y el sistema de baterías, puede verse que el sistema de baterías tiene una eficiencia aproximadamente 1 orden de magnitud mayor a la de cualquier sistema RHFC. Se cree que esta situación ocurre debido a 2 factores principalmente. El primero tiene que ver con la cantidad de equipos involucrados en cada sistema. Los RHFC son sistemas complejos, que cuentan con más de 2 equipos distintos, mientras que los sistemas de baterías son esencialmente, solo baterías conectadas de alguna manera en particular. Los distintos equipos generan cambios termodinámicos a las especies del sistema, por lo tanto, los equipos tienen trabajos o calores involucrados que en algunos casos corresponden a energía que se disipa, es decir, que se pierde. Sin embargo, las baterías no necesitan generar cambios de presión ni temperatura en las especies para dentro de ellas para operar.

6.4.1.2. ESOI

Con respecto a la ESOI, la tendencia es similar. El sistema SO que usa un ciclo de Rankine acoplado tiene mayor ESOI que un sistema que solo precalienta las corrientes en el sistema SOFC+Int. Sin embargo, cuando se hace la comparación entre los sistemas SOFC y el sistema PEM puede notarse una diferencia de casi 3,5 veces en el valor. Esta diferencia se debe a los términos involucrados en el cálculo de la ESOI. Como fue discutido con anterioridad, el sistema PEM cuenta con menos equipos que los sistemas SOFC, por ejemplo, no cuenta con calentadores ni condensadores. Además, la potencia de salida de sus sistema es menor a la de lo sistemas SO. De este modo, el cálculo de la ESOI será menor que para los sistemas SOFC.

Cuando se realiza la comparación entre los RHFC y el sistema de baterías, puede notarse que el sistema de baterías es levemente mayor que el sistema SOFC+R. El valor de ESOI para baterías es un cálculo hecho utilizando constantes en vez de parámetros operacionales de las baterías, como podría ser la potencia de salida y el tiempo de vida útil junto con la tasa de renovación de baterías. Por el contrario, se utilizan los términos de números de carga y descarga, densidad de descarga e intensidad energética de las baterías. El parámetro que sí es operacional es la eficiencia de la batería, pero en este estudio, ese valor se asumió como una constante que se extrae de la hoja de datos del fabricante de las baterías, por lo que también se considera constante. En ese sentido, la ESOI para las baterías se asume como una estimación más gruesa que para los RHFC, pues su cálculo solamente se basa en constante que fueron encontradas en bibliografía, en circunstancias que para los RHFC, los cálculos se realizaban desde los balances de masa y las condiciones de operación elegidas para el estudio. Una de las implicancias que se podrían obtener de una estimación más gruesa es que los resultados estén sobre estimados, es decir, que los valores sean mayores a los que serían en la realidad si el estudio se hubiera hecho en el mismo nivel de rigurosidad que para las RHFC.

También es relevante mencionar que el cálculo para la ESOI se realizó para un horizonte de evaluación de 20 años. En este período, hay equipos que podrían ser cambiados más de una vez, particularmente para baterías, que se sabe tienen una vida útil de entre 4 a 7 años [66]. Esto implicaría, que para un horizonte de 20 años de operación, las baterías se reemplazarían como mínimo 2 veces. Es decir, se tendrían que fabricar 213.600 baterías para este proyecto. Lo anterior implicaría que el sistema de baterías tuviera una ESOI menor a la determinada en este estudio, debido a dicha reposición. Por lo tanto, como la diferencia entre las baterías es de aproximadamente 3 puntos, esta diferencia podría acortarse más o incluso invertirse si el modelo fuera modificado considerando valores operacionales y el reemplazo de los equipos.

6.4.1.3. Valores referenciales

Con respecto a valores referenciales, del estudio de M. Pellow *et al.* (Energy & Environ. Sci., 2015) se muestran en la Tabla 6.3. Además, se menciona que para RHFC, no existen estudios que se hayan realizado para celdas de óxido sólido.

En primer lugar, puede notarse que en el mencionado estudio, la ESOI de las baterías

es menor a la ESOI del RHFC con celdas PEM. Esto se debe a que la producción de materiales para la RHFC tiene menor intensidad energética que para la construcción de las baterías de ion-litio [6]. Ahora la eficiencia en las baterías es mayor al RHFC debido a los diferentes funcionamientos de los equipos, la eficiencia en un caso solamente depende de las baterías y en el otro, depende de 2 equipos electroquímicos, un tanque y un compresor, por lo que la eficiencia disminuye al haber más equipos involucrado y donde existen cambios termodinámicos. Teniendo lo anterior en cuenta, se puede notar que existen diferencias entre los casos referenciales y los encontrados en el presente estudio, como puede verse en la Tabla 6.3.

Tabla 6.3: Comparación de valores encontrados en el presente estudio y el de M. Pellow *et al.* (Energy & Environ. Sci., 2015).

Sistema	Estudio	η / -	ESOI / -
RHFC PEM	Presente estudio	9,72	8
	M. Pellow (2015)	30	59
Baterías ion-litio	Presente estudio	96	33,9
	M. Pellow (2015)	83	35

Para el caso del RHFC, la diferencia de 59 a 8, se debe principalmente a 2 aspectos: en la cinética de la PEMFC y la configuración del sistema. En primer lugar, como se ha mencionado con anterioridad, la densidad de corriente de operación de la PEMFC es 3 órdenes de magnitud menor a la de la SOFC, lo que se debe al aspecto difusivo de la celda. Esto impacta en el tamaño que tiene el sistema y en la capacidad de éste para producir potencia de salida. En segundo lugar, en el RHFC planteado en el estudio de M. Pellow *et al.* (Energy & Environ. Sci., 2015), el sistema cuenta con un electrolizador alcalino, un compresor de H_2 , tanques de almacenamiento, una válvula y la celda PEM. Es decir, no considera las líneas de almacenamiento de O_2 ni H_2O y todos los equipos asociados a ellas. Además, dicho estudio recibe 5 MW de una fuente de ERNC y la potencia que genera la celda PEM es de 2,6 MW [6]. El RHFC PEM del presente estudio tiene una potencia de aproximadamente 3,6 MW, sin embargo la entrada al sistema es de 60 MW. La diferencia de la ESOI de 59 a 8 se debe a que el sistema tiene salida no aprovechada de 56,5 MW en operación que se desperdicia. Además, el diseño propuesto que se ve en la Figura 3.3, consta de más compresores y tanques, también de una bomba, turbinas y equipos de separación y mezcla, que en conjunto hacen que el sistema funcione haya requerido mayor energía para construirse comparado al modelo de M. Pellow, por lo que su ESOI termina siendo menor. Mismo es el caso para la diferencia en la eficiencia, donde en la referencia es mayor al presente estudio 30 a 9,72. Esta diferencia se debe a la cantidad de equipos involucrado y a la pérdida que genera el sistema.

Para el caso de las baterías, se puede notar que la ESOI tienen una diferencia de 1,1. Esta diferencia radica en que el presente estudio propone una versión corregida del cálculo de la ESOI en la que se considera además la eficiencia de la batería, como se muestra en la Ecuación 4.6. De lo contrario, el resultado sería idéntico al caso de referencia, pues los datos utilizados para su cálculo fueron extraídos precisamente desde el estudio de M. Pellow. Con respecto a la eficiencia de también se aprecia una diferencia. La principal razón por la que ocurre esta diferencia es que el valor de la eficiencia de 96 % usado en el presente estudio

corresponde al valor entregado por el fabricante de las baterías, mientras que para el caso la referencia corresponde a un valor operacional que fue encontrado en dicho estudio.

Para el caso de la RHFC con celda de óxido sólido, no se cuenta con un estudio que permita tener una referencia para el valor de la ESOI. Sin embargo, se puede tener una idea de su valor considerando la forma en la que se define la ESOI, el valor para la ESOI de otra celda de combustible y la eficiencia de la celda de óxido sólido. Como se sabe, la ESOI corresponde a la relación de la energía retornada a la red eléctrica con respecto a la energía requerida para construir los equipos en cuestión. El caso del RHFC con celda SO, si se hubiera planteado un modelo simple como en el modelo de M. Pellow (que no tiene líneas de almacenamiento de O_2 ni H_2O), tendría que tener un calentador para aumentar la temperatura de la corriente de H_2 antes de entrar a la celda SO. EN ese sentido habría un equipo adicional por construir y que incorporar al denominador del ESOI. Por ello, el valor podría ser menor. Sin embargo, sabiendo que la eficiencia de las celdas SO ronda entre el 50 y 60 % [83]. En el mismo estudio, se señala que la eficiencia de una celda PEM está entre 40 y 45 % [83]. Teniendo esto en consideración, piensa que dado que la eficiencia de la celda SO es mayor a la de la celda PEM, entonces la celda SO tendría una mayor capacidad de retornar energía a la red, por lo que finalmente su ESOI sería mayor al sistema PEM.

Volviendo a la Tabla 5.12, la tendencia de los parámetros técnicos es clara y señala que el sistema de baterías de ion-litio es más eficiente y tiene una mayor energía de retorno que cualquier sistema de celdas de combustible en estudio. Sin embargo, como se mencionó anteriormente, al menos en el caso de la ESOI, este parámetro podría ser incluso menor que algún RHFC, si se complejizara el modelo. Por lo tanto, surge la pregunta ¿Qué es más relevante técnicamente: η o ESOI?. Esta pregunta no es trivial de responder y es posible que una de las formas de abordarla sea el planteamiento de una optimización multiobjetivo. Pero el presente estudio no considera aquéllo. En ese sentido, se tendrá que buscar una forma alternativa para explorar dicha pregunta. Si se remite a la definición de la ESOI, se puede notar que un sistema es conveniente energéticamente si $ESOI > 1$, pues esto significa que dicho sistema tiene la capacidad de retornar toda la energía que fue invertida para su construcción y más. Luego un sistema es más conveniente que otro si su ESOI es mayor a la de otro. Sin embargo, para el caso de la eficiencia, un sistema es conveniente si $\eta \rightarrow 1$. Tal valor implica es el ideal pues implica que el sistema entregue toda la energía que entra a él en un ciclo de carga. En la práctica es difícil que esta situación ocurra, pues los equipos tienen pérdidas asociadas a irreversibilidades [44]. Un sistema será más conveniente que otro si su η es mayor a la de otro. Pero está acotado por el valor 1, en circunstancias que la ESOI en principio no tiene una cota superior. Por eso se puede mencionar que la ESOI es favorable una vez que mayor a 1 y es cada vez más favorable si ese valor aumenta⁷, pues es una mejor inversión. En el caso de la eficiencia, no se da la misma situación, pues no se tiene un punto desde el cual cualquier sistema ya sea conveniente. Además, el hecho de que por cada ciclo se reciba la mayor cantidad de energía para consumo más preferible. Y dicho aspecto es algo que la ESOI no tiene la capacidad de analizar, pues estudia la vida útil completa del sistema. Es dicha diferencia la que hace intuir que dado que todos los sistemas sí tienen una ESOI que les permite llamar 'convenientes energéticamente', la decisión podría tomarse considerando su funcionamiento en cada ciclo. Y por esta razón, la eficiencia será el punto de decisión con

⁷En palabras simples: mientras más grande, mejor

respecto al punto de vista técnico.

Considerando todo lo anterior, el sistema de baterías reuniría las características técnicas para ser elegido como el sistema de almacenamiento para este estudio.

6.5. Parámetro económico

El costo de Capital se realizó considerando como centro de la cotización el costo de los equipos. Es decir, el resto de conceptos concernientes a los costos de capital, como el valor del terreno, las construcciones, honorarios de la construcción, contingencias, etc, fueron estimados a partir del costo de los equipos. Si bien esta es una propuesta metodológica, es posible que esta forma de calcular el costo de Inversión. Esto quiere decir, que los costos de los equipos no representen el porcentaje que se les adjudicó y que otros aspectos de la evaluación cobren más relevancia de la que se asumió. Por lo tanto, se cree que una forma más rigurosa de hacer esta estimación, sería realizar la cotización de cada concepto de costo de capital, por separado y con ellos, calcular el costo de Capital. De todos modos, este estudio corresponde a la etapa de ingeniería conceptual, por lo tanto, la precisión con la que se trabaja en esta etapa suele ser una estimación en base a un cálculo general [65].

Es relevante mencionar que el hecho de considerar solamente los costos de capital, genera que la evaluación económica de los sistemas no pueda evidenciar otros costos asociados a dichos sistemas. Costos como los de operación, que incluyen los costos del mantenimiento y reemplazo de los equipos, del costo de la operación propiamente tal incluyendo el abastecimiento de servicios de refrigeración o calefacción de diversos equipos, etc. Los costos de operación son relevantes pues ponen importancia el costo que implica que el sistema opere. Puede darse el caso que un sistema que cuyo CAPEX era de menor valor que otro, tenga un OPEX más caro y que la combinación de ambos parámetros, haga que a la larga el sistema de CAPEX más barato termine siendo más caro al operarse. Por lo tanto, la evaluación económica se asume como incompleta, donde su completación es precisamente realizar la estimación de los costos operacionales de cada sistema.

Y que junto con ello, es necesario realizar un flujo de caja para cada sistema, para estudiar rentabilidad en un horizonte de tiempo, para dichos sistemas. La información que entrega el flujo de caja para un horizonte temporal es el valor de una inversión antes de realizar, es decir, la posibilidad que tiene la decisión de invertir sobre un sistema sea más económicamente favorable que otra. Por lo tanto, se refuerza la necesidad de contar con este cálculo para tomar una decisión con más información disponible.

6.5.1. Resultados económicos

De la Tabla 5.15 puede verse que el proyecto más caro en términos de costos de capital es el de baterías, de aproximadamente 670 mil millones de pesos chilenos. Y el proyecto más

barato de realizar el sistema de SOFC+Int con un costo total de aproximadamente 359 mil millones de pesos chilenos.

En primer lugar, puede notarse una diferencia en el valor entre los sistemas de óxido sólido. Esta diferencia se debe a que el sistema SOFC+R considera el ciclo Rankine, por lo que tiene más equipos involucrados mientras que el sistema SOFC+Int, reemplaza el ciclo de Rankine por integración energética. Por esta razón es más caro el sistema con integración energética. De todos modos, debe notarse que la diferencia entre ambos proyectos es de aproximadamente 500 millones de pesos chilenos, diferencia que es despreciable con respecto a la que se tiene con los otros sistemas: 103 mil millones de pesos chilenos con respecto al sistema PEM y 309 mil millones de pesos chilenos con respecto al sistema de baterías.

Puede verse que para la comparación entre sistemas RHFC, el sistema PEM es más caro que los sistemas SO, debido a la cantidad de celdas PEM que considera dicho sistema: 11.180.960 de celdas con respecto a las 49.470 celdas que se requieren en los sistemas SO. Si bien, el número de celdas PEM es aproximadamente 225 veces el número de celdas SO, el precio del sistema PEM es aproximadamente 1,3 veces el precio de los sistemas SO. Esto se debe principalmente al valor de las celdas PEM. El valor de cotización de una celda PEM es de 10,1 USD W⁻¹ [84] y el de una celda SO es de 1,9 USD W⁻¹ [85]. Esta diferencia de valores se debe a que el valor de la celda PEM corresponde a una cotización de una celda en venta, es decir, un valor de mercado, para una aplicación de transportes de vehículos pequeños, como automóvil particular. Sin embargo, el valor utilizado para la celda SO corresponde al costo de producción y a una escala sin producción de mercado. En ese sentido, se pueden producir desviaciones en los valores.

Ahora, si se comparan estos valores con respecto al valor del electrolizador, se puede notar que el concepto más caro de los sistemas es precisamente el electrolizador, con un valor de 82 mil millones de pesos chilenos, que representa el 91,8% del total de equipos del sistema SOFC+R, el 91,9% del sistema SOFC+Int y el 71,4% del sistema PEM. Esto se debe a que el electrolizador requiere aproximadamente 90.000 unidades y su valor corresponde a un mercado maduro. En este caso, sí se trata de un equipo para una aplicación del orden de MW. Por lo que se cree que este valor es el más cercano a la realidad de los 3 equipos electroquímicos. En ese sentido, se cree que si las tecnologías tuviesen la misma madurez, el costo de la celda PEM aumentaría, debido al número de celdas que se requieren y a que esta celda utiliza un material caro, que corresponde al Pt, el cual tiene un valor de 20.110 USD kg⁻¹ [86], mientras que la itria estabilizada con zircona, en la celda SO, puede tener un valor de hasta 29,2 USD kg⁻¹ [87].

Si se comparan los valores con respecto al de las baterías de ion-litio, puede notarse que las baterías son las más caras por el valor del número de baterías que son 106.880 unidades. Sobre este valor, es relevante destacar que no considera una reposición de las baterías una vez que se termina su vida útil. En el caso de los RHFC se realiza una evaluación técnica en la ESOI de 20 años. Por lo tanto, para el caso de las baterías, se requeriría como mínimo una reposición durante esos 20 años. Por lo tanto el valor de 670 mil millones de pesos chilenos podría duplicarse si se considerara tal aspecto.

De todos modos, como se discutió previamente, al no conocerse más aspectos económicos

que los costos de capital, no se puede asegurar qué proyecto sería más rentable económicamente al final de un horizonte temporal de evaluación. El hecho de que el sistema de baterías sea más caro en términos de costo de capital no implica que también sea el más caro de operar o que las baterías no se puedan liquidar a un precio que permita recuperar la inversión. Según el estudio de M. Pellow *et al.* (Energy & Environ. Sci., 2015), un sistema que tiene menor eficiencia es más caro de operar. En ese sentido, se puede estimar que el sistema PEM podría ser el más caro de operar y el de baterías, el más barato. Sin embargo, para poder tener certeza de lo anterior y una idea de la magnitud de dichos valores, es necesario complementar el presente estudio con un cálculo de los costos de operación y flujo de caja para cada proyecto. De momento, lo que se puede señalar es el valor de la inversión inicial que se debe tener para poder iniciar cada sistema de almacenamiento.

Finalmente, surge la pregunta sobre qué sistema es más conveniente elegir. Como puede verse de las Tabla 5.12 y 5.15, el desempeño técnico y económico de los sistemas en estudio es contrapuesto. Es decir, el sistema más eficiente no cumple con ser el más barato de montar. De modo que se hace necesario comentar sobre qué tendrá mayor relevancia: los parámetros técnicos o el parámetro económico. Es común que la dificultad de un proyecto sea el financiamiento o si va a ser rentable en el futuro, por lo que no es ligero de decidir. Una forma de decidirlo es planteando un modelo de optimización que permita generar una jerarquización por prioridades, es decir, asignarle más relevancia a un parámetro que a otro, respondiéndose preguntas en virtud del contexto, los objetivos y el funcionamiento del sistema. Pero este estudio no tiene incorporada esa metodología, por lo que se buscará una respuesta distinta a aquello. Incluso se podrían encontrar opciones con sistemas mixtos de almacenamiento donde se combinaran celdas y RHFC, en los que se repartiera la potencia de entrada, de manera que se disminuyera el costo inicial y aumentara la eficiencia global. Sin embargo, eso requeriría un estudio adicional. Para responder esta pregunta se refiere a la cuestión inicial: el propósito del almacenamiento. Si se considera que el propósito principal del estudio es abastecer de energía para descarbonizar la matriz energética, no es conveniente que se pierda energía. Muy por el contrario, el sistema debería ser capaz de entregar el mayor flujo de energía posible para poder abastecer. La demanda energética no disminuirá porque la oferta no disminuya, muy por el contrario, la tendencia muestra que la demanda energética está en alza [4]. En ese sentido, si la demanda no se satisface con energía de fuentes libres de carbono, muy probablemente se tendrán que abastecer con energía en base a carbono [15], que es justamente lo que se busca evitar con este estudio. Considerando lo anterior y recordando que el costo de operación podría ser de menor valor para los sistemas que tengan mayor eficiencia, sería más conveniente un sistema cuya eficiencia sea mayor.

Capítulo 7

Conclusiones

El Cambio Climático genera una urgencia por reducir las emisiones de carbono en toda el sector productivo posible, como por ejemplo, el energético.

El sector energético tiene una oportunidad de descarbonizar su matriz energética al complementar la entrada en operación de energías renovables no convencionales junto con sistemas de almacenamiento.

El sistema de almacenamiento de celdas de combustible está compuesto principalmente por un electrolizador alcalino que opera a 80°C, tanques de acero inoxidable y celdas de combustible. Las celdas de combustible pueden ser con membrana de intercambio protónico que operan isotérmicamente al electrolizador o de óxido sólido, que operan a 800°C. O alternativamente, el sistema podría estar compuesto por baterías de ion-litio de 24 V y 300 A-h de capacidad.

Para el consumo energético residencial de la región de Coquimbo, una planta solar fotovoltaica entrega 60 MW a una planta de almacenamiento. Si el sistema de almacenamiento fuera un sistema de:

- celdas de combustible regenerativo con celdas de óxido sólido y un ciclo de Rankine acoplado, la salida del sistema sería de 4,75 MW con una eficiencia de 11,11 % y una ESOI de 35.
- celdas de combustible regenerativo con celdas de óxido sólido con integración energética, la salida del sistema sería de 3,61 MW con una eficiencia de 9,72 % y una ESOI de 29.
- celdas de combustible regenerativo con celdas de intercambio protónico, la salida del sistema sería de 3,64 MW con una eficiencia de 9,61 % y una ESOI de 8.
- baterías de ion-litio, la salida del sistema sería de 57,6 MW con una eficiencia del 96 % y una ESOI de 33,9.

El costo de capital de construir un sistema de almacenamiento sería de para dicha planta solar, en pesos chilenos, sería de:

- 360.195.469.065 para de un sistema con celdas de óxido sólido y ciclo de Rankine acoplado.
- 359.673.643.124 para un sistema con celdas de óxido sólido e integración energética.
- 463.562.322.251 para un sistema con celdas de intercambio protónico.
- 669.271.000.320 para un sistema de baterías de ion-litio.

