

Modelado matemático computacional de un almacenador de hidruro metálico para movilidad eléctrica.

G. Tejera¹, R. Bonillo, E. Teliz¹, V. Díaz¹

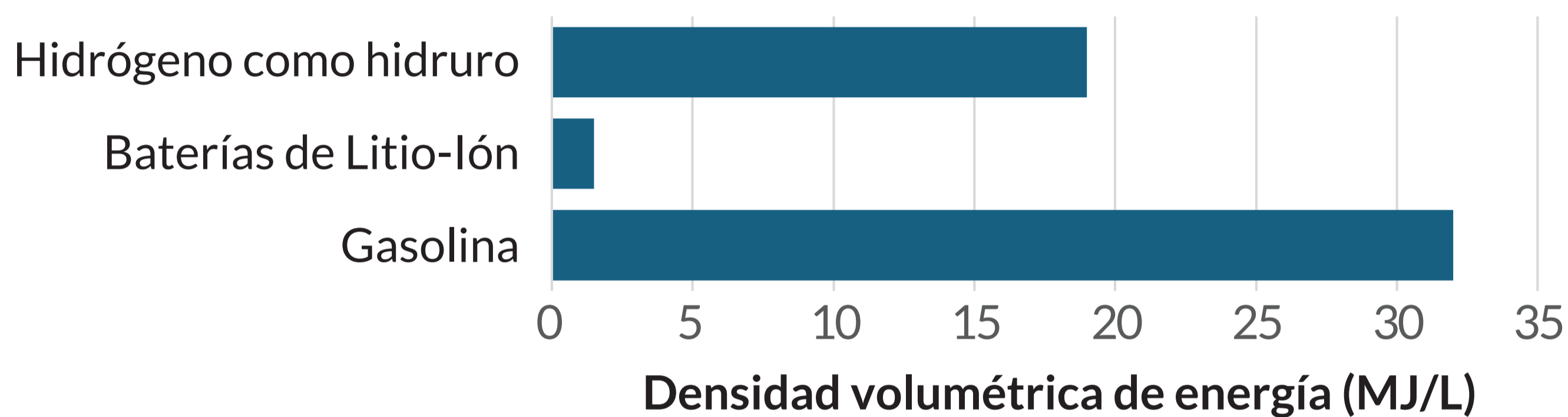
¹ Instituto de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería, UdelaR, Julio Herrera y Reissig 565-Montevideo 11300, Uruguay.

Introducción

La **electrificación** de la producción y el transporte exige **sustituir** progresivamente los **combustibles fósiles** por vectores **energéticos sostenibles**.



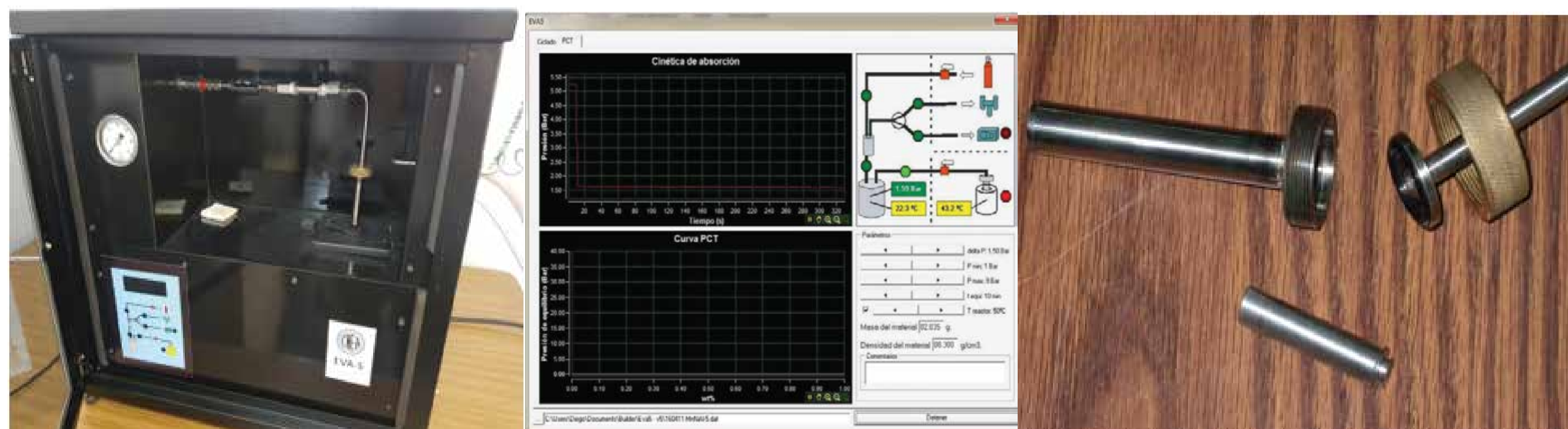
El mayor reto es el **almacenamiento**, sobre todo en **aplicaciones móviles**, donde la **densidad energética** es crítica y pocas tecnologías igualan a los combustibles tradicionales. Las **celdas de combustible** son una opción prometedora si cuentan con sistemas de almacenamiento que aseguren un suministro eficiente.



