



VIII ENCUESTRO REGIONAL DE INGENIERÍA QUÍMICA

MODELADO MATEMÁTICO COMPUTACIONAL DE UN ALMACENADOR DE HIDRURO METALICO PARA MOVILIDAD ELÉCTRICA

Tejera, Gonzalo^{1*}; Bonillo, Ramón; Teliz, Erika^{1*}; Díaz, Verónica^{1*}.

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

*gonzalot@fing.edu.uy - erikateliz@gmail.com - verodiaz@fing.edu.uy

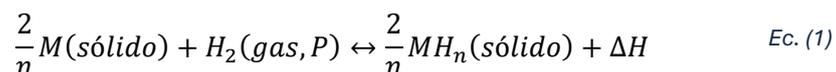
Introducción

En el contexto de la transición energética, la electrificación de los sistemas productivos y de transporte implica un abandono progresivo de los combustibles fósiles en favor de vectores energéticos más sostenibles. Entre los principales desafíos a superar se encuentra el almacenamiento eficiente de energía, especialmente en aplicaciones móviles, donde la densidad energética juega un papel clave. Aunque existen diversas tecnologías de almacenamiento, pocas igualan la densidad energética de los combustibles tradicionales. En este sentido, las celdas de combustible surgen como una alternativa prometedora, siempre que cuenten con sistemas de almacenamiento adecuados que garanticen un suministro eficiente del combustible. Este trabajo tiene como objetivo desarrollar un modelo matemático que permita simular distintos sistemas de almacenamiento de hidrógeno basado en hidruros metálicos para su posterior uso en análisis de sensibilidad y optimización de parámetros.

Materiales y Métodos

A partir de trabajos previos realizados por el grupo de investigación (Li et al., 2021), se desarrolló un modelo computacional para analizar el comportamiento de un almacenador de hidrógeno de geometría cilíndrica anular, refrigerado internamente mediante un flujo de agua. Este modelo se basa en los hallazgos experimentales y teóricos disponibles, adaptándolos a un enfoque numérico.

La reacción estudiada es la hidruración de ciertos materiales sólidos al exponerse a hidrógeno gaseoso. En este proceso, el hidrógeno es absorbido desde la fase gaseosa hacia la fase sólida, disolviéndose en el material y formando un compuesto mixto (Bloch & Mintz, 1997). Este fenómeno se puede representar químicamente mediante la siguiente expresión:



El modelo se enfoca específicamente en el proceso de absorción de hidrógeno presurizado. El cambio de fase desde el metal base hacia su correspondiente aleación hidrurada se describe mediante la ecuación de Avrami, mientras que los fenómenos de transferencia térmica se modelan utilizando la ecuación de calor de Fourier y la ley de enfriamiento de Newton.

Resultados y Discusión

El modelo desarrollado permite analizar los perfiles de temperatura y la distribución de hidrógeno en el sistema como se observa en la Figura 1, así como evaluar el impacto de distintos parámetros operativos (como la temperatura del refrigerante y la presión de suministro) sobre su desempeño. Estos parámetros afectan directamente la temperatura promedio y la cantidad de hidrógeno almacenado como se puede ver en la Figura 2, lo cual influye en forma directa sobre la autonomía del vehículo.

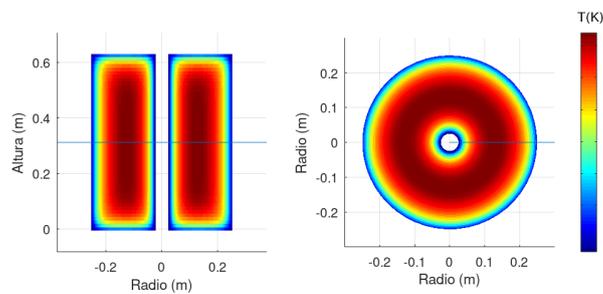


Figura 1 – Mapa de calor para la temperatura para dos cortes del almacenador considerado.

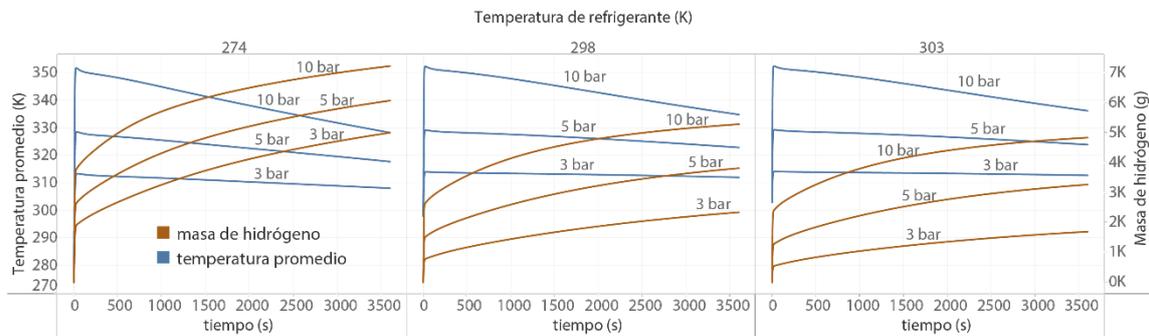


Figura 2 – Masa de hidrógeno almacenado y temperatura promedio en función del tiempo para distintas temperaturas de refrigerante y presiones de suministro.

Conclusiones

La naturaleza exotérmica del proceso de hidruración provoca un rápido aumento de temperatura al inicio del almacenamiento, lo que desplaza el equilibrio de reacción y limita la cantidad de hidrógeno absorbido. Como consecuencia, se prolonga el tiempo necesario para alcanzar la capacidad total del sistema. Es posible almacenar una mayor masa de hidrógeno almacenado al aumentar la presión de suministro y/o disminuir la temperatura de refrigerante. Estos resultados destacan la importancia de una refrigeración eficiente, fundamental para optimizar la velocidad de carga y la autonomía de un vehículo.

Referencias

Bloch, J., & Mintz, M. H. (1997). Kinetics and mechanisms of metal hydrides formation—A review. *Journal of Alloys and Compounds*, 253–254, 529–541. [https://doi.org/10.1016/S0925-8388\(96\)03070-8](https://doi.org/10.1016/S0925-8388(96)03070-8)

Li, Y., Teliz, E., Zinola, F., & Díaz, V. (2021). Design of a AB5-metal hydride cylindrical tank for hydrogen storage. *International Journal of Hydrogen Energy*, 46(68), 33889–33898. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.07.207>