Con el fin de abastecer con la mayor energía posible a la población y buscando que la descarbonización ocurra efectivamente, el sistema más favorable para el estudio sería el de baterías de ion-litio.

El presente estudio puede complementarse al considerar la estimación de los costos de operación y flujo de caja para cada sistema de almacenamiento propuesto, usando distintas configuraciones en los sistemas de celdas de combustible, como la eliminación de las líneas de almacenamiento de O_2 y H_2O . Y por último, utilizando valores para un PEMFC de uso industrial para el cálculo de sus curvas de operación.

Bibliografía

- [1] INTERNATIONAL RENEWABLE AGENCY. [2018] Global Energy Transformation - A roadmap to 2050. [informe]. 1 documento formato pdf; texto en inglés. 76 p.
- [2] INTERNATIONAL ENERGY AGENCY. [2016] Statistics: CO2 emissions from fuel combustion. [reporte]. 1 documento formato pdf; texto en inglés. 166 p.
- [3] COMISIÓN NACIONAL DE ENERGÍA. [2018] Anuario estadístico de energía, matriz chilena, matriz energética. [informe]. 1 documento formato pdf; texto en español. 162 p.
- [4] COMISIÓN NACIONAL DE ENERGÍA. [2017] Anuario estadístico de energía, matriz chilena, matriz energética. [informe]. 1 documento formato pdf; texto en español. 164 p.
- [5] ESPINOZA, C. 2017. El 17% de la energía producida en Chile proviene de fuentes renovables no convencionales. [en línea] La Tercera. 21 de abril, 2017. <<http://www2.latercera.com/noticia/17-la-energia-producida-chile-proviene-fuentes-renovables-no-convencionales/>> [consulta: 10 agosto 2018].
- [6] PELLOW, M., EMMOT, C., BARHART, C. y BENSON, S. 2015. Hydrogen or batteries for grid storage? A net energy analysis. *Energy & Environmental Science* 8(7): 1938-1952.
- [7] COORDINADOR ELÉCTRICO NACIONAL. 2018. Sistema eléctrico del Norte [en línea] <http://www.cdec-sing.cl/pls/portal/cdec.pck_inf_sing.presentacion> [consulta: 10 agosto 2018].
- [8] CASANOVA, F. 2016. El desafío de Chile con su excedente de energía solar [en línea] <<http://www.t13.cl/noticia/nacional/el-desafio-chile-su-excedente-energia-solar>> [consulta: 10 agosto 2018].
- [9] CORDERO, R., DAMIANI, A., SECKMEYER, G. *et al.* 2016. The Solar Spectrum in the Atacama Desert. [en línea] *Scientific Reports* 6, 22457 <<http://dx.doi.org/10.1038/srep22457>> [consulta: 10 agosto 2018].
- [10] IQBAL, M. 1983. Solar Radiation Measuring Instruments. En: An Introduction to Solar

Radiation. Vancouver, Academic Press Canada. pp 335-373.

- [11] WORLD RADIATION DATA CENTRE. 2015. Global radiation. Daily sums, monthly sums and means (South America). Country: Chile. Station: Almeria ARPT. Year: 2014 [no disponible] <http://wrdc.mgo.rssi.ru/wrdccgi/protect.exe?data_list_full_protected/t3/chile/quinta_normal/quinta_normal_2014_t3.html> [consulta: 12 agosto 2018].
- [12] WORLD RADIATION DATA CENTRE. 2015. Global radiation. Daily sums, monthly sums and means (Europe). Country: Spain. Station: Almeria ARPT. Year: 2014 [no disponible] <http://wrdc.mgo.rssi.ru/wrdccgi/protect.exe?data_list_full_protected/t6/spain/almeria_arpt/almeria_arpt_2014_t6.html> [consulta: 12 agosto 2018].
- [13] COMITÉ NACIONAL DE ENERGÍA. [2016]. Anuario Estadístico de Energía. [informe] 1 documento formato pdf; texto en español. 146 p.
- [14] COORDINADOR ELÉCTRICO NACIONAL. Nosotros [en línea]. <<https://www.coordinador.cl/nosotros/>> [consulta: 10 enero 2020].
- [15] COORDINADOR ELÉCTRICO NACIONAL. Sistema Eléctrico Nacional [en línea]. <<https://infotecnica.coordinador.cl/info/centrales>>2020 [consulta: 10 enero 2020].
- [16] SÁNCHEZ MOLINA, Pilar. 2019. Chile planea incluir sistemas de almacenamiento como parte de las infraestructuras de transmisión eléctrica. <https://www.pv-magazine-latam.com> [en línea]. <<https://www.pv-magazine-latam.com/2019/03/29/chile-planea-incluir-sistemas-de-almacenamiento-como-parte-de-las-infraestructuras>> [consulta: 11 enero 2020].
- [17] DIVYA, K. C. y ØSTERGAARD, Jacob. 2009. Battery energy storage technology for power systems-An overview. *Electric Power Systems Research*. 79(4): 511–520. ISSN 03787796. 10.1016/j.epsr.2008.09.017
- [18] MITLISKY, F., MYERS, B. y WEISBERG, A. 1998. Regenerative Fuel Cell Systems. *Energy & Fuels* 12(1): 56-71.
- [19] FUNG, M. 2005. Energy density of hydrogen [en línea] <<https://hypertextbook.com/facts/2005/MichelleFung.shtml>> [consulta: 10 agosto 2018].
- [20] GOLNIK, A. 2003. Energy density of gasoline [en línea] <<https://hypertextbook.com/facts/2003/ArthurGolnik.shtml>> [consulta: 10 agosto 2018].
- [21] BELLINI, E. 2018. Chile: inaugurada central solar Pelicano de 100 MW [en línea] <<https://www.pv-magazine-latam.com/2018/01/11/chile-inagurada-central-solar-pelicano-de-100-mw/>> [consulta: 27 mayo 2018].

- [22] LARMINIE, J. y DICKS, A. 2003. Fuel Cell Systems Explained. 2^a Ed. Hoboken, John Wiley & Sons Ltd. 406 p.
- [23] BATTERY UNIVERSITY. BU-802b: What does Elevated Self-discharge Do?. 2018. www.batteryuniversity.com [en línea]. <https://batteryuniversity.com/learn/article/elevating_self_discharge> [consulta: 20 noviembre 2018].
- [24] VÁSQUEZ, R. y SALINAS, F. 2018. Tecnologías del Hidrógeno y perspectivas para Chile. Santiago, Deutsche Gesellschaft für Internationale Zusammenarbeit GmbH. 135 p.
- [25] CHENG, X., SHI, Z., GLASS, N. *et al.* 2007. A review of PEM hydrogen fuel cell contamination: Impacts, mechanisms, and mitigation. *Journal of Power Sources* 165(2): 739-756.
- [26] PARK, Sehkyu, LEE, Jong Won y POPOV, Branko N. 2012. A review of gas diffusion layer in PEM fuel cells: Materials and designs. *International Journal of Hydrogen Energy*.
- [27] SINGHAL, Subhash C. 2014. Solid oxide fuel cells for power generation. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Energy and Environment*. 3(2): 179–194. ISSN 20418396. 10.1002/wene.96
- [28] CHOUDHURY, Arnab, CHANDRA, H. y ARORA, A. 2013. Application of solid oxide fuel cell technology for power generation - A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. 20: 430–442. ISSN 13640321. 10.1016/j.rser.2012.11.031
- [29] CHAN, S. H., LOW, C. F. y DING, O. L. 2002. Energy and exergy analysis of simple solid-oxide fuel-cell power systems. *Journal of Power Sources*. 103(2): 188–200. ISSN 03787753. 10.1016/S0378-7753(01)00842-4
- [30] SAISIRIRAT, Penyarat. 2015. The Solid Oxide Fuel Cell (SOFC) and Gas Turbine (GT) Hybrid System Numerical Model. Elsevier B.V. 845–850 p. ISSN 18766102. 10.1016/j.egypro.2015.11.576
- [31] GANDÍA, L., OROZ, R., URSÚA, A. *et al.* 2007. Renewable hydrogen production: Performance of an alkaline water electrolyzer working under emulated wind conditions. *Energy and Fuels* 21(3): 1699-1706.
- [32] URSÚA, A., GANDÍA, L., SANCHIS, P. *et al.* 2012. Hydrogen Production From Water Electrolysis: Current Status and Future Trends. *Proceedings of the IEEE* 100(2): 410-426.
- [33] INTERNATIONAL ENERGY AGENCY. [2015] Technology Roadmap Hydrogen and Fuel Cells. [informe]. 1 documento formato pdf; texto en inglés. 81 p.
- [34] ZENG, K y ZHANG, D. 2010. Recent progress in alkaline water electrolysis for hydro-

- gen production and applications. *Progress in Energy and Combustion Science* 36(3): 307-326.
- [35] ENEA CONSULTING. [2016] The Potential of Power-To-Gas. [informe]. 1 documento formato pdf; texto en inglés. 51 p.
- [36] JEPSEN, J. 2014. Technical and Economic Evaluation of Hydrogen Storage Systems based on Light Metal Hydrides. Geesthacht, Zentrum für Material und Küstenforschung GmbH. 150 p.
- [37] DENG, Da. 2015. Li-ion batteries: Basics, progress, and challenges. *Energy Science and Engineering*. 3(5): 385–418. ISSN 20500505. 10.1002/ese3.95
- [38] YANG, Z., ZHANG, J., KINTNER-MEYER, M. *et al.* 2011. Electrochemical energy storage for green grid. *Chemical reviews* 111(5): 3577-613.
- [39] DUNN, B., KAMATH, H. y TARASCON, J. 2011. Electrical energy storage for the grid: A battery of choices. *Science* 334(6058): 928-935.
- [40] HESSE, H., SCHIMPE, M., KUCEVIC, D. y JOSSEN, A. 2017. Lithium-ion battery storage for the grid - A review of stationary battery storage system design tailored for applications in modern power grids. *Energies* 10(12): 1-42.
- [41] SCROSATI, B. y GARCHE, J. 2010. Lithium batteries: Status, prospects and future. *Journal of Power Sources* 195(9): 2419-2430.
- [42] LI, J., KLEE, J., GUENTHER, C. y DANZER, M. 2013. A comparative study of state of charge estimation algorithms for LiFePO₄ batteries used in electric vehicles. *Journal of Power Sources* 230: 244-250.
- [43] HESSE, H., MARTINS, R., NUSILEK, P. *et al.* 2017. Economic optimization of component sizing for residential battery storage systems. *Energies* 10(7): 19.
- [44] ÇENGEL, Yunes A, BOLES, Michael A., GONZALEZ Y POZO, Virgilio y SARMIENTO ORTEGA, Sergio. 2006. *Termodinámica*. 7ma Ed. Ciudad de México. McGraw-Hill. 1009 p. ISBN 978-0-07-352932-5.
- [45] ABD EL-AAL, A. M., SCHMID, J. y BARD, J. 2006. Modelling and simulation of a stand-alone hydrogen photovoltaic fuel cell hybrid system for long-term operation. *International Journal of Modelling and Simulation*. 26(4): 370–376. ISSN 02286203. 10.1080/02286203.2006.11442390
- [46] BARD, Allen J. y FAULKNER, Larry R. 2001. *Electrochemical Methods - Fundamentals and Applications*. 2da Ed. Danvers, Massachusetts. John Wiley & Sons Inc. 850 p. ISBN 0-471-04372-9.
- [47] NOREN, D. A. y HOFFMAN, M. A. 2005. Clarifying the Butler-Volmer equation and re-

- lated approximations for calculating activation losses in solid oxide fuel cell models. *Journal of Power Sources*. 152(1–2): 175–181. ISSN 03787753. 10.1016/j.jpowsour.2005.03.174
- [48] COSTAMAGNA, Paola, SELIMOVIC, Azra, DEL BORGHI, Marco y AGNEW, Gerry. 2004. Electrochemical model of the integrated planar solid oxide fuel cell (IP-SOFC). *Chemical Engineering Journal*. 102(1): 61–69. ISSN 13858947. 10.1016/j.cej.2004.02.005
- [49] SONG, Chaojie, TANG, Yanghua, ZHANG, Jian Lu, ZHANG, Jiujun, WANG, Haijiang, SHEN, Jun, MCDERMID, Scott, LI, Jing y KOZAK, Paul. 2007. PEM fuel cell reaction kinetics in the temperature range of 23–120 °C. *Electrochimica Acta*. 52(7): 2552–2561. ISSN 00134686. 10.1016/j.electacta.2006.09.008
- [50] NI, Meng, LEUNG, Michael K.H. y LEUNG, Dennis Y.C. 2006. A modeling study on concentration overpotentials of a reversible solid oxide fuel cell. *Journal of Power Sources*. 163(1 SPEC. ISS.): 460–466. ISSN 03787753. 10.1016/j.jpowsour.2006.09.024
- [51] CUSSLER, E.L. 2009. *Diffusion Mass transfer in fluid systems*. 3ra Ed. Cambridge. Cambridge University Press. 631 p. ISBN 9780521871211.
- [52] ABDIN, Z., WEBB, C. J. y GRAY, E. Mac A. 2017. Modelling and simulation of an alkaline electrolyser cell. *Energy*. 138: 316–331. ISSN 03605442. 10.1016/j.energy.2017.07.053
- [53] HAMMOUDI, M., HENAO, C., AGBOSSOU, K., DUBÉ, Y. y DOUMBIA, M. L. 2012. New multi-physics approach for modelling and design of alkaline electrolyzers. *International Journal of Hydrogen Energy*. 37(19): 13895–13913. ISSN 03603199. 10.1016/j.ijhydene.2012.07.015
- [54] SAVITSKII, E.M. y PRINCE, A. 1989. *Handbook of precious metals*. New York. Hemisphere Publishing Corporation. ISBN 978-0891167099.
- [55] , R. W. y SCHOFIELD, F. H. 1939. The thermal and electrical conductivities of carbon and graphite to high temperatures. *Proceedings of the Physical Society*. 51(1): 153–172. ISSN 09595309. 10.1088/0959-5309/51/1/317
- [56] ELERT, G. Resistivity of Steel. 2011. *The Physics Factbook* [en línea]. <<https://hypertextbook.com/facts/2006/UmranUgur.shtml>> [consulta: 19 febrero 2020].
- [57] BERGEN, A., PITT, L., ROWE, A., WILD, P. y DJILALI, N. 2009. Transient electrolyser response in a renewable-regenerative energy system. *International Journal of Hydrogen Energy*. 34(1): 64–70. ISSN 03603199. 10.1016/j.ijhydene.2008.10.007
- [58] HINE, Fumio y MURAKAMI, Koichi. 1980. Bubble Effects on the Solution IR Drop in a Vertical Electrolyzer Under Free and Forced Convection. *Journal of the Electrochemical Society*. 127(2): 292–297. ISSN 19457111. 10.1149/1.2129658
- [59] WARNER, John. 2015. *The Handbook of Lithium-Ion Battery Pack Design*. Waltham, Massachusetts. Elsevier Inc. 263 p. ISBN 9780128014561.

- [60] UNIVERSIDAD DE SALAMANCA.2019. Tensión nominal - Diccionario de Ingeniería Eléctrica [en línea]. <<https://electricidad.usal.es/Principal/Circuitos/Diccionario/Diccionario.php?b=id:612>> [consulta: 15 junio 2019].
- [61] SINGHAL, S. C. 2000. Advances in solid oxide fuel cell technology. Solid State Ionics. 135(1-4): 305-313. ISSN 01672738. 10.1016/S0167-2738(00)00452-5
- [62] PETROMERCADO. Poder calorífico inferior y superior. Petromercado.com [en línea]. <http://petromercado.com/blog/37_articulos/105-poder-calorifico-inferior-y-superior.html> [consulta: 10 enero 2020].
- [63] BARNHART, Charles J. y BENSON, Sally M. 2013. On the importance of reducing the energetic and material demands of electrical energy storage. Energy and Environmental Science. 6(4): 1083-1092. ISSN 17545706. 10.1039/c3ee24040a
- [64] PETERS, Max S. y TIMMERHAUS, Klaus D. 1991. Plant Design and Economics for Chemical Engineers. 4ta Ed. New York. McGraw-Hill. 923 p. ISBN 0-07-049613-7.
- [65] ELISA DÍAZ y JAVIERA RIFFO. CAPEX, OPEX y Flujo de Caja. (2019).
- [66] SHENZHEN POLINOVEL TECHNOLOGY CO. LTD. 2020. Polinovel ES Lifepo4 300ah Solar Boat Storage 24 Volt Lithium Battery Pack. AliBaba [en línea]. <https://www.alibaba.com/product-detail/Polinovel-ES-Lifepo4-300ah-Solar-Boat_62081734153.html?spm=a2700.galleryofferlist.0.0.2882678e2h01o0> [consulta: 16 enero 2020].
- [67] RENE GARREAUD. Sistemas de Latitudes Medias y Bajas Segregadas. (2007)
- [68] SUNRISE AND SUNSET. 2019 Amanecer y atardecer, Coquimbo, junio 2019. <<https://www.sunrise-and-sunset.com/es/sun/chile/coquimbo/2019/junio>> [consulta: 10 abril 2019]
- [69] SUNRISE AND SUNSET. 2019. Amanecer y atardecer, Coquimbo, diciembre 2019. <<https://www.sunrise-and-sunset.com/es/sun/chile/coquimbo/2019/diciembre>> [consulta: 10 abril 2019]
- [70] ENERGÍA REGIÓN. Región de Coquimbo - Energía Región. 2019. Energía Región Beta [en línea]. <<https://energiaregion.cl/region/COQ>> [consulta: 9 enero 2020].
- [71] SHAPIRO, Daniel, DUFFY, John, KIMBLE, Michael y PIEN, Michael. 2005. Solar-powered regenerative PEM electrolyzer/fuel cell system. Solar Energy. 79(5): 544-550. ISSN 0038092X. 10.1016/j.solener.2004.10.013
- [72] TU, Hengyong y STIMMING, Ulrich. 2004. Advances, aging mechanisms and lifetime in solid-oxide fuel cells. Journal of Power Sources [en línea]. 127(1-2): 284-293. ISSN 03787753. 10.1016/j.jpowsour.2003.09.025

- [73] YOON, Chan. 2010. Computational Design , Fabrication , and Characterization of Microarchitected Solid Oxide Fuel Cells with Improved Energy Efficiency Computational Design , Fabrication , and Characterization of Microarchitected Solid Oxide Fuel Cells with Improved Ene. Georgia Institute of Technology
- [74] YENDURI, Abhijith y SUMANT, Onkar. Lithium Ion Battery Market. 2018. Allied Market Research [en línea]. <<https://www.alliedmarketresearch.com/lithium-ion-battery-market>>[consulta: 9 marzo 2020].
- [75] Fuel Cells Market by Type & Application - 2024. 2019. Markets and Markets [en línea]. <https://www.marketsandmarkets.com/Market-Reports/fuel-cell-market-348.html?gclid=Cj0KCQjw0pfzBRCOARIsANi0g0u8tZmeWcEegxnK_olfs30Ta5KQX_Z-NEAnzvHV1uYjHJaZU05npzoaAv01EALw_wcB> [consulta: 9 marzo 2020].
- [76] ROBERTO ROMÁN. Sistema FV (Parte I). 2017
- [77] PORTO, M. Rey, CARRETERO, T., AGUADO, M. y GARDE, R. 2010. H2 Production in Sotavento Wind Farm. 18th World Hydrogen Energy Conference 2010 - WHEC 2010. 78(January 2010).
- [78] Fútbol. ChileCubica. <<https://www.chilecubica.com/cuanto-mide-una-cancha/futbol/>>o[consulta: 18 marzo 2020].
- [79] GAHLEITNER, Gerda. 2013. Hydrogen from renewable electricity: An international review of power-to-gas pilot plants for stationary applications. International Journal of Hydrogen Energy. 38(5): 2039–2061. ISSN 03603199. 10.1016/j.ijhydene.2012.12.010
- [80] IRVINE, Logan. Compresores de aire: claves para incorporarlos en la industria. 2018. Condor [en línea]. <<https://condorgroup.com.ar/compresores-aire-claves-incorporarlos-la-industria/>>[consulta: 12 marzo 2020].
- [81] WIKIWATER. E40 - Las bombas motorizadas. Wikiwaater [en línea]. <<https://wikiwater.fr/E40-Las-bombas-motorizadas>>[consulta: 12 marzo 2020].
- [82] VILLALONGA, Pedro. 2018. Plan de mantenimiento turbina a vapor de alta presión. Universidad Técnica Federico Santa María. 47 p.
- [83] KIRUBAKARAN, A., JAIN, Shailendra y NEMA, R. K. 2009. A review on fuel cell technologies and power electronic interface. Renewable and Sustainable Energy Reviews. 13(9): 2430–2440. ISSN 13640321. 10.1016/j.rser.2009.04.004
- [84] FUEL CELL STORE. 2020. 1 kW to 10 kW Fuel Cell Stacks [en línea]. <<https://www.fuelcellstore.com/fuel-cell-stacks/high-power-fuel-cell-stacks/greenhub-2-500>>[consulta: 16 enero 2020].
- [85] BATTELLE y U.S. DEPARTMENT OF ENERGY. Manufacturing Cost Analysis of 1

- kW and 5 kW Solid Oxide Fuel Cell (SOFC) for Auxilliary Power Applications. 2014.
- [86] APMEX. 2020. Live Platinum Price Charts & Historical Data. [en línea]. <<https://www.apmex.com/platinum-price>> [consulta: 18 marzo 2020].
- [87] ZIBO WIN-CERAMIC MATERIAL CO. LTD. 2020. Yttria stbailized zirconia powder 0.1mm beads. AliBaba [en línea]. <https://www.alibaba.com/product-detail/Yttria-stabilized-zirconia-powder-0-1mm_60732916034.html?spm=a2700.7735675.normalList.26.35a44568R9rXvZ&s=p> [consulta: 18 marzo 2020].
- [88] CELDAS DE COMBUSTIBLE: FUNDAMENTOS Y APLICACIONES. (2019). Tarea N°2: Economía del Hidrógeno y Cinética de Celdas de Combustible. [reporte]. 1 documento formato pdf; texto en español. 5 p.
- [89] CELAS DE COMBUSTIBLE: FUNDAMENTOS Y APLICACIONES. (2017). Tarea N°2: Economía del Hidrógeno y Cinética de Celdas de Combustible. [reporte]. 1 documento formato pdf; texto en español. 4 p.
- [90] GREEN, Don W. y PERRY, Robert H. 2007. Perry's Chemical Engineers' Handbook. 8va Ed. Blacklick, Ohio. McGraw-Hill Professional Publishing. 2735 p. ISBN 0071593136. 10.1036/0071422943
- [91] CHEN, Dengjie, HUANG, Cheng, RAN, Ran, PARK, Hee Jung, KWAK, Chan y SHAO, Zongping. 2011. New $Ba_{0.5}Sr_{0.5}Co_{0.8}Fe_{0.2}O_{3-} + Co_3O_4$ composite electrode for IT-SOFCs with improved electrical conductivity and catalytic activity. *Electrochemistry Communications*. 13(2): 197–199.
- [92] CERRO DOMINADOR CONCENTRATED SOLAR POWER. 2019. Compañía de energía renovable en Chile | Cerro Dominador [en línea]. <<https://cerrodominador.com/quienes-somos/>> [consulta: 18 abril 2019].
- [93] KUNISCH, H. J., KRAMER, K. G. y DOMINIK, H. 1986. Battery Energy Storage Another Option for Load-Frequency-Control and Instantaneous Reserve. *IEEE Transactions on Energy Conversion*. EC-1(3): 41–46. 10.1109/tec.1986.4765732
- [94] GOULDS PUMPS. [2019] Pump Selection Guide. [informe]. 1 documento en formato pdf; texto en inglés. 24 p.
- [95] GOULD PUMPS. [2017] 3196 I-Frame®. [informe]. 1 documento en formato pdf; texto en inglés. 24 p.
- [96] KSB. Power input [en línea]. <<https://www.ksb.com/centrifugal-pump-lexicon/power-input/191088/>> [consulta: 20 diciembre 2019].
- [97] IRC. 2019. Fluid Property Calculator [no disponible]. <<https://www.irc.wisc.edu/properties/>> [consulta: 10 octubre 2019].