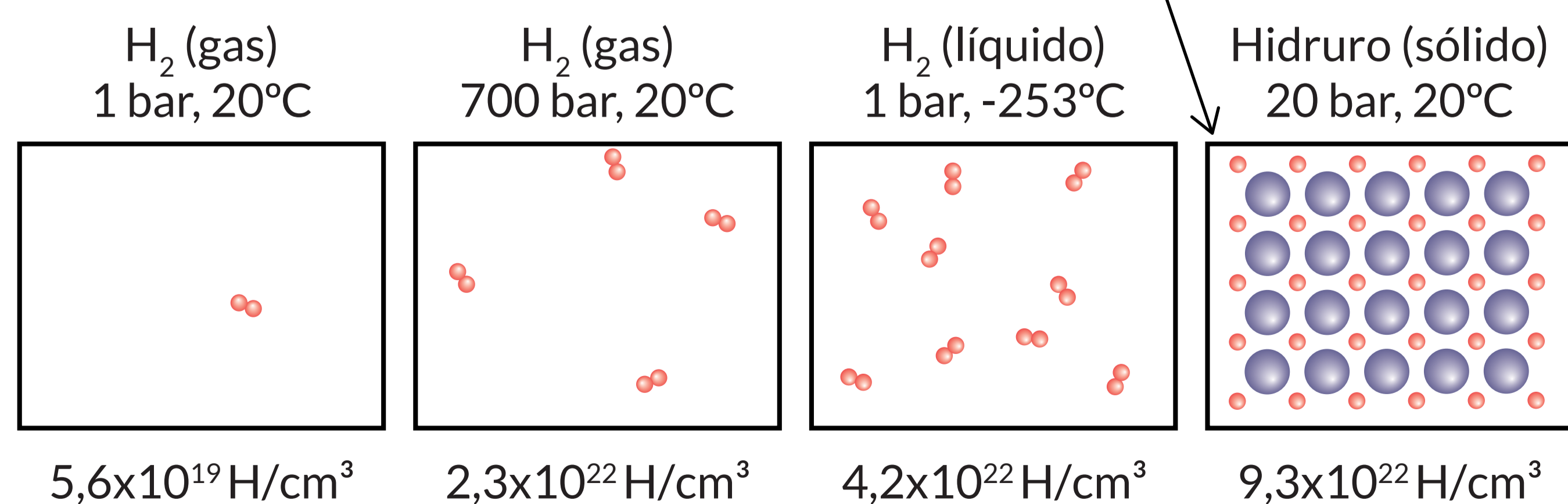
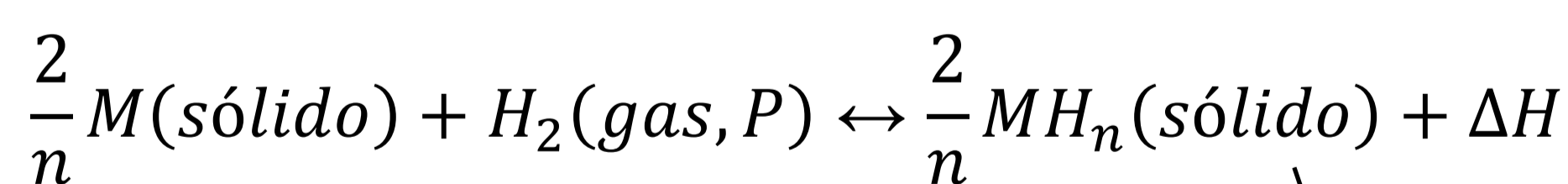
Este trabajo desarrolla un **modelo matemático** para simular sistemas de almacenamiento de hidrógeno en **hidruros metálicos**, sobre el cual se puedan realizar análisis de sensibilidad y optimización de parámetros.

Metodología

Basado en trabajos previos del grupo (Li et al., 2021), se desarrolló un modelo computacional para analizar un sistema de almacenamiento de hidrógeno con geometría cilíndrica anular, refrigerado internamente por agua. El modelo adapta resultados experimentales (obtenidos con un equipo volumétrico tipo Sieverts) y teóricos (resultados analíticos con simplificaciones) existentes a un enfoque numérico.