- [98] NORWEGIAN UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY. [2012]. The choice of materials for turbines Kaplan turbine. [informe]. 1 documento en formato pdf; texto en inglés. 29 p.
- [99] GENERAL ELECTRIC. [2016]. 42 and 52 MW Marine Gas Turbines. [informe]. 1 documento en formato pdf; texto en inglés. 2 p.
- [100] WEISS, Malcolm A., HEYWOOD, John B., DRAKE, Elisabeth M., SCHAFER, Andreas y AUYEUNG, Felix F. On the road in 2020. A life-cycle analysis of new automobile technologies [en línea]. 2000. 10.1016/S0140-6736(08)61179-4
- [101] INDIAMART. 2019. Industrial Heater Blower, Weight: Approx 100 kg to 200 kg [en línea]. <<https://www.indiamart.com/proddetail/industrial-heater-blower-7715268655.html>> [consulta: 19 diciembre 2019].
- [102] THE ENGINEERING TOOLBOX. 2003. Fuels - Higher and Lower Calorific Values. Engineering ToolBos [en línea]. <https://www.engineeringtoolbox.com/fuels-higher-calorific-values-d_169.html> [consulta: 19 diciembre 2019].
- [103] KARAKOUSSIS, Vasilis, LEACH, Matthew, VAN DER VORST, Rita, HART, David, LANE, Jon, PEARSON, Peter y KILNER, John. Environmental Emissions of SOFC and SPFC System Manufacture and Disposal. 2000.
- [104] CHEMICAL ENGINEERING. 2015. Economic Indicator: CEPCI. [no disponible]. <<https://www.chemengonline.com/economic-indicators-cepci/?printmode=1>> o [Consulta: 10 agosto 2019].
- [105] CHEMICAL ENGINEERING. 2018. Chemical Engineering Plant Cost Index: 2018 Annual Value. [en línea] <<https://www.chemengonline.com/2019-cepci-updates-january-prelim-and-december-2018-final/>> [Consulta: 10 agosto 2019].
- [106] CHEMICAL ENGINEERING. 2019. 2019 CEPCI Updates: MArch(prelim.) and April (final). [en línea] <<https://www.chemengonline.com/2019-cepci-updates-march-prelim-and-april-final/>> [Consulta: 10 agosto 2019].
- [107] SCHMIDT, O., GAMBHIR, A., STAFFELL, I., HAWKES, A., NELSON, J. y FEW, S. 2017. Future cost and performance of water electrolysis: An expert elicitation study. International Journal of Hydrogen Energy [en línea]. 42(52): 30470–30492. ISSN 03603199. 10.1016/j.ijhydene.2017.10.045
- [108] DONGTURBO ELECTRIC COMPANY LTD. 2020. DTEC small condensing steam turbine 10kW. AliBaba [en línea]. <https://dongturbo.en.alibaba.com/product/60807736432-222050340/DTEC_small_condensing_steam_turbine_10KW.html> [consulta: 16 enero 2020].
- [109] HEBEI YINENG BOILER CO. LTD. 2020. 10 kW- 150 kW long lifes-

- pan low price steam turbine power generator. AliBaba [en línea]. <https://ynboiler.en.alibaba.com/product/62044872322-802013805/10kw_150kw_long_lifespan_low_price_steam_turbine_power_generator.html> [consulta: 16 enero 2020].
- [110] ZIQI COMPRESSOR (SHANGAI) CO. LTD. 2020. Energy Saving Oil Free 3.7kW Scroll Air Compressor For Mining. AliBaba [en línea]. <https://www.alibaba.com/product-detail/Energy-Saving-Oil-Free-3-7kw_62249412796.html?spm=a2747.manage.0.0.3b3c71d2sbUez3> [consulta: 16 enero 2020].
- [111] BEIJING SUNNY YOUNG TECHNOLOGY CO. LTD. 2020. Oil Free Oxygen Compressor Oxygen Booster O2 Compressor. AliBaba [en línea]. <https://www.alibaba.com/product-detail/Oil-Free-Oxygen-Compressor-Oxygen-Booster_60672043744.html?spm=a2700.7724857.normalList.22.46ba6c2d0pIL2X> [consulta: 16 enero 2020].
- [112] HUNAN JIAHUA PUMPS CO. LTD. 2020. Anti Corrosive High Head Multistage Submersible Centrifugal 5 kw Stainless Steel Standard Pump. AliBaba [en línea]. <https://www.alibaba.com/product-detail/Anti-Corrosive-High-Head-Multistage-Submersible_62238688928.html?spm=a2700.7724857.normalList.46.66d93e6bIqo8bn> [consulta: 16 enero 2020].
- [113] YANCHENG HUABANG ELECTRIC INDUSTRIES CO. LTD. 2020. 800kw high efficiency multi point temperature control liquid Pipeline Heater. AliBaba [en línea]. <https://www.alibaba.com/product-detail/800kw-high-efficiency-multi-point-temperature_62010528520.html?spm=a2700.galleryofferlist.0.0.6736748bDNImzC> [consulta: 16 enero 2020].
- [114] YANCHENG XUANYUAN HEATING EQUIPMENT TECHNOLOGY CO. LTD. 2020. 400KW heat conduction furnace electric thermal oil heater. AliBaba [en línea]. <https://www.alibaba.com/product-detail/400KW-heat-conduction-furnace-electric-thermal_60774131400.html?spm=a2700.galleryofferlist.0.0.6323e292P5r2bN> [consulta: 16 enero 2020].
- [115] ZHEJIANG KAIDI REFRIGERATION EQUIPMENT CO. LTD. 2020. KAIDELI condensador refrigerado por agua de la carcasa y tubo condensador de carcasa y tubo intercambiador de calor. AliBaba [en línea]. <https://spanish.alibaba.com/product-detail/kaideli-water-cooled-condenser-shell-and-tube-condenser-shell-and-tube-heat-exchanger_62010528520.html> [consulta: 16 enero 2020].
- [116] WUXI GUANYA REFRIGERATION TECH CO. LTD. 2020. 50 KW laboratory recirculating water chiller. AliBaba [en línea]. <https://cnzlj.en.alibaba.com/product/62122788367-807434130/50_KW_laboratory_recirculating_water_chiller.html> [consulta: 16 enero 2020].
- [117] XE. 2020. XE Currency Converter: 1 USD to CLP = 774.800 Chilean Pesos.

XE.com [en línea]. <<https://www.xe.com/currencyconverter/convert/?Amount=1&From=USD&To=CLP>> [consulta: 20 enero 2020].

[118] XE. 2020. XE Currency Converter: 1 EUR to CLP = 859.7 Chilean Pesos. XE.com [en línea]. <<https://www.xe.com/currencyconverter/convert/?Amount=1&From=EUR&To=CLP>> [consulta: 20 enero 2020].

Anexos

Anexo A

Anexos

A.1. Variación de la demanda energética

A lo largo de un día, se producen variaciones en el consumo de energía eléctrica. Y a lo largo del año también se producen variaciones en el consumo.

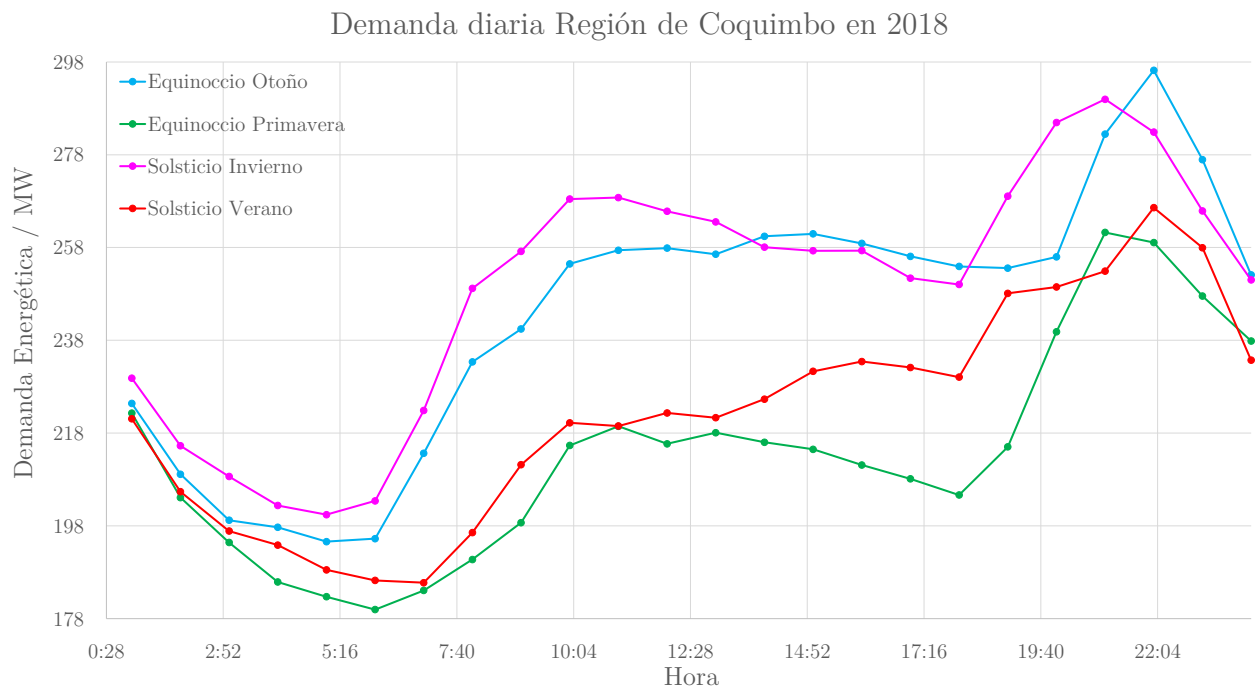


Figura A.1: Variación del consumo diario en la región de Coquimbo en los cambios de estación, durante el año 2018 [70].

Como puede verse en la Figura A.1, existe un alza en el consumo desde las 6:00 hasta las 10:00. Luego, el consumo tiene una zona de consumo valle y desde las 18:00 hasta las 22:00 se

produce la segunda alza en el consumo, siendo ésta la más grande del día, para finalmente caer el consumo hasta el mínimo, a las 6:00, repitiéndose el ciclo. Puede apreciarse que independiente de la época del año, el comportamiento es el mismo. Las diferencias estacionales pueden apreciarse en la magnitud del consumo, siendo la época de invierno, el periodo de máximo consumo a lo largo de todo el día. Y es el periodo de primavera en el que el consumo es mínimo a lo largo del día.

A.2. Modelo matemático para el dimensionamiento de un sistema de almacenamiento regenerativo

El sistema de almacenamiento regenerativo consta de 3 partes fundamentales: un electrolizador que recibe la energía eléctrica y una corriente de agua y la transforma a energía química en forma de hidrógeno H_2 y oxígeno O_2 . Un estanque de almacenamiento en el cual se guardará la energía en forma de combustible. Y por último, una celda de combustible la cual transforma el combustible hidrógeno H_2 y el O_2 en energía eléctrica y agua. Para dimensionar cada una de estas partes se usarán modelos, los que serán descritos a continuación.

A.2.1. Celdas de combustible

En la Tabla A.1 se muestran los datos físicos de las celdas de óxido sólido y de intercambio protónico.

Tabla A.1: Dimensiones físicas de las celdas de combustibles de óxido sólido y de intercambio protónico

Término	Magnitud	Unidades	Referencia
Óxido Sólido			
A_{an}	0,01	m^2	[88]
A_{cat}	0,01	m^2	[88]
A_{el}	0,012	m^2	[88]
δ_{an}	0,00065	m	[88]
δ_{cat}	0,000035	m	[88]
δ_{el}	0,000075	m	[88]
d_p	0,000001	m	[88]
τ	3	-	[88]
ε	0,5	-	[88]
Intercambio Protónico			
A_{an}	0,01	m^2	[89]
A_{cat}	0,01	m^2	[89]
$A_{colector}$	0,01	m^2	[89]
A_{Nafion}	0,012	m^2	[89]

δ_{an}	0,00005	m	[89]
δ_{cat}	0,00005	m	[89]
δ_{Nafion}	0,00005	m	[89]
$\delta_{Grafito}$	0,00005	m	[89]
δ_{Acero}	0,001	m	[89]

En la Tabla A.2 se muestran los datos utilizados para el coeficiente de difusión de Knudsen para las especies involucradas en la celda de óxido sólido.

Tabla A.2: Valores para el coeficiente de Difusión de Knudsen para la Celda SO, mostrado en la sección 3.3.1.3.1.

Término	Magnitud	Unidad	Referencia
χ_{H_2}	34,29	$m (s K^{0,5})^{-1}$	[90]
χ_{O_2}	8,57	$m (s K^{0,5})^{-1}$	[90]
χ_{H_2O}	11,43	$m (s K^{0,5})^{-1}$	[90]
$d_{poro, LSM-YSZ}$	10^{-6}	m	[48]
$d_{poro, Ni-YSZ}$	10^{-6}	m	[48]

En la Tabla A.3 se muestran los coeficientes de difusión molecular para las especies de la celda SO.

Tabla A.3: Valores para el coeficiente de Difusión Molecular para la Celda SO [90], mostrado en la sección 3.3.1.3.1.

Término	Magnitud	Unidad
ξ_{H_2}	$4,12 \cdot 10^{-9}$	$m^2 (s T^{1,75})^{-1}$
ξ_{O_2}	$9,69 \cdot 10^{-10}$	$m^2 (s T^{1,75})^{-1}$
ξ_{H_2O}	$4,12 \cdot 10^{-9}$	$m^2 (s T^{1,75})^{-1}$

En la Tabla A.4 se muestran las constantes para el cálculo de la conductividad de cada material de la celda de óxido sólido.

Tabla A.4: Valores de las constante para la conductividad de cada material correspondiente a la celda SO

Material	A / $S m^{-1}$	B / K	Referencia
LSM-YSZ	$1,23 \cdot 10^4$	-600	[48]
Ni-YSZ	$3,35 \cdot 10^4$	1.392	[91]
YSZ	$3,4 \cdot 10^4$	-10.350	[91]

A.2.1.1. Resultados del modelamiento

En la Figura A.2 se muestran los distintos sobrepotenciales y el voltaje de la celda de combustible con membrana intercambio protónico en función de la densidad de corriente.

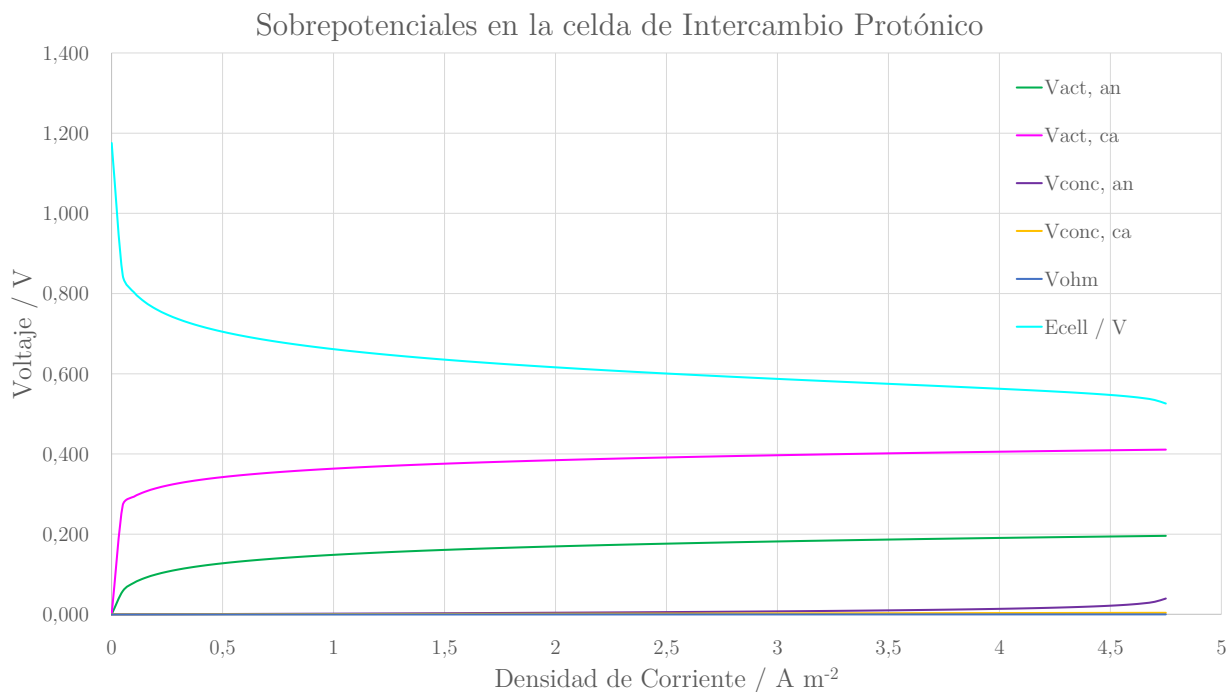


Figura A.2: Desglose de los distintos sobrepotenciales en la celda de combustible con membrana de intercambio protónico con respecto al voltaje de la celda, en función de la densidad de corriente.

En la Figura A.3 se muestran los distintos sobrepotenciales y el voltaje de la celda de combustible de óxido sólido en función de la densidad de corriente.

Sobrepotenciales en la celda de Óxido Sólido

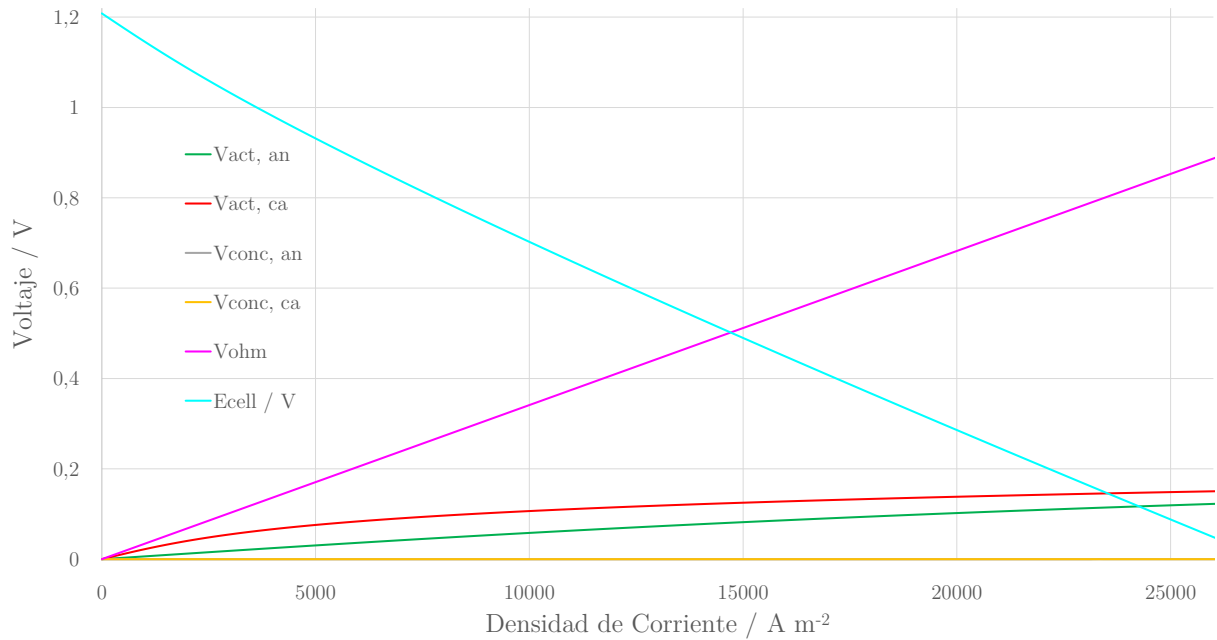


Figura A.3: Desglose de los distintos sobrepotenciales en la celda combustible de óxido sólido con respecto al voltaje de la celda, en función de la densidad de corriente.

A.2.2. Electrolizador

En la Tabla A.5 se muestran los valores utilizados para calcular el Potencial de Nernst del electrolizador.

Tabla A.5: Valores utilizados para calcular el Voltaje de circuito abierto [52].

Término	Magnitud	Unidades
V_{std}	1,229	V
T	353	K
R^*	8,314	$J (mol K)^{-1}$
F	96.485	$C mol^{-1}$
p_{H_2}	9	bar
p_{O_2}	9	bar
$a_{H_2O, KOH}$	1	$bar^{1,5}$
V_{OC}	1,22	V

En la Tabla A.6 se presentan los valores utilizados para calcular el sobrepotencial de activación.

Tabla A.6: Valores utilizados para calcular el sobrepotencial de activación [52].

Término	Magnitud	Unidades
α_{an}	1,65	-
α_{cat}	0,73	-
$j_{0,ref}^{an}$	10^{-7}	$A\ m^{-2}$
$j_{0,ref}^{cat}$	10	$A\ m^{-2}$

En la Tabla A.7 se muestran las condiciones de operación del sistema con las cuales se calcula el sobrepotencial de concentración.

Tabla A.7: Condiciones de operación del sistema utilizadas para el cálculo del potencial de concentración [52].

Término	Magnitud	Unidad
T	353	K
$P_{H_2}^B$	9	bar
$P_{O_2}^B$	9	bar

En la Tabla A.8 se muestran valores utilizados para calcular algunos términos necesarios en para el sobrepotencial de concentración.

Tabla A.8: Valores utilizados para calcular términos del potencial de concentración

Término	Magnitud	Unidades	Referencia
$\tau_{O_2-H_2O}$	1,201	-	[52]
$\tau_{H_2-H_2O}$	1,606	-	[52]
σ_{O_2}	3,467	A°	[52]
σ_{H_2}	2,827	A°	[52]
σ_{H_2O}	2,641	A°	[52]
M_{O_2}	0,032	$kg\ mol^{-1}$	[90]
M_{H_2}	0,02	$kg\ mol^{-1}$	[90]
M_{H_2O}	0,018	$kg\ mol^{-1}$	[90]

En la Tabla A.9 se muestran términos calculados para el sobrepotencial de concentración.

Tabla A.9: Resultado de términos calculados para el sobrepotencial de concentración tomando los valores de la Tabla A.8 y las Ecuaciones 3.108, 3.109, 3.110, 3.111, 3.112, 3.113 y 3.114.

Término	Magnitud	Unidades
$\sigma_{O_2-H_2O}$	3,054	A°
$\sigma_{H_2-H_2O}$	2,734	A°
$\Gamma_{D,an}$	1,681	-
$\Gamma_{D,cat}$	1,445	-
$D_{eff}^{O_2-H_2O}$	$1,7 \cdot 10^{-6}$	cm ² s ⁻¹
$D_{eff}^{H_2-H_2O}$	$6,4 \cdot 10^{-6}$	cm ² s ⁻¹
$D_{eff}^{H_2O,K}$	0,0026	cm ² s ⁻¹
D_{eff}^{an}	$2,1 \cdot 10^{-5}$	cm ² s ⁻¹
D_{eff}^{cat}	$7,8 \cdot 10^{-5}$	cm ² s ⁻¹

En la Tabla A.10 se declaran los coeficientes que se usan en la Ecuación 3.118.

Tabla A.10: Coeficientes de la Ecuación 3.118 [53].

Coeficiente	Magnitud
a_{ec}	2,96396
b_{ec}	0,02371
c_{ec}	0,12269
d_{ec}	$5,7 \cdot 10^{-5}$
e_{ec}	0,00173
f_{ec}	$4,7 \cdot 10^{-4}$
g_{ec}	$3,6 \cdot 10^{-8}$
h_{ec}	$2,7 \cdot 10^{-6}$
i_{ec}	$8,9 \cdot 10^{-6}$
j_{ec}	$2,4 \cdot 10^{-7}$

En la Tabla A.11 se presentan los datos utilizados para calcular la resistencia del electrolito.

Tabla A.11: Términos utilizados para la modelación de la resistencia del electrolito en el electrolizador alcalino

Término	Magnitud	Unidad	Referencia
σ_{el}	0,138	S cm ⁻¹	[53]
$\rho_{el,ref}$	7,23	Ω cm	[52]
l_{an-d}	0,125	cm	[52]
l_{cat-d}	0,125	cm	[52]
β_{an}	0,045	cm	[52]
β_{cat}	0,045	cm	[52]
κ_{el}	0,0067	K ⁻¹	Aproximado
Φ_{an}	0,3	-	[58]
Φ_{cat}	0,3	-	[58]
A_e	250	cm ²	[52]

El valor de κ_{el} no fue posible encontrarlo de manera explícita en bibliografía. Sin embargo, el estudio de M. Gray *et al.* (Energy, 2017) señala que la resistencia del electrolito es $R_{el} = 0,001 \Omega$ y la resistencia del diafragma es $R_d = 0,002 \Omega$ [52]. De este modo, considerando los otros factores y que la razón entre $\frac{R_d}{R_e} = 2$, se tiene que $\kappa_{el} = 0,0067 K^{-1}$.

En la Tabla A.12 se presentan los datos utilizados para calcular la resistencia del diafragma.

Tabla A.12: Términos utilizados para la modelación de la resistencia del diafragma en el electrolizador alcalino.

Término	Magnitud	Unidad	Referencia
σ_{el}	0,138	S cm ⁻¹	[53]
ρ_{el}	7,230	Ω cm	[52]
τ_d	2,18	-	[52]
δ_d	0,05	cm	[52]
ω_d	0,85	-	[52]
ε_d	0,42	-	[52]
A_d	300	cm ²	[52]

Finalmente, considerando todos los valores mencionados anteriormente, las resistencias resultantes son, como se muestra en la Tabla A.13:

Tabla A.13: Valores finales para la resistencia óhmica.

Término	Valor / Ω
R_{el}	0,007
R_d	0,016
R_t	0,023

A.2.2.1. Resultados del modelamiento

En la Figura A.4 se muestran los distintos sobrepotenciales y el voltaje del electrolizador en función de la densidad de corriente.

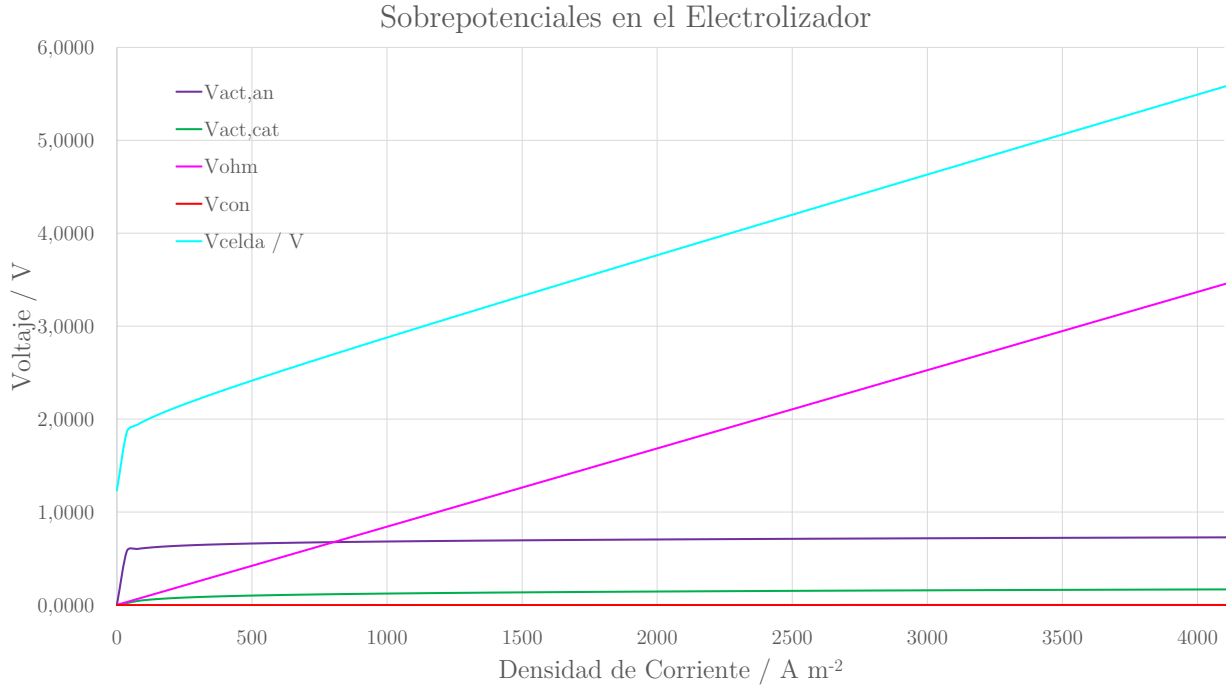


Figura A.4: Desglose de los distintos sobrepotenciales en el electrolizador alcalino con respecto al voltaje de la celda, en función de la densidad de corriente.

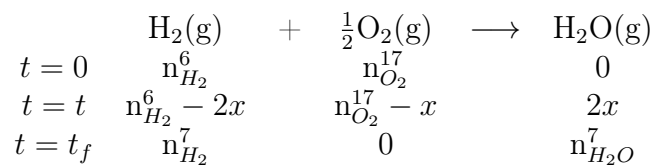
A.2.3. Configuraciones del Sistema

A.2.3.1. SO + Rankine

A.2.3.1.1 Balance de masa

La reacción que ocurre en la celda es como se muestra en la Ecuación 2.1. Si se asume que el O₂ se agota completamente, se tiene:

Tabla A.14



Según se definió en la Ecuación 3.145, el x_f para las corrientes de este sistema, queda expresado por:

$$x_f = \frac{n_{H_2}^7}{n_{H_2}^6}$$

Juntando lo anterior se obtiene:

$$\begin{aligned} x &= n_{O_2}^{17} \\ n_{H_2}^7 &= n_{H_2}^6 - 2n_{O_2}^{17} \\ n_{O_2}^{17} &= \frac{1}{2}n_{H_2}^6(1 - x_f) \\ n_{H_2O}^7 &= n_{H_2}^6(1 - x_f) \end{aligned}$$

En el intercambiador de calor no se producen cambios en la masa, es decir, se cumple la Ecuación 3.139. En el Condensador 1 se separan las corrientes con eficiencia 1. Es decir, todo el H_2 se separa del agua. Aplicando la Ecuación 3.136 y despejando, se tiene que:

$$n_{H_2}^9 = n_{H_2}^8 = n_{H_2}^7 n_{H_2O}^{10} = n_{H_2O}^8 = n_{H_2O}^7$$

En el Calentador 1, se cumple la Ecuación 3.133, de modo que $n_{H_2}^5 = n_{H_2}^6$. En el mezclador entran las corrientes 4 y 9 y sale la corriente 5, Aplicando la Ecuación 3.138 y despejando, queda:

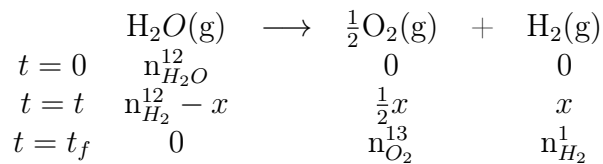
$$n_{H_2}^4 = (1 - x_f)n_{H_2}^6$$

Posteriormente, en la Válvula 1, se asume que hay flujo constante, aplicando la Ecuación 3.133, se cumple $n_{H_2}^3 = n_{H_2}^4$. En el Tanque 1 entra la corriente 2 por un tiempo t_{alm} y sale una corriente 3 por un tiempo t_{su} , aplicando la Ecuación 3.135 y despejando, se tiene:

$$n_{H_2}^2 = (1 - x_f)n_{H_2}^6 \cdot \frac{t_{su}}{t_{alm}}$$

En el Compresor 1 se asume que hay flujo constante. Aplicando la Ecuación 3.133, se cumple que $n_{H_2}^1 = n_{H_2}^2$. Para el caso del Electrolizador, la reacción global es como se muestra en la Ecuación 2.2. En este equipo, se asume que se consume toda el agua, por lo que el balance de masa queda como:

Tabla A.15



Considerando lo anterior, se obtiene:

$$\begin{aligned}x &= n_{H_2O}^{12} \\n_{O_2}^{13} &= \frac{1}{2} \cdot n_{H_2O}^{12} \\n_{H_2}^1 &= n_{H_2O}^{12}\end{aligned}$$

En el caso de la Bomba 1, se tiene que ésta funciona a flujo constante. Aplicando la Ecuación 3.133, se cumple que $n_{H_2O}^{11} = n_{H_2O}^{12}$. En el Tanque 3 entra una corriente 10 durante un tiempo t_{su} y sale una corriente 11 durante un tiempo t_{alm} . Aplicando la Ecuación 3.135 y despejando, queda:

$$n_{H_2}^{11} = n_{H_2O}^{10} \cdot \frac{t_{su}}{t_{alm}}$$

El Compresor 2 opera a flujo constante. Aplicando la Ecuación 3.133 se cumple que $n_{O_2}^{13} = n_{O_2}^{14}$. En el Tanque 2 entra una corriente 14 durante un tiempo t_{alm} y sale una corriente 15 durante un tiempo t_{su} . Aplicando la Ecuación 3.135 y despejando, queda:

$$n_{O_2}^{15} = n_{H_2O}^{14} \cdot \frac{t_{alm}}{t_{su}}$$

La Válvula 2 y el Calentador 2 operan a flujo constante. Aplicando la Ecuación 3.133 se cumple que $n_{O_2}^{15} = n_{O_2}^{16} = n_{O_2}^{17}$.

En el ciclo de Rankine acoplado, todas las etapas operan a flujo constante. Por lo tanto, aplicando la Ecuación 3.133 para la Turbina 1, Condensador 2 y Bomba 2, se cumple que $n_{H_2O}^{18} = n_{H_2O}^{19} = n_{H_2O}^{20} = n_{H_2O}^{21}$.

Pero en particular, para el sistema es importante el valor de la producción de H_2 en el electrolizador, por lo tanto, se pueden dejar el resto de corrientes en función de este valor. En resumen, las corrientes quedan expresadas como se resumen en la Tabla A.16.

Como puede verse en la Tabla A.16, no es posible encontrar una expresión para que la corriente de agua que circula en el ciclo de Rankine acoplado quede en función de la corriente de H_2 . Esa expresión es posible encontrarla a través del balance de energía del sistema, el que se realiza a continuación.

A.2.3.1.2 Balance de Energía

El electrolizador recibe potencia eléctrica \dot{W}_{El} desde la red eléctrica y disipa calor al ambiente \dot{Q}_{El} . Aplicando la Ecuación 3.153 y despejando, se obtiene:

$$\dot{Q}_{El} = \dot{W}_{El} + n_{H_2O}^{12} \cdot h_{H_2O}^{12} - n_{O_2}^{13} \cdot h_{O_2}^{13} - n_{H_2}^1 \cdot h_{H_2}^1$$

Salida de los compresores

Tabla A.16: Resumen de corrientes y expresiones en función de la corriente de H_2 de salida del electrolizador, en el sistema SOFC+Rankine

Corriente	Expresión
RHFC	
$n_{H_2}^1$	$n_{H_2}^1$
$n_{H_2}^2$	$n_{H_2}^1$
$n_{H_2}^3$	$n_{H_2}^1 \cdot \frac{t_{alm}}{t_{su}}$
$n_{H_2}^4$	$n_{H_2}^1 \cdot \frac{t_{alm}}{t_{su}}$
$n_{H_2}^5$	$\frac{1}{1-x_f} \cdot n_{H_2}^1 \cdot \frac{t_{alm}}{t_{su}}$
$n_{H_2}^6$	$\frac{1}{1-x_f} \cdot n_{H_2}^1 \cdot \frac{t_{alm}}{t_{su}}$
$n_{H_2}^7$	$\frac{x_f}{1-x_f} \cdot n_{H_2}^1 \cdot \frac{t_{alm}}{t_{su}}$
$n_{H_2O}^7$	$n_{H_2}^1 \cdot \frac{t_{alm}}{t_{su}}$
$n_{H_2}^8$	$\frac{x_f}{1-x_f} \cdot n_{H_2}^1 \cdot \frac{t_{alm}}{t_{su}}$
$n_{H_2O}^8$	$n_{H_2}^1 \cdot \frac{t_{alm}}{t_{su}}$
$n_{H_2}^9$	$\frac{x_f}{1-x_f} \cdot n_{H_2}^1 \cdot \frac{t_{alm}}{t_{su}}$
$n_{H_2O}^{10}$	$n_{H_2}^1 \cdot \frac{t_{alm}}{t_{su}}$
$n_{H_2O}^{11}$	$n_{H_2}^1$
$n_{H_2O}^{12}$	$n_{H_2}^1$
$n_{O_2}^{13}$	$\frac{1}{2} \cdot n_{H_2}^1$
$n_{O_2}^{14}$	$\frac{1}{2} \cdot n_{H_2}^1$
$n_{O_2}^{15}$	$\frac{1}{2} \cdot n_{H_2}^1 \cdot \frac{t_{alm}}{t_{su}}$
$n_{O_2}^{16}$	$\frac{1}{2} \cdot n_{H_2}^1 \cdot \frac{t_{alm}}{t_{su}}$
$n_{O_2}^{17}$	$\frac{1}{2} \cdot n_{H_2}^1 \cdot \frac{t_{alm}}{t_{su}}$
Ciclo Rankine Acoplado	
$n_{H_2O}^{18}$	$n_{H_2O}^{18}$
$n_{H_2O}^{19}$	$n_{H_2O}^{18}$
$n_{H_2O}^{20}$	$n_{H_2O}^{18}$
$n_{H_2O}^{21}$	$n_{H_2O}^{18}$

Al aumentar la presión de las corrientes gaseosas, la temperatura también aumenta. El proceso de la compresión es isoentrópica, por lo tanto, la temperatura sigue una trayectoria adiabática como se muestra a continuación [44]:

$$\frac{T_e}{T_s} = \left(\frac{P_e}{P_s} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} \quad (A.1)$$

Donde:

γ [-]: Coeficiente de compresión adiabática del fluido

T_e [K]: Temperatura de entrada al compresor

T_s [K]: Temperatura de salida al compresor

P_e [bar]: Presión de entrada al compresor

P_s [bar]: Presión de salida al compresor

Considerando el compresor 1, la corriente 2 sale a una presión de 200 bar y la corriente 1 entra a una temperatura de 80°C y una presión de 9 bar y sabiendo que $\gamma = 1,4055$ [44], la

temperatura 2 es:

$$T_2 = 80 \text{ °C} \cdot \left(\left(\frac{9 \text{ bar}}{200 \text{ bar}} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} \right)^{-1}$$

$$T_2 = 196 \text{ °C}$$

En el caso del compresor 2 es idéntico. Sin embargo, la presión después del compresor es de 17 bar y el fluido es O₂. Sabiendo que $\gamma = 1,39$ [44]. Con ello, la temperatura de la corriente 14 es:

$$T_{14} = 80 \text{ °C} \cdot \left(\left(\frac{9 \text{ bar}}{17 \text{ bar}} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} \right)^{-1}$$

$$T_{14} = 96 \text{ °C}$$

Por lo tanto, el balance para los compresores es como sigue:

El Compresor 1 recibe potencia eléctrica \dot{W}_{C1} . Utilizando la Ecuación 3.149 y despejando, se obtiene:

$$\dot{W}_{C1} = n_{H_2O}^2 \cdot h_{H_2}^2 - n_{H_2O}^1 \cdot h_{H_2}^1$$

El Compresor 2 recibe potencia eléctrica \dot{W}_{C2} . Utilizando la Ecuación 3.149 y despejando, se obtiene:

$$\dot{W}_{C2} = n_{O_2}^{14} \cdot h_{O_2}^{14} - n_{O_2}^{13} \cdot h_{O_2}^{13}$$

En los Tanques 1 y 2 y en la válvulas 1 y 2, no es necesario hacer el balance de energía dado que son equipos aislados energéticamente. Aplicando la Ecuación 3.146, se cumple que: $h_{O_2}^{14} = h_{O_2}^{15} = h_{O_2}^{16}$ y $h_{H_2}^2 = h_{H_2}^3 = h_{H_2}^4$.