La reacción estudiada es la hidruración de materiales sólidos expuestos a hidrógeno gaseoso, donde el gas se absorbe en la fase sólida formando un hidruro metálico que posee una densidad de hidrógeno mayor que otras técnicas de almacenamiento (Bloch & Mintz, 1997).



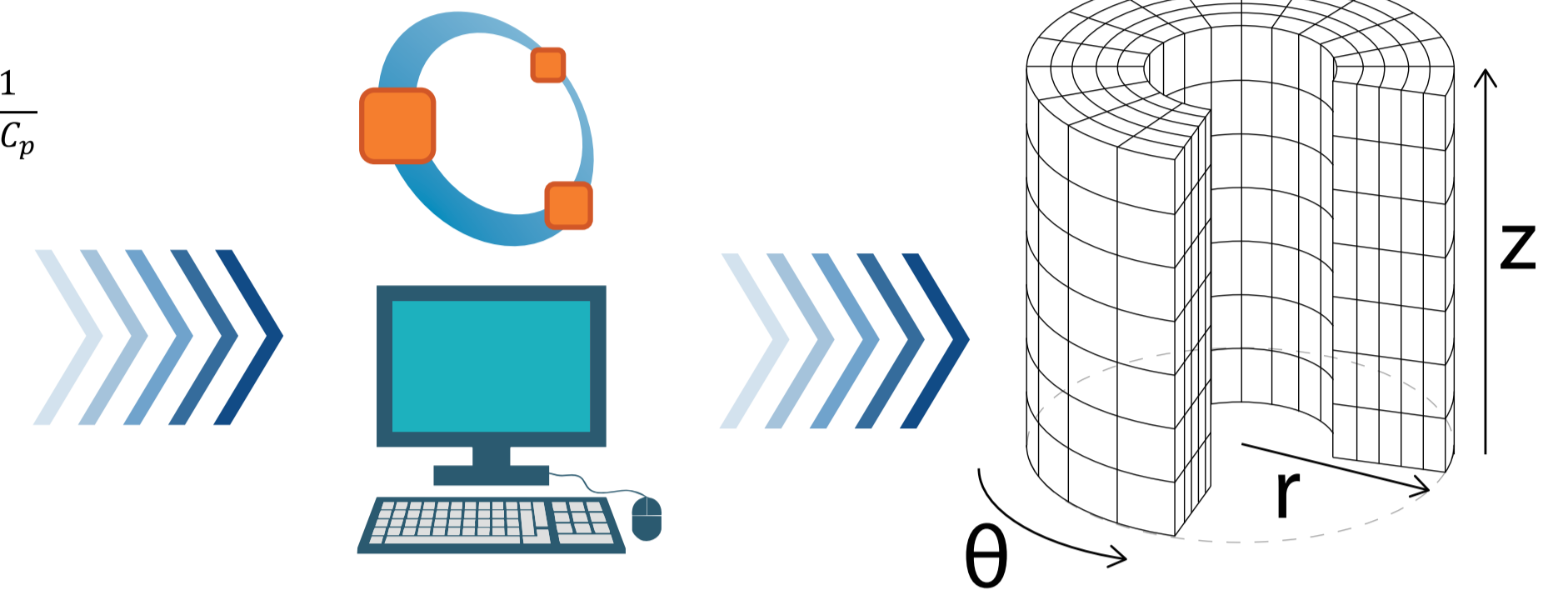
El modelo se centra en la absorción de hidrógeno presurizado, describiendo la transformación del metal base en su aleación hidrurada mediante la ecuación de Avrami, y representando la transferencia de calor con la ecuación de Fourier y la ley de enfriamiento de Newton.

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \left[k \left(\frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + E_g + E_s \right] \frac{1}{\rho C_p}$$