En el Mezclador, se desprecia la energía de mezclado y además se considera que está aislado energéticamente. Utilizando la Ecuación 3.148 y despejando, se tiene:

$$h_{H_2}^5 = \frac{n_{H_2}^4 \cdot h_{H_2}^4 + n_{H_2}^9 \cdot h_{H_2}^9}{n_{H_2}^5}$$

En el Calentador 1 entra se recibe energía de forma externa en forma de calor \dot{Q}_{cal1} . Utilizando la Ecuación 3.151 y despejando, se obtiene:

$$\dot{Q}_{cal1} = n_{H_2}^6 \cdot h_{H_2}^6 - n_{H_2}^5 \cdot h_{H_2}^5$$

En el Calentador 2 entra se recibe energía externa en forma de calor \dot{Q}_{cal2} . Utilizando la Ecuación 3.151 y despejando, se obtiene:

$$\dot{Q}_{cal2} = n_{O_2}^{17} \cdot h_{O_2}^{17} - n_{O_2}^{16} \cdot h_{O_2}^{16}$$

En la celda se absorbe calor externamente \dot{Q}_{FC} y se ejerce trabajo sobre el entorno \dot{W}_{FC} . Apliando la Ecuación 3.154 y despejando:

$$\dot{Q}_{FC} = n_{H_2}^7 \cdot h_{H_2}^7 + n_{H_2O}^7 \cdot h_{H_2O}^7 + \dot{W}_{FC} - n_{O_2}^{17} \cdot h_{O_2}^{17} - n_{H_2}^6 \cdot h_{H_2}^6$$

En el Intercambiador de calor, la energía de la corriente 7 se transfiere a la corriente 18. Se aplica la Ecuación 3.147 y al despejar, se obtiene:

$$n_{H_2O}^{18} = \frac{n_{H_2}^8 \cdot h_{H_2}^8 + n_{H_2O}^8 \cdot h_{H_2O}^8 - n_{H_2}^7 \cdot h_{H_2}^7 - n_{H_2O}^7 \cdot h_{H_2O}^7}{h_{H_2O}^{18} - h_{H_2O}^{19}}$$

En el Condensador 1 se disipa calor latente \dot{Q}_{cond1} del agua y se separan las corrientes de agua con la de H_2 . Utilizando la Ecuación 3.152 y despejando, se obtiene:

$$\dot{Q}_{cond1} = n_{H_2}^8 \cdot h_{H_2}^8 + n_{H_2O}^8 \cdot h_{H_2O}^8 - n_{H_2}^9 \cdot h_{H_2}^9 - n_{H_2O}^{10} \cdot h_{H_2O}^{10}$$

Decisión sobre temperatura en la bomba

En la bomba entra una corriente 12 de H_2O a una presión de 1 bar y en principio se desconoce su temperatura porque se va a estimar a través del balance de energía en dicho equipo. Al electrolizador debe entrar la corriente a una presión de 9 bar y una temperatura de $80^\circ C$ que son las condiciones de operación elegidas para dicho equipo. De este modo, en la bomba, el fluido debe entrar a una temperatura tal, que luego de ser presurizado de 1 a 9 bar salga con una temperatura de $80^\circ C$. Los valores termodinámicos que se tienen entonces son los siguientes:

$$P_{12} = 9 \text{ bar}$$

$$T_{12} = 80^\circ C$$

$$h_{H_2O}^{12} = 336 \text{ kJ kg}^{-1} [44]$$

$$s_{H_2O}^{12} = 1.080 \text{ J (kg K)}^{-1} [44]$$

$$P_{11} = 1 \text{ bar}$$

Y además se sabe que, la bomba opera isoentrópicamente, por lo que:

$$s_{H_2O}^{12} = s_{H_2O}^{11} = 1.080 \text{ J (kg K)}^{-1}$$

Buscando, por lo tanto, buscando la temperatura y entalpía para el H_2O en las condiciones 14 en las tablas termodinámicas, se obtiene que:

$$T_{11} = 80,4^\circ C$$

$$h_{H_2O}^{11} = 337 \text{ kJ kg}^{-1} [44]$$

Es decir se obtiene que el fluido en vez de calentarse al pasar por la bomba, se enfría. Si bien la diferencia de temperatura es de $0,4^\circ C$, de todos modos se produce un enfriamiento.

Luego, el balance de energía en la Bomba 1, aplicando la Ecuación 3.149 queda como:

$$\dot{W}_{B1} = n_{H_2O}^{12} \cdot h_{H_2O}^{12} - n_{H_2O}^{11} \cdot h_{H_2O}^{11}$$

Y como $h_{H_2O}^{11} > h_{H_2O}^{12}$, entonces $\dot{W}_{B1} < 0$. Esto implica que el balance de energía, debería ser planteado de la forma:

$$n_{H_2O}^{11} \cdot h_{H_2O}^{11} = \dot{W}_{B1} + n_{H_2O}^{12} \cdot h_{H_2O}^{12}$$

Y esto significa que la bomba 1 estaría generando un trabajo de salida del sistema, al igual que lo hace una turbina. Es decir, la bomba sería capaz de impulsar el fluido, presurizarlo y además obtener energía de él. Lo anterior parece una contradicción, por lo tanto se buscará una alternativa para que el sistema sea coherente termodinámicamente.

Una forma sería suponer que la corriente 12 está ligeramente más caliente que lo que se necesita en la celda, para que los valores en no difieran tanto que los de 80°C. Sea dicha temperatura 85°C, por tanto, los valores termodinámicos para la corriente 12 son:

$$P_{12} = 9 \text{ bar}$$

$$T_{12} = 85^\circ\text{C}$$

$$h_{H_2O}^{12} = 357 \text{ kJ kg}^{-1} [44]$$

$$s_{H_2O}^{12} = 1.130 \text{ J (kg K)}^{-1} [44]$$

Y para la corriente 11:

$$P_{11} = 1 \text{ bar}$$

$$s_{H_2O}^{11} = s_{H_2O}^{12} = 1.130 \text{ J (kg K)}^{-1}$$

Buscando en las tablas termodinámicas, se obtiene que:

$$T_{11} = 84,6^\circ\text{C}$$

$$h_{H_2O}^{11} = 354 \text{ kJ kg}^{-1} [44]$$

Y ahora puede verse que $h_{H_2O}^{12} < h_{H_2O}^{11}$, de modo que $\dot{W}_{B1} > 0$, lo cual es como se esperaba. De este modo, se tomarán estos datos termodinámicos para el sistema.

Este análisis y decisión es también válida para el sistema SO+Int y el sistema PEM.

Por lo tanto el balance de energía para el Tanque 3 y la Bomba 1, es como sigue:

La Bomba 1 recibe potencia eléctrica \dot{W}_{B1} . Utilizando la Ecuación 3.149 y despejando, se obtiene:

$$\dot{W}_{B1} = n_{H_2O}^{12} \cdot h_{H_2O}^{12} - n_{H_2O}^{11} \cdot h_{H_2O}^{11}$$

En el Tanque 3, se disipa calor Q_{T3} para que el fluido a la salida de la bomba esté en la temperatura deseada. Aplicando la Ecuación 3.152 y despejando la expresión considerando las expresiones de la Tabla A.16, queda:

$$\dot{Q}_{T3} = \frac{Q_{T3}}{t_{alm}} = n_{H_2}^1 \cdot (h_{H_2O}^{10} - h_{H_2O}^{11})$$

Ciclo de Rankine acoplado

Para el ciclo de Rankine acoplado, los balances que quedan son la Turbina, el Condensador 2 y la Bomba 2. En el caso de la turbina, el equipo ejerce trabajo sobre su entorno. Aplicando

la Ecuación 3.149 y despejando, queda:

$$\dot{W}_{Tur} = n_{H_2O}^{19} \cdot h_{H_2O}^{19} - n_{H_2O}^{20} \cdot h_{H_2O}^{20}$$

En el Condensador 2 se disipa calor latente \dot{Q}_{cond2} del agua. Aplicando la Ecuación 3.152 y despejando, queda:

$$\dot{Q}_{cond2} = n_{H_2O}^{20} \cdot h_{H_2O}^{20} - n_{H_2O}^{21} \cdot h_{H_2O}^{21}$$

La Bomba 2 recibe potencia eléctrica \dot{W}_{B2} . Aplicando la Ecuación 3.149 y despejando, se obtiene:

$$\dot{W}_{B2} = n_{H_2O}^{18} \cdot h_{H_2O}^{18} - n_{H_2O}^{21} \cdot h_{H_2O}^{21}$$

Valores utilizados para el balance

En la Tabla A.17 se muestra un resumen con los datos utilizados para hacer el balance.

Tabla A.17: Datos utilizados en los balances para el sistema de almacenamiento con celda de óxido sólido y ciclo Rankine acoplado

Parámetro	Magnitud	Unidades	Referencia
$j_{op,El}$	4.000	A m ⁻²	[52]
$j_{op,FC}$	13.316	A m ⁻²	-
T_{El}	353	K	[52]
T_{FC}	1.073	K	[27]
\dot{W}_{El}	60.000.000	W	Caso Base
t_{alm}	36.900	s	[70]
t_{su}	61.200	s	[92]
x_f	0,8	-	[61]
γ_{H_2}	1,4055	-	[44]
γ_{O_2}	1,39	-	[44]
γ_{H_2O}	1,3255	-	[44]

El valor de $j_{op,FC}$ fue obtenido a partir de las curvas de polarización mostrada en la Figura 5.3.

En la Tabla A.18 se muestra un resumen con los datos termodinámicos utilizados para hacer el balance.

Tabla A.18: Datos termodinámicos de cada corriente en el sistema de óxido sólido y ciclo de Rankine acoplado [44].

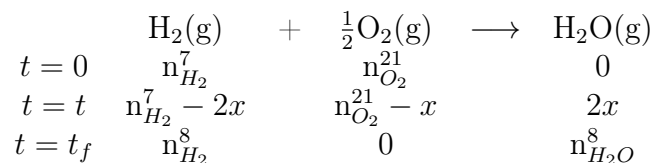
Corriente	Especie	Presión / bar	T / °C	h / kJ kmol ⁻¹
1	H ₂	9	80	10.060
2	H ₂	200	196	13.296
3	H ₂	200	196	13.296
4	H ₂	1		13.296
5	H ₂	1	1	
6	H ₂	1	800	31.367
7	H ₂	1	800	31.370
	H ₂ O	1	800	74.967
8	H ₂	1	99,61	10.628
	H ₂ O	1	99,61	47.390
9	H ₂	1	99,61	10.628
10	H ₂ O	1	99,61	7.524
11	H ₂ O	1	84,6	6.379
12	H ₂ O	9	85	6.433
13	O ₂	9	80	10.302
14	O ₂	17	96	10.779
15	O ₂	17	96	10.779
16	O ₂	1		10.779
17	O ₂	1	800	33.948
18	H ₂ O	50	95	7.240
19	H ₂ O	50	618,2	59.588
20	H ₂ O	0,84	94,6	47.308
21	H ₂ O	0,84	94,6	7.147

A.2.3.2. SO + Integración

A.2.3.2.1 Balance de masa

La reacción que ocurre en la celda es como se muestra en la Ecuación 2.1. Si se asume que el O₂ se agota completamente, se tiene:

Tabla A.19



Aplicando la Ecuación 3.145 para el coeficiente de utilización de combustible en este

sistema, se tiene:

$$\begin{aligned}
 x &= n_{O_2}^{21} \\
 n_{H_2}^8 &= n_{H_2}^7 - 2n_{O_2}^{21} \\
 n_{O_2}^{21} &= \frac{1}{2}n_{H_2}^7(1 - x_f) \\
 n_{H_2O}^8 &= n_{H_2}^7(1 - x_f)
 \end{aligned}$$

En el Intercambiador de calor 1, 2 y Disipador de calor no se producen intercambios de masa, por lo tanto las corrientes no cambian su magnitud ni composición. Por lo que en dichos equipos se cumple la Ecuación 3.133, que se ve de la siguiente forma:

$$\begin{aligned}
 n_{H_2}^{11} &= n_{H_2}^{10} = n_{H_2}^9 = n_{H_2}^8 \\
 n_{H_2O}^{11} &= n_{H_2O}^{10} = n_{H_2O}^9 = n_{H_2O}^8
 \end{aligned}$$

En el Condensador 1 se produce una separación de las corrientes. El H_2 se separa del H_2O , que se van en las corrientes 12 y 13 respectivamente. Utilizando la Ecuación 3.136, se tiene:

$$\begin{aligned}
 n_{H_2}^{12} &= n_{H_2}^{11} \\
 n_{H_2O}^{13} &= n_{H_2O}^{11}
 \end{aligned}$$

En el Calentador 1, el flujo es constante. Aplicando la Ecuación 3.133 se tiene que $n_{H_2}^5 = n_{H_2}^6 = n_{H_2}^7$. En el Mezclador entran las corrientes 4 y 12 y sale la corriente 5. Utilizando la Ecuación 3.138 y despejando, se obtiene:

$$n_{H_2}^4 = (1 - x_f)n_{H_2}^7$$

En la Válvula 1, se asume que hay flujo constante. Aplicando la Ecuación 3.133 se cumple que $n_{H_2}^3 = n_{H_2}^4$. En el Tanque 1 entra la corriente 3 por un tiempo t_{alm} y sale la corriente 3 por un tiempo t_{su} . Utilizando la Ecuación 3.135 y despejando, resulta:

$$n_{H_2}^2 = (1 - x_f)n_{H_2}^7 \frac{t_{su}}{t_{alm}}$$

En el Compresor 1, se asume que hay flujo constante. Utilizando la Ecuación 3.133 se tiene que $n_{H_2}^1 = n_{H_2}^2$. Y dentro del Electrolizador la reacción es como se muestra en la Ecuación 2.2. Además, se considera que se agota toda el agua que entra como reactivo. Por consiguiente, el balance de masa queda como:

Considerando lo anterior, se obtiene:

$$\begin{aligned}
 x &= n_{H_2O}^{15} \\
 n_{O_2}^{16} &= \frac{1}{2}n_{H_2O}^{15} \\
 n_{H_2}^1 &= n_{H_2O}^{15}
 \end{aligned}$$

Tabla A.20

	$\text{H}_2\text{O}(\text{g})$	\longrightarrow	$\frac{1}{2}\text{O}_2(\text{g})$	$+$	$\text{H}_2(\text{g})$
$t = 0$	$n_{\text{H}_2\text{O}}^{15}$		0		0
$t = t$	$n_{\text{H}_2}^{15} - x$		$\frac{1}{2}x$		x
$t = t_f$	0		$n_{\text{O}_2}^{16}$		$n_{\text{H}_2}^1$

La Bomba 1 opera a flujo constante. Utilizando la Ecuación 3.133 se tiene que $n_{\text{H}_2\text{O}}^{14} = n_{\text{H}_2\text{O}}^{15}$. En el Tanque 3 entra una corriente 13 durante un tiempo t_{su} y sale una corriente 14 durante un tiempo t_{alm} . Aplicando la Ecuación 3.135 y despejando, se obtiene:

$$n_{\text{H}_2\text{O}}^{14} = n_{\text{H}_2\text{O}}^{13} \frac{t_{su}}{t_{alm}}$$

El Compresor 2 opera a flujo constante. Aplicando la Ecuación 3.133 se cumple que $n_{\text{O}_2}^{17} = n_{\text{O}_2}^{16}$. En el Tanque 2, entra una corriente 17 durante un tiempo t_{alm} y sale una corriente 18 durante un tiempo t_{su} . Utilizando la Ecuación 3.133 y despejando, se tiene:

$$n_{\text{O}_2}^{18} = n_{\text{O}_2}^{17} \frac{t_{alm}}{t_{su}}$$

Y por último, en la Válvula 2, el Intercambiador de calor 2 y el Calentador 2 el flujo es constante. Usando la Ecuación 3.133 para los mencionados equipos, se tiene que $n_{\text{O}_2}^{21} = n_{\text{O}_2}^{20} = n_{\text{O}_2}^{19} = n_{\text{O}_2}^{18}$.

Y dado que todos los parámetros de operación que se toman como supuesto están asociados al electrolizador, se considerará que el sistema puede quedar como función del flujo de H_2 que sale de dicho equipo. En la Tabla A.21 se resumen las expresiones de todas las corrientes del sistema como función de $n_{\text{H}_2}^1$:

Tabla A.21: Resumen de corrientes y expresiones en función de la corriente de H_2 de salida del electrolizador, en el sistema SOFC+Int.

Corriente	Expresión
$n_{\text{H}_2}^1$	$n_{\text{H}_2}^1$
$n_{\text{H}_2}^2$	$n_{\text{H}_2}^1$
$n_{\text{H}_2}^3$	$n_{\text{H}_2}^1 \frac{t_{alm}}{t_{su}}$
$n_{\text{H}_2}^4$	$n_{\text{H}_2}^1 \frac{t_{alm}}{t_{su}}$
$n_{\text{H}_2}^5$	$\frac{1}{1-x_f} n_{\text{H}_2}^1 \frac{t_{alm}}{t_{su}}$
$n_{\text{H}_2}^6$	$\frac{1}{1-x_f} n_{\text{H}_2}^1 \frac{t_{alm}}{t_{su}}$
$n_{\text{H}_2}^7$	$\frac{1}{1-x_f} n_{\text{H}_2}^1 \frac{t_{alm}}{t_{su}}$
$n_{\text{H}_2}^8$	$\frac{x_f}{1-x_f} n_{\text{H}_2}^1 \frac{t_{alm}}{t_{su}}$
$n_{\text{H}_2\text{O}}^8$	$n_{\text{H}_2}^1 \frac{t_{alm}}{t_{su}}$
$n_{\text{H}_2}^9$	$\frac{x_f}{1-x_f} n_{\text{H}_2}^1 \frac{t_{alm}}{t_{su}}$
$n_{\text{H}_2\text{O}}^9$	$n_{\text{H}_2}^1 \frac{t_{alm}}{t_{su}}$

Tabla A.21: Resumen de corrientes y expresiones en función de la corriente de H_2 de salida del electrolizador, en el sistema SOFC+Int.

Corriente	Expresión
$n_{H_2}^{10}$	$\frac{x_f}{1-x_f} n_{H_2}^1 \frac{t_{alm}}{t_{su}}$
$n_{H_2O}^{10}$	$n_{H_2}^1 \frac{t_{alm}}{t_{su}}$
$n_{H_2}^{11}$	$\frac{x_f}{1-x_f} n_{H_2}^1 \frac{t_{alm}}{t_{su}}$
$n_{H_2O}^{11}$	$n_{H_2}^1 \frac{t_{alm}}{t_{su}}$
$n_{H_2O}^{12}$	$\frac{x_f}{1-x_f} n_{H_2}^1 \frac{t_{alm}}{t_{su}}$
$n_{O_2}^{13}$	$n_{H_2}^1 \frac{t_{alm}}{t_{su}}$
$n_{H_2O}^{14}$	$n_{H_2}^1$
$n_{H_2O}^{15}$	$n_{H_2}^1$
$n_{O_2}^{16}$	$\frac{1}{2} n_{H_2}^1$
$n_{O_2}^{17}$	$\frac{1}{2} n_{H_2}^1$
$n_{O_2}^{18}$	$\frac{1}{2} n_{H_2}^1 \frac{t_{alm}}{t_{su}}$
$n_{O_2}^{19}$	$\frac{1}{2} n_{H_2}^1 \frac{t_{alm}}{t_{su}}$
$n_{O_2}^{20}$	$\frac{1}{2} n_{H_2}^1 \frac{t_{alm}}{t_{su}}$
$n_{O_2}^{21}$	$\frac{1}{2} n_{H_2}^1 \frac{t_{alm}}{t_{su}}$

A.2.3.2.2 Balance de Energía

El balance de energía tomará los mismos supuestos que fueron señalados en la Sección 3.4.1.2.

El Electrolizador recibe potencia eléctrica \dot{W}_{El} desde la red eléctrica y disipa calor al ambiente \dot{Q}_{El} . Utilizando la Ecuación 3.153 y despejando, resulta:

$$\dot{Q}_{El} = \dot{W}_{El} + n_{H_2O}^{15} \cdot h_{H_2O}^{15} - n_{O_2}^{16} \cdot h_{O_2}^{16} - n_{H_2}^1 \cdot h_{H_2}^1$$

El Compresor 1 recibe potencia eléctrica \dot{W}_{C1} . Utilizando la Ecuación 3.149 y despejando, se obtiene:

$$\dot{W}_{C1} = n_{H_2O}^2 \cdot h_{H_2}^2 - n_{H_2O}^1 \cdot h_{H_2}^1$$

El Compresor 2 recibe potencia eléctrica \dot{W}_{C2} . Utilizando la Ecuación 3.149 y despejando, se obtiene:

$$\dot{W}_{C2} = n_{O_2}^{17} \cdot h_{O_2}^{17} - n_{O_2}^{16} \cdot h_{O_2}^{16}$$

En los Tanques 1 y 2 y en la Válvulas 1 y 2, no es necesario hacer el balance de energía dado que son equipos aislados energéticamente. Aplicando la Ecuación 3.146 se cumple que $h_{O_2}^{17} = h_{O_2}^{18} = h_{O_2}^{19}$ y $h_{H_2}^2 = h_{H_2}^3 = h_{H_2}^4$.

En el Mezclador, se desprecia la energía de mezclado y además se considera que está

aislado energéticamente. Al aplicar la Ecuación 3.148 y despejar, se obtiene:

$$h_{H_2}^5 = \frac{n_{H_2}^4 \cdot h_{H_2}^4 + n_{H_2}^{12} \cdot h_{H_2}^{12}}{n_{H_2}^5}$$

Integración energética.

La configuración de la integración energética requiere de un análisis. Considerando la nomenclatura de la Figura 3.2, se comenta que la corriente 8 tiene que llegar al electrolizador en la corriente 15. En ese proceso, debe disminuir su temperatura desde 800°C hasta 85°C. Eso implica que deba eliminar calor en las etapas que están entre medio de estos 2 extremos. Para aprovechar ese cambio de temperatura inminente, se hará pasar la corriente 8 por un intercambiador de calor tal que el calor que la corriente debe remover, sea aprovechado por otra corriente que se tenga que calentar. El caso es que la corriente 5 de H₂ y la corriente 19 de O₂ deben calentarse hasta los 800°C para entrar a la celda de combustible. Por lo tanto, la corriente pondrá en contacto en un intercambiador de calor con la corriente 5 o 19 o ambas.

Se propone que el intercambio ocurra primero entre la corriente 5 y la 8¹. Esto porque por la Heurística de Caliente-Caliente y Frío-Frío, ésa es la combinación de la corriente más caliente de las corrientes *calientes* con la corriente más caliente de las corrientes *frías*², recordando que la corriente 5 está a 110,5°C y la corriente 19 a 96°C.

Si se recuerda el balance de energía en el sistema SOFC+R, se puede notar que en el caso de dicho sistema, el intercambio se producía entre el sistema general y el ciclo acoplado. En tal caso, el flujo del ciclo acoplado dependía del balance de energía únicamente. Es decir, al imponerse alguna condición sobre la salida en dicho balance, se podía conocer el flujo del ciclo acoplado. Y esa masa no afecta la operación del ciclo general, dado que está en función de la condición que se le ponga al intercambio. Sin embargo, en el caso de la integración energética como se plantea en esta sección, no se puede encontrar una masa a través de una condición de salida, puesto que las masas están fijas. Es decir, si no se utilizara la integración energética, el sistema funcionaría sin inconvenientes. En ese caso solamente disminuiría la eficiencia puesto que el calor requerido en los calentadores sería mayor. Sin embargo, en la propuesta que se plantea busca que dicho calor sea el menor posible. Por lo tanto, no es posible fijar una corriente o encontrarla desde el balance de energía dentro de los intercambiadores, porque éstas están fijas desde el balance de masa. Por otro lado, las condiciones de entrada también se conocen, puesto que se conocen la temperatura y presión de las corrientes 8 y 5. De este modo, lo único que se puede conocer en ese balance es una salida. Y para que el balance sea coherente, se deben respetar las leyes de la termodinámica. Por ejemplo, si se impusiera que la temperatura de la corriente 9 es una en particular, el balance no puede dar como resultado que la temperatura de la corriente 6 es superior a los 800°C.

Considerando lo anterior, en esta sección se debe explorar qué condiciones se pueden imponer en el sistema para que exista un intercambio provechoso. Es decir, que la corriente 9 salga más fría y que la corriente 6 salga más caliente, pero sin ser más caliente que los 800°C.

¹En vez de que el primer intercambio sea entre las corriente 19 y 8

²Las corrientes 5 y 19 son las corriente *frías* y la corriente 8 es la corriente *caliente*

Supóngase que la corriente 9 sale del intercambiador de calor a una temperatura de 99,61°C y 1 bar. La corriente 8 entra a 800°C y 1 bar y la corriente 5 entra a 110,5°C y 1 bar. Las entalpías en cada caso serían [44]:

$$\begin{aligned}h_{H_2}^5 &= 11.161 \text{ kJ kmol}^{-1} \\h_{H_2O}^8 &= 74.925,2 \text{ kJ kmol}^{-1} \\h_{H_2}^8 &= 31.367,2 \text{ kJ kmol}^{-1} \\h_{H_2O}^9 &= 47.374,6 \text{ kJ kmol}^{-1} \\h_{H_2}^9 &= 10.628,3 \text{ kJ kmol}^{-1}\end{aligned}$$

Utilizando las expresiones de la Tabla A.21 y considerando la Ecuación 3.147, el balance queda como:

$$h_{H_2}^6 = h_{H_2}^5 + x_f h_{H_2}^8 + h_{H_2O}^8 - x_f h_{H_2}^9 - h_{H_2O}^9 \quad (\text{A.2})$$

Reemplazando los valores, considerando que $x_f = 0,8$, queda: $h_{H_2}^6 = 56.901 \text{ kJ kmol}^{-1}$

Según las Tablas Termodinámicas, esta entalpía corresponde a una temperatura mayor a los 800°C [44]. Por lo tanto, implicaría que la corriente 6 saldría incluso más caliente que la corriente 8. Esto no es termodinámicamente posible, de modo que hay que buscar otra condición de salida para que sí sea factible.

Supóngase que la corriente 9 sale a 160°C y 1 bar. En tal caso, las entalpías para 9 serían [44]:

$$\begin{aligned}h_{H_2O}^9 &= 50.391 \text{ kJ kmol}^{-1} \\h_{H_2}^9 &= 12.360 \text{ kJ kmol}^{-1}\end{aligned}$$

Utilizando la Ecuación A.2 y reemplazando, se tiene que: $h_{H_2}^6 = 31.284 \text{ kJ kmol}^{-1}$. Según las Tablas Termodinámicas, esa entalpía corresponde a una temperatura de 797°C, lo cual es factible.

De este modo, la corriente 9 sigue estando más caliente que los 85°C que necesita tener para llegar al Electrolizador. Y al mismo tiempo, está más caliente que los 96°C a los que está la corriente 19. Es decir, se podría generar plantear un paso adicional en la integración energética.

Ahora, al Intercambiador de calor 2, entran las corrientes 9 a 160°C y 1 bar y la corriente 19 a 96°C y 1 bar. De la misma manera que anteriormente se discutió, solamente se proponer una temperatura de salida. Supóngase que la corriente 10 sale a una temperatura de 99,61°C, que es la temperatura de saturación del H_2O a 1 bar. En ese caso, las entalpías son [44]:

$$\begin{aligned}h_{H_2O}^9 &= 50.391 \text{ kJ kmol}^{-1} \\h_{H_2}^9 &= 12.360 \text{ kJ kmol}^{-1} \\h_{H_2O}^{10} &= 47.374,6 \text{ kJ kmol}^{-1} \\h_{H_2}^{10} &= 10.628,3 \text{ kJ kmol}^{-1} \\h_{O_2}^{19} &= 10.779 \text{ kJ kmol}^{-1}\end{aligned}$$

Tomando la Ecuación A.2 y adaptándola a las corrientes del Intercambiador 2, se tiene:

$$h_{O_2}^{20} = h_{O_2}^{19} + 2(h_{H_2O}^9 - h_{H_2O}^{10}) + \frac{2x_f}{1 - x_f}(h_{H_2}^9 - h_{H_2}^{10}) \quad (\text{A.3})$$

Sabiendo que $x_f = 0,8$ resulta: $h_{O_2}^{20} = 30.669 \text{ kJ kmol}^{-1}$. Revisando las Tablas Termodinámicas, esa entalpía corresponde a una temperatura mayor a 160°C . Por lo tanto, nuevamente esta situación es termodinámicamente no factible. La solución es hacer el mismo procedimiento que para el Intercambiador de calor 1, es decir, aumentar la temperatura de salida que se impone.

Supóngase que la temperatura de la corriente 10 es 150°C . En tal caso, las entalpías serían [44]:

$$h_{H_2O}^{10} = 50.034 \text{ kJ kmol}^{-1}$$

$$h_{H_2}^{10} = 12.405 \text{ kJ kmol}^{-1}$$

Tomando la Ecuación A.3 y reemplazando, se tiene que: $h_{O_2}^{20} = 11.136 \text{ kJ kmol}^{-1}$. Según las Tablas Termodinámicas, esta entalpía se asocia a una temperatura de 107°C , lo cual es termodinámicamente factible.

De este modo, se encuentran las temperaturas con las que se realizan los intercambios de calor. Ahora, como la corriente 10 sale a una temperatura de 150°C y su temperatura objetivo es de 85°C , de todos modos se debe seguir disminuyendo. Por lo tanto, como ya no quedan corrientes que se tienen que calentar en el sistema, solamente queda eliminar calor. Tampoco se debe olvidar que la corriente 10 está compuesta por H_2 y H_2O , especies que se tienen que separar entre sí. Para separar esas especies, se necesita llevar el sistema hasta una temperatura de $99,61^\circ\text{C}$ y remover su calor latente para que el H_2O pase al estado de líquido saturado, se tengan 2 fases: líquida de H_2O y gaseosa de H_2 . DE esta manera la separación es sencilla.

Por lo tanto, a la corriente 10, se la hace pasar por un equipo que disipa calor para que la corriente disminuya su temperatura de 150°C a $99,61^\circ\text{C}$. Este equipo es el Disipador de calor. A la salida de este equipo, la corriente 11 entra a un Condensador, donde se remueve el calor latente del H_2O hasta que pase al estado de líquido saturado y se separe del H_2 .

En virtud de lo anterior, se plantea el balance definitivo para los intercambiadores de calor.

En el Intercambiador de calor 1, no hay transferencia de calor con el exterior. La corriente caliente transfiere el calor íntegramente a la corriente fría. Aplicando la Ecuación 3.147 y despajando, queda:

$$h_{H_2}^6 = \frac{n_{H_2}^5 \cdot h_{H_2}^5 + n_{H_2}^8 \cdot h_{H_2}^8 + n_{H_2O}^8 \cdot h_{H_2O}^8 - n_{H_2}^9 \cdot h_{H_2}^9 + n_{H_2O}^9 \cdot h_{H_2O}^9}{n_{H_2}^6}$$

En el Calentador 1 entra se recibe energía de forma externa en forma de calor \dot{Q}_{cal1} . Utilizando la Ecuación 3.151 y despejando, se obtiene:

$$\dot{Q}_{cal1} = n_{H_2}^7 \cdot h_{H_2}^7 - n_{H_2}^6 \cdot h_{H_2}^6$$

En el Intercambiador de calor 2, no hay transferencia de calor con el exterior. La corriente caliente transfiere el calor íntegramente a la corriente fría. Utilizando la Ecuación 3.151 y

despejando, se obtiene:

$$h_{O_2}^{20} = \frac{n_{O_2}^{19} \cdot h_{O_2}^{19} + n_{H_2}^9 \cdot h_{H_2}^9 + n_{H_2O}^9 \cdot h_{H_2O}^9 - n_{H_2}^{10} \cdot h_{H_2}^{10} + n_{H_2O}^{10} \cdot h_{H_2O}^{10}}{n_{O_2}^{20}}$$

En el Calentador 2 se recibe energía externa en forma de calor \dot{Q}_{cal2} . Aplicando la Ecuación 3.151 y despejando:

$$\dot{Q}_{cal2} = n_{O_2}^{21} \cdot h_{O_2}^{21} - n_{O_2}^{20} \cdot h_{O_2}^{20}$$

En la Celda de combustible se absorbe calor externamente \dot{Q}_{FC} y se ejerce trabajo sobre el entorno \dot{W}_{FC} . Aplicando la Ecuación 3.154 y despejando, se obtiene:

$$\dot{Q}_{FC} = n_{H_2}^8 \cdot h_{H_2}^8 + n_{H_2O}^8 \cdot h_{H_2O}^8 + \dot{W}_{FC} - n_{O_2}^{21} \cdot h_{O_2}^{21} - n_{H_2}^7 \cdot h_{H_2}^7$$

En el Disipador de calor, se disipa calor sin ejercer ni recibir trabajo del exterior. Aplicando la Ecuación 3.152 y despejando, queda:

$$\dot{Q}_{dis} = n_{H_2}^{10} \cdot h_{H_2}^{10} + n_{H_2O}^{10} \cdot h_{H_2O}^{10} - n_{H_2}^{11} \cdot h_{H_2}^{11} - n_{H_2O}^{11} \cdot h_{H_2O}^{11}$$

En el Condensador 1, se disipa calor latente \dot{Q}_{cond1} del H_2O y además, dicha especie se separa íntegramente del H_2 . Aplicando la Ecuación 3.152 y despejando, se obtiene:

$$\dot{Q}_{cond1} = n_{H_2}^{11} \cdot h_{H_2}^{11} + n_{H_2O}^{11} \cdot h_{H_2O}^{11} - n_{H_2}^{12} \cdot h_{H_2}^{12} - n_{H_2O}^{13} \cdot h_{H_2O}^{13}$$

En el Tanque 3, se disipa calor Q_{T3} para que el fluido a la salida de la bomba esté en la temperatura deseada. Utilizando la Ecuación 3.152 y despejando con las expresiones de la Tabla A.21, queda:

$$\dot{Q}_{T3} = \frac{Q_{T3}}{t_{alm}} = n_{H_2}^1 \cdot (h_{H_2O}^{13} - h_{H_2O}^{14})$$

La Bomba 1 recibe potencia eléctrica \dot{W}_{B1} para impulsar el fluido. Utilizando la Ecuación 3.149 y despejando, se obtiene:

$$\dot{W}_{B1} = n_{H_2O}^{15} \cdot h_{H_2O}^{15} - n_{H_2O}^{14} \cdot h_{H_2O}^{14}$$

Y finalmente, si se plantea la Ley de Faraday para ambos equipos electroquímicos. En el caso del electrolizador, la expresión es idéntica a la Ecuación 3.143. Para la celda de combustible, la expresión es análoga a la Ecuación 3.144, salvo que en este caso es igual a $n_{H_2O}^8$, como se muestra a continuación:

$$n_{H_2O}^8 = \frac{1}{\nu_e F} \cdot \frac{W_{FC}}{U_{FC}}$$

Recordando que en la Tabla A.21 se encuentra una relación entre $n_{H_2O}^8$ y $n_{H_2}^1$. Considerando lo anterior, el sistema se resuelve.

Adicionalmente, se recuerda que el dimensionamiento de los equipos electroquímicos, se realiza utilizando la Ecuación 3.142.

Y finalmente, se realiza un balance global de energía. Para ello se toma el sistema como una caja negra donde se contabilizan únicamente las entradas y salidas de energías de él, mas no así los intercambios que hayan ocurrido dentro del sistema como en los intercambiadores de calor. El balance es similar a como se muestra en la Ecuación 3.155 y 3.156, salvo que en este caso no se considera la potencia de una turbina, condensador 2 ni bomba 2. El balance es como sigue:

$$E = (\dot{W}_{El} + \dot{W}_{C1} + \dot{W}_{C2} + \dot{W}_{B1}) \cdot t_{alm} + (\dot{Q}_{cal1} + \dot{Q}_{cal2} + \dot{Q}_{FC}) \cdot t_{su} \quad (A.4)$$

$$S = \left(\dot{Q}_{El} + \frac{Q_{T3}}{t_{alm}} \right) \cdot t_{alm} + (\dot{Q}_{cond1} + \dot{W}_{FC}) \cdot t_{su} \quad (A.5)$$

Los datos utilizados para realizar el balance son idénticos a los que se usan en el sistema SO+Rankine. Estos datos se muestran en la Tabla A.17.

Y los datos termodinámicos asociados a las corrientes, se muestran en la Tabla A.22.

Tabla A.22: Datos termodinámicos de cada corriente en el sistema de óxido sólido con integración energética [44]

Corriente	Especie	Presión / bar	T / °C	h / kJ kmol ⁻¹
1	H ₂	9	80	10.060
2	H ₂	200	196	13.296
3	H ₂	200	196	13.296
4	H ₂	1	196	13.296
5	H ₂	1		
6	H ₂	1		
7	H ₂	1	800	31.367
8	H ₂	1	800	31.370
	H ₂ O	1	800	74.967
9	H ₂	1	160	12.360
	H ₂ O	1	160	50.391
10	H ₂	1	150	12.405
	H ₂ O	1	150	50.034
11	H ₂	1	99,61	10.628
	H ₂ O	1	99,61	47.390
12	H ₂	1	99,61	10.628
13	H ₂ O	1	99,61	7.524
14	H ₂ O	1	84,6	6.379
15	H ₂ O	9	85	6.433
16	O ₂	9	80	10.302
17	O ₂	17	96	10.779
18	O ₂	17	96	10.779
19	O ₂	1	96	10.779
20	O ₂	1		
21	O ₂	1	800	33.948

Coeficiente de Joule-Thomson

A continuación se señala la explicación del comportamiento de la temperatura al pasar por una válvula, utilizando el coeficiente de Joule-Thomson μ_{JT} .

Un fluido puede experimentar una caída considerable en su temperatura cuando se hace pasar por un tapón poroso, una válvula o un tubo capilar, debido al estrangulamiento que ejercen estos equipos. Sin embargo, no siempre se da ese caso, la temperatura puede no variar o incluso aumentar durante el estrangulamiento.

El comportamiento de la temperatura de un fluido durante un proceso de estrangulamiento, en el que se cumple que la entalpía es constante, está descrito por el coeficiente de Joule-Thomson, el cual se define por:

$$\mu_{JT} = \left(\frac{\partial T}{\partial P} \right)_h \quad (\text{A.6})$$

El coeficiente de Joule-Thomson representa el cambio de la temperatura al variar la presión en procesos donde $h=\text{constante}$. Para este coeficiente, se pueden dar 3 casos [44]:

$$\mu_{JT} = \left\{ \begin{array}{l} < 0, \text{ La temperatura aumenta} \\ = 0, \text{ La temperatura no varía} \\ > 0, \text{ La temperatura disminuye} \end{array} \right\}$$

Se puede plantear una expresión para el coeficiente de Joule-Thomson en función de los calores específicos, la presión, el volumen y la temperatura, como se muestra a continuación [44]:

$$\mu_{JT} = -\frac{1}{c_P} \left[v - T \left(\frac{\partial v}{\partial T} \right)_P \right] \quad (\text{A.7})$$

Luego, se recuerda que en este estudio, se asumió que los gases H_2 y O_2 son considerados ideales. Por lo tanto, la variación de temperatura cuando estos gases pasan por la válvula, se puede determinar matemáticamente utilizando μ_{JT} . Para ello, considérese la Ecuación de Gases Ideales molar:

$$v = \frac{V}{n} = \frac{RT}{P}$$

Desarrollando la derivada, queda:

$$\left(\frac{\partial v}{\partial T} \right)_P = \left(\frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{RT}{P} \right) \right)_P = \frac{R}{P}$$

Reemplazando esta expresión en la Ecuación A.7, resulta:

$$\mu_{JT} = -\frac{1}{c_P} \left(v - T \frac{R}{P} \right) = -\frac{1}{c_P} (v - v) \\ \mu_{JT} = 0$$

Por lo tanto, puede asegurarse, que la variación de temperatura en gases ideales cuando se someten a un proceso de estrangulamiento a entalpía constante, es 0. Es decir, la temperatura se mantiene constante en el paso por las válvulas.

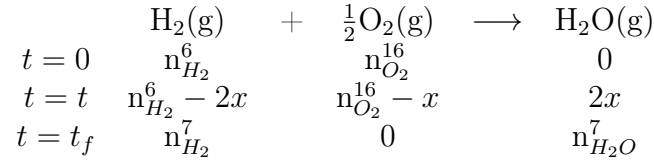
A.2.3.3. PEM

A.2.3.3.1 Balance de masa

La reacción que ocurre en la celda es como se muestra en la Ecuación 2.1. Si se asume que el O_2 se agota completamente, se tiene:

Considerando el grado de avance de la reacción y utilizando la Ecuación 3.145 del

Tabla A.23



coeficiente de utilización de combustible x_f , se obtiene:

$$\begin{aligned}
 x &= n_{\text{O}_2}^{16} \\
 n_{\text{H}_2}^7 &= n_{\text{H}_2}^6 - 2n_{\text{O}_2}^{16} \\
 n_{\text{O}_2}^{16} &= \frac{1}{2}n_{\text{H}_2}^6(1 - x_f) \\
 n_{\text{H}_2\text{O}}^7 &= n_{\text{H}_2}^6(1 - x_f)
 \end{aligned}$$

El Separador de Fases separa íntegramente las especies entre sí. Es decir, se obtiene una corriente de salida de H_2 puro y de H_2O puro. Aplicando la Ecuación 3.136, se tiene que:

$$\begin{aligned}
 n_{\text{H}_2}^8 &= n_{\text{H}_2}^7 \\
 n_{\text{H}_2\text{O}}^9 &= n_{\text{H}_2\text{O}}^7
 \end{aligned}$$

En el Mezclador, se incorporan las corrientes 5 y 8 y sale la corriente 6 de H_2 . Utilizando la Ecuación 3.148: y despejando, se obtiene

$$n_{\text{H}_2}^5 = n_{\text{H}_2}^6 - n_{\text{H}_2}^8$$

En las Válvulas 1 y 2 y en las Turbinas 1 y 2 se opera a flujo constante. Aplicando la Ecuación 3.133 se obtiene:

$$\begin{aligned}
 n_{\text{H}_2}^3 &= n_{\text{H}_2}^4 = n_{\text{H}_2}^5 \\
 n_{\text{O}_2}^{14} &= n_{\text{O}_2}^{15} = n_{\text{O}_2}^{16}
 \end{aligned}$$

En los Tanques no se mantiene el flujo, porque las entradas y salidas ocurren en tiempos distintos. Por lo tanto, se debe hacer un balance de masa considerando los tiempos. En el Tanque 1 entra una corriente 2 durante un tiempo t_{alm} y sale una corriente 3 durante un tiempo t_{su} . En el Tanque 2 entra una corriente 13 durante un tiempo t_{alm} y sale una corriente 14 durante un tiempo t_{su} . Y en el Tanque 3 entra una corriente 9 durante un tiempo t_{su} y sale una corriente 10 durante un tiempo t_{alm} . Aplicando la Ecuación 3.135 y despejando, se obtiene para cada caso:

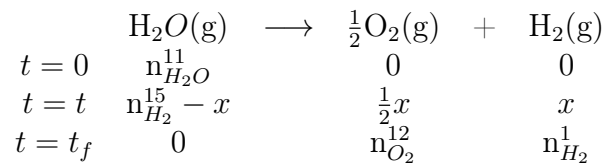
$$\begin{aligned}
 n_{\text{H}_2}^2 &= n_{\text{H}_2}^3 \frac{t_{su}}{t_{alm}} \\
 n_{\text{O}_2}^{13} &= n_{\text{O}_2}^{14} \frac{t_{su}}{t_{alm}} \\
 n_{\text{H}_2\text{O}}^9 &= n_{\text{H}_2\text{O}}^{10} \frac{t_{alm}}{t_{su}}
 \end{aligned}$$

La Bomba 1, el Compresor 1 y el Compresor 2 operan a flujo constante. Aplicando la Ecuación 3.133 para cada equipo, se tiene:

$$\begin{aligned} n_{H_2O}^{10} &= n_{H_2O}^{11} \\ n_{H_2}^1 &= n_{H_2}^2 \\ n_{O_2}^{12} &= n_{O_2}^{13} \end{aligned}$$

En el Electrolizador, reacción es como se muestra en la Ecuación 2.2. Se considera que se agota toda el agua que entra como reactivo. Por consiguiente, el balance de masa queda como:

Tabla A.24



Considerando lo anterior, se obtiene:

$$\begin{aligned} x &= n_{H_2O}^{11} \\ n_{O_2}^{12} &= \frac{1}{2}n_{H_2O}^{11} \\ n_{H_2}^1 &= n_{H_2O}^{11} \end{aligned}$$

Y dado que todos los parámetros de operación que se toman como supuesto están asociados al electrolizador, se considerará que el sistema puede quedar como función del flujo de H_2 que sale de dicho equipo. En la Tabla A.25 se resumen las expresiones de todas las corrientes del sistema como función de $n_{H_2}^1$:

Tabla A.25: Resumen de corrientes y expresiones en función de la corriente de H₂ de salida del electrolizador, en el sistema PEM

Corriente	Expresión
$n_{H_2}^1$	n_{H_2}
$n_{H_2}^2$	n_{H_2}
$n_{H_2}^3$	$n_{H_2} \frac{t_{alm}}{t_{su}}$
$n_{H_2}^4$	$n_{H_2} \frac{t_{alm}}{t_{su}}$
$n_{H_2}^5$	$n_{H_2} \frac{t_{alm}}{t_{su}}$
$n_{H_2}^6$	$\frac{1}{1-x_f} n_{H_2} \frac{t_{alm}}{t_{su}}$
$n_{H_2}^7$	$\frac{x_f}{1-x_f} n_{H_2} \frac{t_{alm}}{t_{su}}$
$n_{H_2}^7 O$	$n_{H_2} \frac{t_{alm}}{t_{su}}$
$n_{H_2}^8$	$\frac{x_f}{1-x_f} n_{H_2} \frac{t_{alm}}{t_{su}}$
$n_{H_2}^9 O$	$n_{H_2} \frac{t_{alm}}{t_{su}}$
$n_{H_2}^{10} O$	n_{H_2}
$n_{H_2}^{11} O$	n_{H_2}
$n_{H_2}^{12}$	$\frac{1}{2} n_{H_2}$
$n_{H_2}^{13}$	$\frac{1}{2} n_{H_2}$
$n_{H_2}^{14}$	$\frac{1}{2} n_{H_2} \frac{t_{alm}}{t_{su}}$
$n_{H_2}^{15}$	$\frac{1}{2} n_{H_2} \frac{t_{alm}}{t_{su}}$
$n_{H_2}^{16}$	$\frac{1}{2} n_{H_2} \frac{t_{alm}}{t_{su}}$

A.2.3.3.2 Balance de Energía

El balance de energía tomará los mismos supuestos que fueron señalados en la Sección 3.4.1.2. Naturalmente hay supuestos que no son válidos para este sistema puesto que dichos equipos no están presentes. Adicionalmente, se menciona que el Separador de Fases opera sin transferencias de energía.