$$P_{eq} = \exp\left(\frac{\Delta H}{RT} - \frac{\Delta S}{R}\right)$$

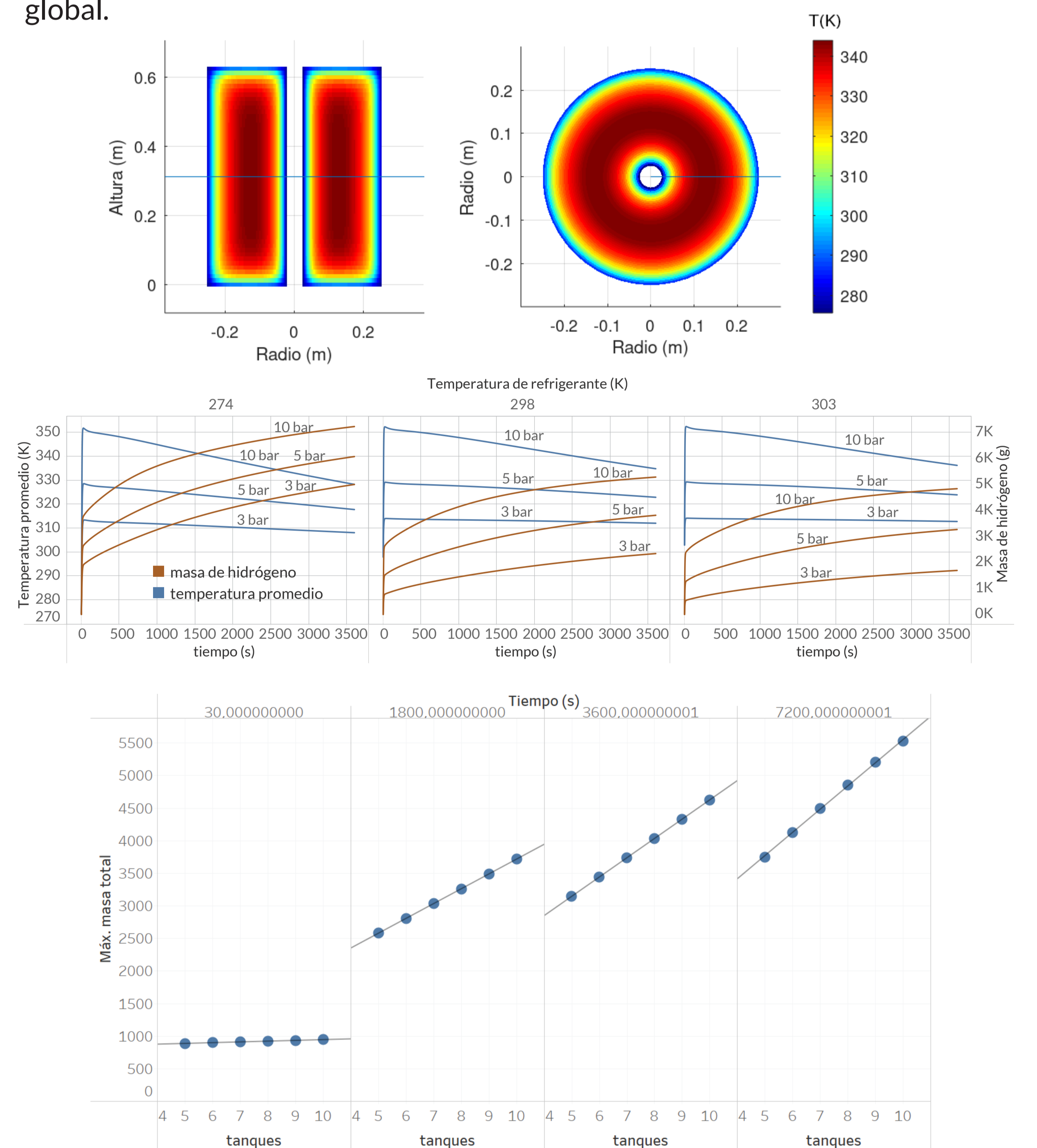
$$\xi = 1 - e^{-kt^n} \quad \ln(P) = \frac{\Delta H}{R} * \frac{1}{T} - \frac{\Delta S}{R}$$

$$\ln(-\ln(1-\xi)) = n \ln t + \ln k$$



Resultados

El modelo desarrollado permite analizar los perfiles de temperatura y la distribución de hidrógeno en el sistema así como también evaluar el impacto de distintos parámetros operativos como la temperatura del refrigerante, la presión de suministro, el número de tanques y otros sobre el desempeño global.



Conclusiones

El carácter exotérmico de la hidruración eleva rápidamente la temperatura al inicio del almacenamiento, desplazando el equilibrio y reduciendo la cantidad de hidrógeno absorbido. Esto prolonga el tiempo necesario para alcanzar la capacidad total. Un aumento de la presión de suministro y/o una menor temperatura del refrigerante permiten almacenar más hidrógeno. A su vez, se observa que, a volumen total constante, aumentar el número de tanques mejora la eficiencia de almacenamiento y por lo tanto también incrementa la autonomía del vehículo para una misma duración de carga. Estos resultados resaltan la importancia de estudiar la optimización del proceso de hidruración.

Agradecimientos

Los autores agradecen a ANII, Csic y Pedeciba. Verónica Díaz y Erika Teliz son investigadoras Pedeciba.