El Electrolizador recibe potencia eléctrica \dot{W}_{El} desde la red eléctrica y disipa calor al ambiente \dot{Q}_{El} . Aplicando la Ecuación 3.153 y despejando, se obtiene:

$$\dot{Q}_{El} = \dot{W}_{El} + n_{H_2O}^{11} \cdot h_{H_2O}^{11} - n_{O_2}^{12} \cdot h_{O_2}^{12} - n_{H_2}^1 \cdot h_{H_2}^1$$

El Compresor 1 recibe potencia eléctrica \dot{W}_{C1} . Utilizando la Ecuación 3.149 y despejando, resulta:

$$\dot{W}_{C1} = n_{H_2}^2 \cdot h_{H_2}^2 - n_{H_2}^1 \cdot h_{H_2}^1$$

El Compresor 2 recibe potencia eléctrica \dot{W}_{C2} . Utilizando la Ecuación 3.149 y despejando, resulta:

$$\dot{W}_{C2} = n_{O_2}^{13} \cdot h_{O_2}^{13} - n_{O_2}^{12} \cdot h_{O_2}^{12}$$

En los Tanques 1 y 2 y en la Válvulas 1 y 2, no es necesario hacer el balance de energía

dado que son equipos aislados energéticamente. Aplicando la Ecuación 3.146 a cada uno, se cumple que: $h_{O_2}^{14} = h_{O_2}^{13}$, $h_{O_2}^{16} = h_{O_2}^{197}$ y $h_{H_2}^3 = h_{H_2}^2$, $h_{H_2}^5 = h_{H_2}^4$.

Configuración de turbinas y válvulas

A la salida de los tanques, se necesita realizar una descompresión del fluido para alcanzar la presión de operación de la celda de combustible, que en este caso es 1,4 bar. Dado que en esta configuración, la celda de combustible y el electrolizador operan a la misma temperatura, es necesario asegurar que las corrientes intermedias alcancen estas temperaturas. En el caso de las configuraciones que usan celdas de óxido sólido simplemente había que disminuir la presión y luego calentar. Pero en este caso hay que disminuir la presión y reducir la presión, por lo que solamente poner válvulas no permitirá lograrlo, dado que las válvulas solamente son capaces de reducir la presión mas no de enfriar un gas ideal, como se ve en el Anexo A.2.3.2.2, sección de Coeficiente de Joule-Thomson.

Una alternativa sería que las corrientes se enfríen en los mismos estanques y luego disminuyan su presión en válvulas. Sin embargo eso eliminaría energía de las corrientes, por lo que se preferirá una alternativa donde esa energía se pueda aprovechar.

Se propone una alternativa donde a la salida de los tanques de las líneas gaseosas, hayan turbinas que permitan reducir la presión y la temperatura simultáneamente. Este proceso es isoentrópico, por lo tanto no comparte calor con el exterior. La alternativa parece interesante, pues la turbina permitiría reducir tanto la temperatura como la presión en un solo paso, que es justamente lo deseado. Viendo la Figura 3.3, se propone que la Turbina 1 está a la salida del tanque de H_2 . Como el proceso es isoentrópico, la temperatura y la presión siguen una trayectoria como se muestra en la Ecuación A.1. Ahora se revisarán 2 alternativas: conocer la temperatura o la presión de salida de la turbina. Se comenzará por conocer la temperatura de salida.

Sabiendo que:

$T_3 = 196^\circ\text{C}$, $P_3 = 200$ bar y $\gamma_{H_2} = 1,4055$ [44].

Las condiciones objetivo son $P_4 = 1,4$ bar y $T_4 = 80^\circ\text{C}$.

Se dejará como variable a la T_4 . De este modo, reemplazando los valores en la Ecuación A.1, queda:

$$\frac{196 \text{ }^\circ\text{C}}{T_4} = \left(\frac{200 \text{ bar}}{1,4 \text{ bar}} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}}$$

$$T_4 = 196 \text{ }^\circ\text{C} \cdot \left(\left(\frac{200 \text{ bar}}{1,4 \text{ bar}} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} \right)^{-1} = 46,83 \text{ }^\circ\text{C}$$

Es decir, considerando que la presión de salida es 1,4 bar, el sistema sale más frío de lo que se necesita y por lo tanto habría que calentarlo antes de entrar a la celda. Si ahora, conociéramos

la temperatura de salida mas no la presión, se tiene:

$$\frac{196 \text{ °C}}{80 \text{ °C}} = \left(\frac{200 \text{ bar}}{P_4} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}}$$

$$P_4 = 200 \text{ bar} \cdot \left(\frac{196 \text{ °C}}{80 \text{ °C}} \right)^{\frac{1,4055}{1,4055-1}} = 8,95 \text{ bar}$$

Y en este caso, la presión es mayor a la que se necesita, pero se puede reducir utilizando una válvula. Esta configuración no requiere de energía adicional y parte de la energía del fluido fue aprovechada, por lo que se considera suficiente.

Por lo tanto a continuación de la Turbina 1, se pone la Válvula 1, la cual reduce la presión de la corriente de 8,95 bar a 1,4 bar, cumpliendo que la temperatura y la entalpía en dicho equipo se mantienen constantes.

El caso para la línea de O₂, es idéntico a lo descrito anteriormente. La corriente 12 de O₂ sale del Tanque 2 a una temperatura de 96°C y presión de 17 bar y debe llevarse a 80°C y 1,4 bar. Por lo tanto, se pone la Turbina 2 y la Válvula 2 a continuación del Tanque 2. Considerando que a la salida de la Turbina 2, la temperatura es de 80°C y que $\gamma_{O_2} = 1,39$ [44], la presión se calcula como:

$$\frac{96 \text{ °C}}{80 \text{ °C}} = \left(\frac{17 \text{ bar}}{P_{13}} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}}$$

$$P_{13} = 17 \text{ bar} \cdot \left(\left(\frac{96 \text{ °C}}{80 \text{ °C}} \right)^{\frac{1,39}{1,39-1}} \right)^{-1} = 8,1 \text{ bar}$$

Y como la presión es mayor a la necesaria, se pone la Válvula 2 a continuación de la Turbina 2, la cual reduce la presión de 8,1 bar a 1,4 bar, cumpliendo que la temperatura y en la entalpía en dicho equipo se mantienen constantes.

En virtud de lo anterior, el balance para las turbinas es como sigue:

Las Turbinas 1 y 2 ejercen trabajo sobre el exterior del sistema \dot{W}_{Tur} . Es decir, generan un trabajo de salida. Aplicando la Ecuación 3.150 para cada equipo y despejando, se obtiene:

$$\dot{W}_{Tur1} = n_{H_2}^3 \cdot h_{H_2}^3 - n_{H_2}^4 \cdot h_{H_2}^4$$

$$\dot{W}_{Tur2} = n_{O_2}^{14} \cdot h_{O_2}^{14} - n_{O_2}^{15} \cdot h_{O_2}^{15}$$

La Bomba 1 recibe potencia eléctrica \dot{W}_{B1} para impulsar el fluido. Aplicando la Ecuación 3.149 y despejando, queda:

$$\dot{W}_{B1} = n_{H_2O}^{11} \cdot h_{H_2O}^{11} - n_{H_2O}^{10} \cdot h_{H_2O}^{10}$$

En el Mezclador entran las corrientes 5 y 8 y sale la corriente 6. El equipo no transfiere energía con el exterior y asumiendo que la energía de mezclado es despreciable. Aplicando la

Ecuación 3.148 y despejando, se obtiene:

$$h_{H_2}^6 = \frac{n_{H_2}^5 \cdot h_{H_2}^5 + n_{H_2}^8 \cdot h_{H_2}^8}{n_{H_2}^6}$$

En el Separador de Fases se separan íntegramente las especies H_2 y H_2O entre sí y además, el equipo no transfiere energía con el exterior. Aplicando la Ecuación 3.148 pero adaptándola para el caso con una entrada y dos salidas de la misma especie, resulta:

$$h_{H_2O}^9 = \frac{n_{H_2}^7 \cdot h_{H_2}^7 + n_{H_2O}^7 \cdot h_{H_2O}^7 - n_{H_2}^8 \cdot h_{H_2}^8}{n_{H_2O}^9}$$

El Tanque 3, se absorbe calor \dot{Q}_{T3} para que el fluido a la salida de la bomba esté en la temperatura deseada. Usando la Ecuación 3.152 y despejando con las expresiones de la Tabla A.25, se obtiene:

$$\dot{Q}_{T3} = \frac{Q_{T3}}{t_{alm}} = n_{H_2}^1 (h_{H_2O}^{10} - h_{H_2O}^9)$$

En la Celda se absorbe calor externamente \dot{Q}_{FC} y se ejerce trabajo sobre el entorno \dot{W}_{FC} . Utilizando la Ecuación 3.154 y despejando, se obtiene:

$$\dot{Q}_{FC} = n_{H_2}^7 \cdot h_{H_2}^7 + n_{H_2O}^7 \cdot h_{H_2O}^7 + \dot{W}_{FC} - n_{O_2}^{16} \cdot h_{O_2}^{16} - n_{H_2}^6 \cdot h_{H_2}^6$$

En la Tabla A.26 se muestran los parámetros utilizados en el balance de energía.

Tabla A.26: Datos utilizados en los balances para el sistema de almacenamiento con celda de intercambio protónico

Parámetro	Magnitud	Unidades	Referencia
$j_{op,El}$	4.000	A m ⁻²	[52]
$j_{op,PEM}$	4,7	A m ⁻²	-
T_{El}	353	K	[52]
T_{PEM}	353	K	[49]
W_{El}	60.000.000	W	Caso Base
t_{alm}	36.900	s	[70]
t_{su}	61.200	s	[92]
x_f	0,8	-	Supuesto
γ_{H_2}	1,4055	-	[44]
γ_{O_2}	1,39	-	[44]
γ_{H_2O}	1,3255	-	[44]

El valor de $j_{op,PEM}$ fue obtenido a partir de las curvas de polarización mostradas en la Figura 5.2.

Los datos termodinámicos utilizados para realizar el balance se muestran en la Tabla A.27:

Tabla A.27: Datos termodinámicos de cada corriente en el sistema de PEM [44]

Corriente	Especie	Presión / bar	T / °C	h / kJ kmol ⁻¹
1	H ₂	9	80	10.060
2	H ₂	200	196	13.296
3	H ₂	200	196	13.296
4	H ₂	9	80	10.060
5	H ₂	1,4	80	10.060
6	H ₂	1,4		
7	H ₂	1,4	80	10.060
	H ₂ O	1,4	80	6.037
8	H ₂	1,4	80	10.060
9	H ₂ O	1,4	80	6.037
10	H ₂ O	1,4	84,6	6.379
11	H ₂ O	9	85	6.433
12	O ₂	9	80	10.302
13	O ₂	17	96	10.779
14	O ₂	17	96	10.779
15	O ₂	9	80	10.302
16	O ₂	1,4	80	10.302

Finalmente, se realiza un balance global de energía. Para ello se toma el sistema como una caja negra donde se contabilizan únicamente las entradas y salidas de energías de él, mas no así los intercambios que hayan ocurrido dentro del sistema como en los intercambiadores de calor. El balance es similar a como se muestra en la Ecuación 3.155 y 3.156, salvo que en este caso no se considera la potencia de condensadores, calentadores ni bomba 2. El balance es como sigue:

$$E = (\dot{W}_{El} + \dot{W}_{C1} + \dot{W}_{C2} + \dot{W}_{B1} + \dot{Q}_{T3}) \cdot t_{alm} + (\dot{Q}_{FC}) \cdot t_{su} \quad (A.8)$$

$$S = (\dot{Q}_{El}) \cdot t_{alm} + (\dot{W}_{FC} + \dot{W}_{Tur1} + \dot{W}_{Tur2}) \cdot t_{su} \quad (A.9)$$

A.3. Modelo matemático para el dimensionamiento de las baterías de ion litio

A.3.1. Baterías de ion-litio

En la Sección 1.3 se determinó que el consumo residencial en la región es de 40 MW. Es decir, el sistema debería tener una potencia de salida de dicha potencia al menos, para

abastecer a la región. Sin embargo, entran 60 MW a la planta de almacenamiento, por lo tanto ésa es la energía que se almacenará. Además, se sabe que el tiempo en el que entra dicha potencia es de 10,25 h [68]. Por lo tanto, la energía a almacenar es:

$$E_P = 615 \text{ MW-h}$$

Se toma como referencia un sistema de almacenamiento en Berlín, Alemania, que corresponde a una planta solar con una potencia $\dot{E}_P = 17 \text{ MW}$ y con una energía a almacenar de $E_P = 40 \text{ MW-h}$ [93]. Los datos de las baterías usadas dicha planta son como se muestra en la Tabla A.28:

Tabla A.28: Valores para el sistema de baterías que fueron utilizados en la planta solar de Berlín, Alemania [93].

Término	Magnitud	Unidades
N_{bateria}	12	-
V_{nominal}	24	V
V_{min}	20,4	V
V_{max}	27,6	V
E_{nominal}	14,4	kW

La capacidad de almacenamiento de las baterías escogidas para este estudio es de 300 A-h [66].

Conociendo la capacidad de almacenamiento del sistema a dimensionar, lo que se debe conocer es la capacidad real de almacenamiento del sistema, considerando la DOD. Se sabe que para aplicaciones de larga escala³, la profundidad de descarga más usada es de 80 % [59]. Por lo tanto la energía real a almacenar será de:

$$E_{P,real} = \frac{E_P}{\text{DOD}} = \frac{615 \text{ MW-h}}{0,8} = 768,75 \text{ MW-h}$$

Posteriormente, si se asume que se utilizará la misma tecnología que en Berlín, Alemania, el número de baterías queda como:

$$N_{bat} = \frac{E_{P,real}}{V_{nominal} D_{C,Chile}} = \frac{768,75 \text{ MW-h}}{24 \text{ V} \cdot 300 \text{ A-h}} = 106.771$$

Pero como las baterías deben ordenarse en conjuntos igualmente distribuidos, se tiene puede aumentar el número de equipos de tal manera que los conjuntos de baterías tengan la misma cantidad de elementos. De este modo, el número de baterías necesarias son:

$$N_{bat} = 106.880$$

³Del orden de MW de potencia

Por otro lado, el voltaje de la planta quedará como:

$$V_P = 24 \text{ V} \cdot 106.880 = 2.563.200 \text{ V}$$

Y la corriente de la planta será:

$$I_P = \frac{\dot{E}_{Planta}}{V_P} = \frac{60 \text{ MW}}{2.563.200 \text{ V}} = 23,41 \text{ A}$$

Como se mencionó anteriormente, se debe conocer el ordenamiento de las baterías. Por la forma que tiene el sistema, se pueden tener dos posibilidades:

1. 36 *strings*⁴ de 4.919 celdas en serie
2. 4919 *strings* de 36 celdas en serie

En el primer caso, se tendrían:

$$\begin{aligned} V_{carga,max} &= 4.919 \cdot 27,6v = 135.764 \text{ V} \\ V_{carga,min} &= 4.919 \cdot 20,4v = 100.348 \text{ V} \end{aligned}$$

En el segundo caso, se tendrían:

$$\begin{aligned} V_{carga,max} &= 36 \cdot 27,6V = 994 \text{ V} \\ V_{carga,min} &= 36 \cdot 20,4V = 734 \text{ V} \end{aligned}$$

De este modo se elige la segunda configuración pues es la que genera menor tensión en el sistema.

A.4. Modelo matemático para deducir la $ESOI_{el}$ en un RHFC

A.4.1. $ESOI_{el}$ para RHFC

En la Tabla A.29 se muestra un resumen de qué equipos se considerarán por cada sistema, para el cálculo del $ESOI_{el}$.

⁴Del inglés. Significa *cadena*

Tabla A.29: Resumen de términos que se ocupan en la ecuación del ESOIel para cada sistema involucrado en el estudio

Sistema	Energía de Salida	Energía Entrada		
		Conjunto de equipos	Equipo	
SO+R	Turbina	Equipos auxiliares	Compresor 1	
	Celda SO		Compresor 2	
			Bomba 1	
			Bomba 2	
			Calentador 1	
			Calentador 2	
			Turbina 1	
			Celda SO	
			Equipos electroquímicos	Electrolizador
	Almacenamiento	Almacenamiento H ₂		
SO+Int	Celda SO	Equipos auxiliares	Compresor 1	
			Compresor 2	
			Bomba 1	
			Calentador 1	
			Calentador 2	
			Celda SO	
	Equipos electroquímicos	Electrolizador		
	Almacenamiento	Almacenamiento H ₂		
PEM	Celda PEM	Equipos auxiliares	Compresor 1	
	Turbina 1		Compresor 2	
	Turbina 2		Bomba 1	
			Turbina 1	
			Turbina 2	
			Celda PEM	
			Equipos electroquímicos	Electrolizador
			Almacenamiento	Almacenamiento H ₂

A.4.1.1. Estimaciones e investigación de valores

Algunos de los valores fueron encontrados en el estudio de M. Pellow *et al.* (Energy & Environ. Sci., 2015). Estos valores se resumen en la Tabla A.30 :

Tabla A.30: Valores para el cálculo de $ESOI_{el}$ que fueron encontrados en el estudio de M. Pellow *et al.* (Energy & Environ. Sci., 2015) [6].

Equipo	Símbolo	Significado	Magnitud	Unidades	Equivalencia
Sistema	η_{red}	Eficiencia eléctrica de la red	0,3	-	
Electrolizador	$\zeta_{elec,stack}$	Intensidad energética del stack del electrolizador	$4,1 \times 10^6$	MJ (MW) ⁻¹	
	$\zeta_{elec,BOS}$	Intensidad energética del BOS asociado al electrolizador	$3,3 \times 10^5$	MJ (MW) ⁻¹	
	$\tau_{elec,stack}$	Vida útil del stack de electrolizador	$3,6 \times 10^8$	s	10 ⁵ h
Compresor	$\zeta_{compresor}$	Intensidad energética del compresor	$6,5 \times 10^4$	MJ (MW) ⁻¹	
Almacenamiento de H ₂	ε_{H_2}	Intensidad energética del almacenamiento de H ₂	8	MJ (MJ) ⁻¹	2.900 (MJ) (MW-h) ⁻¹
Celda SO	$\tau_{SO,stack}$	Vida útil del stack de la celda SO	$3,6 \times 10^7$	s	10 ⁴ h
	$\zeta_{elec,stack}$	Intensidad energética del stack de la celda SO	$1,7 \times 10^5$	MJ (MW) ⁻¹	
	$\zeta_{elec,BOS}$	Intensidad energética del BOS asociado a la celda SO	$1,7 \times 10^5$	MJ (MW) ⁻¹	

Algunos de los datos mostrados en la Tabla A.30 se utilizarán en los 3 sistemas en estudio.

La intensidad energética del resto de equipos involucrados es compleja de encontrar como dato en la bibliografía. Por lo tanto, se propone una forma de estimar dicho valor, con la fórmula mostrada a continuación:

Utilizando la Ecuación 4.4 para la estimación de la intensidad energética de un equipo. Esta estimación consiste en la suma ponderada entre la intensidad energética de los materiales con los que se construye un equipo con la masa de cada material.

De esta manera se puede estimar la intensidad energética de los siguientes equipos:

Bombas

Para el caso de las bombas, se encontró que la bomba indicada según las características del sistema, es una bomba [94] modelo 3196 i-Frame 1x2-10. Según el catálogo de selección de bombas, la bomba está hecha completamente de acero inoxidable [94] y tiene una masa de 100 kg [95].

Por lo tanto, solo queda conocer la Potencia de la bomba. Para estimarla se utilizará la siguiente expresión [96]:

$$P = \frac{\rho \cdot g \cdot Q \cdot H}{\eta} \quad (\text{A.10})$$

Donde:

ρ [kg m⁻³]: Densidad del fluido impulsado por la bomba. $\rho = 959$ kg m⁻³ [97]

g [m s⁻²]: Aceleración de gravedad. $g = 9,8$ m s⁻² [44]

H [m]: Altura de elevación máxima de la bomba. $H = 282$ [95]

Q [m³ h⁻¹]: Caudal máximo de la bomba. $Q = 50$ m³ h⁻¹ [95]

η [-]: Eficiencia de la bomba. $\eta = 0,7$ [95]

Con los datos anteriores, se obtiene que la potencia de la bomba en cuestión es de aproximadamente 52,6 kW. Tomando este cálculo y sabiendo que $\zeta_{acero} = 40$ (MJ)_{prim} kg⁻¹ [6], se obtiene que la intensidad energética de la bomba es::

$$\zeta_{bomba} = \frac{40 \text{ (MJ)}_{prim} \text{ kg}^{-1} \cdot 100 \text{ kg} \cdot \frac{1.000 \text{ (kW)}_{el}}{1 \text{ (MW)}_{el}}}{52,6 \text{ (kW)}_{el}}$$

Considerando la eficiencia de la red, queda:

$$\begin{aligned} (\zeta_{bomba})_{el} &= 76.923,1 \text{ (MJ)}_{prim} \text{ (MW)}_{el}^{-1} \cdot 0,3 \text{ (MJ)}_{el} \text{ (MJ)}_{prim} \\ (\zeta_{bomba})_{el} &= 22.813,7 \text{ (MJ)}_{el} \text{ (MW)}_{el}^{-1} \end{aligned}$$

Turbinas

Las turbinas están compuestas principalmente de níquel y acero inoxidable [98], pero como no se especifica la composición se supondrá que estos materiales están por partes iguales en el equipo. Luego, las turbinas tienen una masa de 7,863 kg y una potencia máxima de 52 MW [99]. Considerando que la intensidad energética del níquel es 110 (MJ)_{prim} kg⁻¹ [100], el valor para el acero mencionado previamente, la Ecuación 4.4 y la eficiencia de la red, se obtiene:

$$(\zeta_{turbina})_{el} = 3,39 \text{ (MJ)}_{el} \text{ (MW)}_{el}^{-1}$$

Calentadores

Los calentadores están hechos completamente de acero inoxidable, tienen una masa de aproximadamente 200 kg y una potencia de 15 kW [101]. Considerando la intensidad energética del acero, la eficiencia de la red y la Ecuación 4.4, se obtiene:

$$(\zeta_{calentador})_{el} = 160.000 \text{ (MJ)}_{el} \text{ (MW)}_{el}^{-1}$$

Almacenamiento de H₂

La $ESOI_{el}$ del almacenamiento se calcula como el producto de $S\varepsilon$. El término ε corresponde a la intensidad energética del almacenamiento. Ésta tiene un valor de $8 \text{ (MJ)}_{el} \text{ (MJ)}_{el}^{-1}$ [6]. Se debe determinar la capacidad de almacenamiento S . Esta capacidad se va a calcular como:

$$S = M_{H_2} \cdot PCI_{H_2} \quad (\text{A.11})$$

Donde:

M_{H_2} [kg]: Masa total de H₂ almacenada en un ciclo de almacenamiento

PCI_{H_2} [MJ kg⁻¹]: Poder Calorífico Inferior del H₂. $PCI_{H_2} = 120 \text{ MJ kg}^{-1}$ [102]

A su vez, la masa total de H₂ se calcula como el flujo de salida del electrolizador por el tiempo de almacenamiento. Este cálculo es válido para todos los sistemas, puesto que la potencia y la densidad de corriente del electrolizador es la misma para los 3 sistemas. Por tanto, la masa total del H₂ es:

$$M_{H_2} = n_{H_2}^1 \cdot t_{alm} \cdot PM_{H_2}$$

Reemplazando valores, queda:

$$\begin{aligned} M_{H_2} &= 56,6 \frac{\text{mol}}{\text{s}} \cdot 10,25 \text{ h} \cdot \frac{3.600 \text{ s}}{1 \text{ h}} \cdot 2,02 \frac{\text{kg}}{\text{kmol}} \cdot \frac{1 \text{ kmol}}{1.000 \text{ mol}} \\ M_{H_2} &= 4.218,85 \text{ kg} \end{aligned}$$

Finalmente, la capacidad de almacenamiento de H₂ es:

$$S = 4.218,85 \text{ kg} \cdot 120 \frac{\text{MJ}}{\text{kg}} = 506.262,1 \text{ MJ}$$

Celdas SO

Para las celdas de óxido sólido, se hizo la revisión de un estudio comandado por el *Imperial College of Science, Technology and Medicine* de Londres en el año 2000. En este estudio se realizó un LCA a la manufactura y desecho de celdas de óxido sólido planas y tubulares. En el estudio se encontró que la intensidad energética del stack y del BOS de una celda de óxido sólido plana son [103]:

$$\begin{aligned} \zeta_{SO,stack} &= 3.791.750 \text{ (MJ)}_{prim} \text{ (MW)}_{el}^{-1} \\ \zeta_{SO,BOS} &= 2.071.370 \text{ (MJ)}_{prim} \text{ (MW)}_{el}^{-1} \end{aligned}$$

Considerando la eficiencia de la red, queda:

$$\begin{aligned} (\zeta_{SO,stack})_{el} &= 1.137.525 \text{ (MJ)}_{el} \text{ (MW)}_{el}^{-1} \\ (\zeta_{SO,BOS})_{el} &= 621.411 \text{ (MJ)}_{el} \text{ (MW)}_{el}^{-1} \end{aligned}$$

Por otro lado, en el estudio de U. Stimming y H. Tu (*J. Power Sources*, 2004) se determinó que el tiempo de vida útil del stack de celdas de óxido sólido es de 40.000 h [72].

A.4.1.2. Valores provenientes de los balances

Algunos de los valores necesarios para el cálculo del $ESOI_{el}$ son operacionales, como las potencias y el tiempo de operación. Estos valores se obtienen del balance de masa y energía y del diseño del proceso. Como las potencias de los equipos se utilizarán de manera directa, solo queda determinar el tiempo acumulado de funcionamiento de los equipos electroquímicos.

Considerando que el tiempo de entrada al sistema t_{alm} es de 10,25 h y que el estudio se hace para un horizonte de evaluación de 20 años, el tiempo total de funcionamiento del electrolizador es:

$$\dot{T}_{Electrolizador} = 269.370.000 \text{ s}$$

Para el caso de las celdas de combustible, ya sea PEM o SO, el tiempo de salida del sistema es de 17 h y el horizonte de evaluación es de 20 años. Por tanto, el tiempo total de funcionamiento de las celdas es:

$$\dot{T}_{celdas} = 44.6760.000 \text{ s}$$

En el caso de los sistemas SO+R y PEM, se opera con turbinas las cuales están ubicadas posterior a los tanques de almacenamiento. Es decir, las turbinas funcionan el mismo tiempo que las celdas. Por lo tanto, el tiempo total de funcionamiento para las celdas es el mismo que para las turbinas $\dot{T}_{celdas} = \dot{T}_{turbinas}$.

Finalmente, en la Tabla A.31 se resumen todos los valores que se utilizarán para el cálculo del $ESOI_{el}$. En esta tabla se incluyen los valores de las potencias de ciertos equipos que son extraídos del balance de masa y energía, para cada sistema.

Tabla A.31: Resumen de los datos que se utilizarán para el cálculo de la $ESOI_{el}$ en cada sistema. Los datos operacionales se obtuvieron del balance de masa y energía descrito en el Anexo A.2.3. Los valores de intensidad energéticos mostrados están para energía eléctrica, es decir, ya fueron calculados utilizando la eficiencia de la red $\eta_{red} = 0,3$

Sistema	Parámetro	Magnitud	Unidades	Referencia
SO+R, SO+Int	\dot{T}_{SO}	446.760.000	s	Supuesto
PEM	\dot{T}_{PEM}	446.760.000	s	Supuesto
Todos	\dot{T}_{Elec}	269.370.000	s	Supuesto
SO+R, PEM	$\dot{T}_{Turbinas}$	446.760.000	s	Supuesto
SO+R, SO+Int	$\tau_{SO,stack}$	144.000.000	s	Supuesto
PEM	$\tau_{PEM,stack}$	36.000.000	s	[6]
Todos	$\tau_{Elec,stack}$	360.000.000	s	[6]
Todos	$\zeta_{Elec,stack}$	410.000	MJ MW ⁻¹	[6]
Todos	$\zeta_{Elec,BOS}$	330.000	MJ MW ⁻¹	[6]
PEM	$\zeta_{PEM,stack}$	170.000	MJ MW ⁻¹	[6]
PEM	$\zeta_{PEM,BOS}$	170.000	MJ MW ⁻¹	[6]
SO+R, SO+Int	$\zeta_{SO,stack}$	3.791.750	MJ MW ⁻¹	[103]

Tabla A.31: Resumen de los datos que se utilizarán para el cálculo de la $ESOI_{el}$ en cada sistema. Los datos operacionales se obtuvieron del balance de masa y energía descrito en el Anexo A.2.3. Los valores de intensidad energéticos mostrados están para energía eléctrica, es decir, ya fueron calculados utilizando la eficiencia de la red $\eta_{red} = 0,3$

Sistema	Parámetro	Magnitud	Unidades	Referencia
SO+R, SO+Int	$\zeta_{SO,BOS}$	2.071.370	MJ MW ⁻¹	[103]
Todos	$\zeta_{compresor}$	65.000	MJ MW ⁻¹	[6]
Todos	$\zeta_{turbina}$	3,39	MJ MW ⁻¹	[99]
Todos	ζ_{bomba}	22.814	MJ MW ⁻¹	[94]
Todos	$\zeta_{calentador}$	160.000	MJ MW ⁻¹	[101]
Todos	S_{H_2}	506.262	MJ	Balance
Todos	ε_{H_2}	8	MJ MJ ⁻¹	[6]
SO+R, SO+Int	P_{SO}	2.857.515	W	Balance
PEM	P_{PEM}	3.518.563	W	Balance
Todos	P_{Elec}	60.000.000	W	Caso Base
SO+R	$P_{Turbina1}$	294.652	W	Balance
SO+R	$P_{Compresor1}$	183.173	W	Balance
SO+R	$P_{Compresor2}$	13.495	W	Balance
SO+R	P_{Bomba1}	3.060	W	Balance
SO+R	P_{Bomba2}	1.956	W	Balance
SO+R	$P_{Calentador1}$	793.707	W	Balance
SO+R	$P_{Calentador2}$	395.360	W	Balance
SO+Int	$P_{Compresor1}$	183.173	W	Balance
SO+Int	$P_{Compresor2}$	13.493	W	Balance
SO+Int	P_{Bomba1}	3.060	W	Balance
SO+Int	$P_{Calentador1}$	74.233	W	Balance
SO+Int	$P_{Calentador2}$	267.866	W	Balance
PEM	$P_{Compresor1}$	183.173	W	Balance
PEM	$P_{Compresor2}$	13.493	W	Balance
PEM	P_{Bomba1}	3.060	W	Balance
PEM	$P_{Turbina1}$	110.412	W	Balance
PEM	$P_{Turbina2}$	8.134	W	Balance

A.5. Costos de Inversión CAPEX

En la Tabla A.32 se muestran los datos del indicador de ajuste temporal desde los años 1996 hasta 2019, para hacer la actualización temporal de las cotizaciones.

Tabla A.32: Valores del indicador de ajuste temporal desde los años 1996 al 2019.

Año	IT / -	Referencia
1996	381,7	[104]
1997	386,5	[104]
1998	389,5	[104]
1999	390,6	[104]
2000	394,1	[104]
2001	394,3	[104]
2002	395,6	[104]
2003	402	[104]
2004	444,2	[104]
2005	468,2	[104]
2006	499,6	[104]
2007	525,4	[104]
2008	575,4	[104]
2009	521,9	[104]
2010	550,8	[104]
2011	585,7	[104]
2012	584,6	[104]
2013	567,1	[104]
2014	576,1	[104]
2015	556,8	[104]
2016	541,7	[105]
2017	567,5	[105]
2018	603,1	[105]
2019	632	[106]

En la Tabla A.33 se muestran algunos exponentes específicos para algunos equipos.

Tabla A.33: Exponentes específicos para algunos equipos, utilizados en la estimación del precio por capacidad, usando la regla de los seis décimos [64].

Equipo	Exponente
Compresores	0,79
Bomba	0,34
Resto	0,6

En la Tabla A.34 se muestran las cotizaciones realizadas para los principales equipos del sistema. Se menciona que los equipos como los estanques, no son considerados en esta evaluación para centrarla en los equipos electroquímicos y auxiliares⁵.

En la Tabla A.35 se muestran los precios ajustados a la capacidad que se requiere en el sistema, para cada sistema, utilizando la regla de los seis décimos.

⁵Por recomendación de la Dra. Melanie Colet Lagrille

Tabla A.34: Cotizaciones de los principales equipos correspondientes a los equipos utilizados en los sistemas en estudio. La capacidad mencionada en esta tabla, hace referencia a la capacidad del equipo encontrado en la cotización, capacidad que será utilizada para la Regla de los Seis Décimos. Los precios mostrados corresponden al valor FOB.

Equipo	Capacidad	Unidades	Precio	Unidades	Año	Referencia
Celda SO	-	-	1.887,4	USD kW ⁻¹	2014	[85]
Celda PEM	-	-	10,1	USD W ⁻¹	2020	[84]
Electrolizador Alcalino	-	-	1.200	EUR kW ⁻¹	2017	[107]
Turbina de vapor	10	kW	24.180	USD	2020	[108]
Turbina de vapor 2	150	kW	6.666	USD	2020	[109]
Compresor de aire	200	kW	20.000	USD	2020	[110]
Compresor O ₂	20	kW	10.000	USD	2020	[111]
Bomba	5	kW	3.500	USD	2020	[112]
Calentador	800	kW	7.233	USD	2020	[113]
Calentador 2	400	kW	10.000	USD	2020	[114]
Condensador	400	kW	1.475	USD	2020	[115]
Baterías ion litio	24	V	1.685	USD	2020	[66]
Chiller	50	kW	16.666	USD	2020	[116]

Tabla A.35: Precios de los equipos más importantes para cada sistema, considerando un ajuste de precio con respecto a la capacidad, utilizando la regla de los seis décimos. Todos los valores mostrados son FOB y corresponden a valores del 2020 excepto en el caso del Electrolizador alcalino y la celda SO.

Sistema	Equipo	Precio	Moneda
SO+R	Electrolizador alcalino	\$72.000.000	EUR
SO+R	Bomba 1	\$2.962	USD
SO+R	Compresor 1	\$18.660	USD
SO+R	Compresor 2	\$7.329	USD
SO+R	Tanque 3 (Chiller)	\$19.469	USD
SO+R	Condensador 1	\$3.075	USD
SO+R	Calentador 1	\$7.199	USD
SO+R	Calentador 2	\$9.931	USD
SO+R	Bomba 2	\$2.564	USD
SO+R	Turbina 1	\$171.693	USD
SO+R	Condensador 2	\$2.331	USD
SO+R	Celda SO	\$6.961.554	USD
SO+Int	Electrolizador alcalino	\$72.000.000	EUR
SO+Int	Bomba 1	\$2.962	USD
SO+Int	Compresor 1	\$18.660	USD
SO+Int	Compresor 2	\$7.328	USD
SO+Int	Tanque 3 (Chiller)	\$19.469	USD
SO+Int	Condensador 1	\$3.075	USD
SO+Int	Disipador de calor	\$46.010	USD
SO+Int	Calentador 1	\$3.646	USD

SO+Int	Calentador 2	\$3.751	USD
SO+Int	Celda SO	\$6.961.554	USD
PEM	Electrolizador alcalino	\$72.000.000	EUR
PEM	Bomba 1	\$2.962	USD
PEM	Compresor 1	\$18.658	USD
PEM	Compresor 2	\$7.328	USD
PEM	Turbina 1	\$5.547	USD
PEM	Turbina 2	\$21.362	USD
PEM	Celda PEM	\$35.620.363	USD
Baterías	Baterías	\$179.958.000	USD

En la Tabla A.36 se muestran los precios de los equipos considerando el costo adicional que implica transportarlos desde su lugar de fabricación y el impuesto por importación.

Tabla A.36: Precios de los equipos considerando los valores de transporte, importación e impuestos. Los precios son con fecha del 2020 excepto para el electrolizador alcalino y la celda SO.

Sistema	Equipo	Precio	Moneda
SO+R	Electrolizador alcalino	\$86.400.000	EUR
SO+R	Bomba 1	\$3.554	USD
SO+R	Compresor 1	\$22.392	USD
SO+R	Compresor 2	\$8.795	USD
SO+R	Tanque 3 (Chiller)	\$23.363	USD
SO+R	Condensador 1	\$3.690	USD
SO+R	Calentador 1	\$8.639	USD
SO+R	Calentador 2	\$11.917	USD
SO+R	Bomba 2	\$3.077	USD
SO+R	Turbina 1	\$206.032	USD
SO+R	Condensador 2	\$2.797	USD
SO+R	Celda SO	\$8.353.865	USD
SO+Int	Electrolizador alcalino	\$86.400.000	EUR
SO+Int	Bomba 1	\$3.554	USD
SO+Int	Compresor 1	\$22.392	USD
SO+Int	Compresor 2	\$8.794	USD
SO+Int	Tanque 3 (Chiller)	\$23.363	USD
SO+Int	Condensador 1	\$3.690	USD
SO+Int	Disipador de calor	\$55.212	USD
SO+Int	Calentador 1	\$4.375	USD
SO+Int	Calentador 2	\$4.501	USD
SO+Int	Celda SO	\$8.353.865	USD
PEM	Electrolizador alcalino	\$86.400.000	EUR
PEM	Bomba 1	\$3.554	USD
PEM	Compresor 1	\$22.390	USD
PEM	Compresor 2	\$8.794	USD

PEM	Turbina 1	\$6.656	USD
PEM	Turbina 2	\$25.634	USD
PEM	Celda PEM	\$42.744.436	USD
Baterías	Baterías	\$215.949.600	USD

En la Tabla A.37 se muestra la actualización a la fecha diciembre 2019, para los equipos celda SO y electrolizador alcalino. El resto de equipos, mantienen sus valores mostrados en la Tabla A.36.

Tabla A.37: Valores actualizados con fecha Diciembre de 2019. El resto de equipos, mantienen sus valores, como se muestra en la Tabla A.36

Sistema	Equipo	Precio	Moneda
SO+R; SO+Int; PEM	Electrolizador alcalino	96.219.912	EUR
SO+R; SO+Int	Celda SO	9.164.455	USD

En la Tabla A.38 se muestran los valores más importantes de cada sistemas, transformados a moneda nacional, con valores del dólar estadounidense y euro para la fecha 20 de enero de 2020.

Tabla A.38: Precios de los equipos más importantes de cada sistema convertidos a moneda nacionalm utilización la transformación 1 USD = 774,8 CLP [117] y 1 EUR = 859,7 CLP [118] con fecha 20 de enero de 2020.

Sistema	Equipo	Precio / CLP
SO+R	Electrolizador alcalino	\$82.720.258.256
SO+R	Bomba 1	\$2.753.949
SO+R	Compresor 1	\$17.349.322
SO+R	Compresor 2	\$6.814.211
SO+R	Tanque 3 (Chiller)	\$18.101.497
SO+R	Condensador 1	\$2.859.012
SO+R	Calentador 1	\$6.693.342
SO+R	Calentador 2	\$9.233.447
SO+R	Bomba 2	\$2.383.905
SO+R	Turbina 1	\$159.633.284
SO+R	Condensador 2	\$2.167.271
SO+R	Celda SO	\$7.100.619.772
SO+Int	Electrolizador alcalino	\$82.720.258.256
SO+Int	Bomba 1	\$2.753.949
SO+Int	Compresor 1	\$17.349.322
SO+Int	Compresor 2	\$6.813.281
SO+Int	Tanque 3 (Chiller)	\$18.101.497
SO+Int	Condensador 1	\$2.859.012
SO+Int	Disipador de calor	\$42.778.258

SO+Int	Calentador 1	\$3.389.905
SO+Int	Calentador 2	\$3.487.530
SO+Int	Celda SO	\$7.100.619.772
PEM	Electrolizador alcalino	\$82.720.258.256
PEM	Bomba 1	\$2.753.949
PEM	Compresor 1	\$17.347.462
PEM	Compresor 2	\$6.813.281
PEM	Turbina 1	\$5.157.379
PEM	Turbina 2	\$19.861.533
PEM	Celda PEM	\$33.118.388.703
Baterías	Baterías	\$167.317.750.080

En la Tabla A.39 se muestra un desglose de los ítems asociados al CAPEX y el porcentaje que representan de él.

Tabla A.39: Estructura de costos y porcentajes para la estimación del CAPEX [64].

Ítem	β
Costos Directos	
Equipos	15-40
Instalación de Equipos	6-14
Instrumentación y Control	2-8
Piping	3-20
Instalación Eléctrica	2-10
Construcciones	3-18
Mejoras de Terreno	2-5
Instalaciones de Servicios	8-20
Terreno	1-2
Costos Indirectos	
Ingeniería y Supervisión	4-21
Gastos de Construcción	4-16
Honorarios de Contratista	2-6
Contingencia	5-15