

Resumen

La presente tesis propone una metodología basada en la modelación de la mecánica de fluidos computacional para optimizar la hidrodinámica del flujo del electrolito en los reactores electroquímicos con validaciones experimentales.

Se presenta una investigación para que, a través de la proposición y análisis de unos parámetros indicadores, se pueda mejorar los diseños actuales de las celdas que constituyen los reactores en este estudio y proponer un óptimo realizable.

En consecuencia, el objetivo de la presente tesis es analizar y revelar los estados de flujo del electrolito dentro del reactor mediante el uso de un código numérico que resuelva la mecánica del flujo del electrolito en las geometrías propuestas. Ello permite, por un lado, determinar unos parámetros cuantificables que analizan la bondad de los diseños en aras de tener visualizaciones de los flujos; y, por otro lado, disponer de aspectos cuantificables que permitan la optimización de los diseños. El diseño y los parámetros propuestos se validan experimentalmente en dos geometrías diferentes construidas para tal fin.

Este objetivo de carácter general se divide en una serie de objetivos más específicos que se detallan a continuación:

- Realizar un estudio de la viabilidad económica basado en el caso de España para este tipo de baterías.
- Realizar un estudio detallado acerca de las investigaciones realizadas hasta la fecha relativa a la optimización mediante técnicas CFD (por sus siglas en inglés: Computational Fluid Dynamics) del interior de un reactor electroquímico redox, ya sea mediante metodologías funcionales o mediante otro tipo de técnicas de diseño.
- Evaluar la bondad de los distintos modelos desarrollados mediante las técnicas CFD frente a modelos experimentales, observando la adecuación de los modelos computacionales frente a los modelos físicos.
- Proponer parámetros propios en este campo para la cuantificación de la eficiencia del reactor en base a la velocidad a la que circula el fluido en el interior de la celda.

- Definir el ajuste más adecuado de los distintos operadores de diseño para cada una de las propuestas de optimización realizadas.
- Obtener una geometría óptima en función de los parámetros de diseño para la construcción de una celda a escala real.

A partir de la metodología propuesta se ha seguido un proceso de optimización en relación con la influencia del flujo del electrolito en el interior de la celda para desarrollar una geometría final optimizada.

A partir de los análisis desarrollados, se ha demostrado la importancia que tiene la tecnología de almacenamiento de energía que se propone en el sistema energético español y se ha realizado un análisis económico de una batería concreta que avala su viabilidad. Se ha estimado, en este caso, un tiempo de amortización de 8 años y medio.

Asimismo, se ha realizado un modelo validado para un prototipo experimental con mediciones en laboratorio y contrastaciones numéricas que avalan el uso de la fluidodinámica computacional que se propone. A través del software comercial STAR-CCM+ de CD-Adapco[®], se ha validado un modelo inicial a escala de laboratorio en el Departamento de Electroquímica de la Universidad de Alicante (España). Esta validación ha dado unos errores menores del 2,22 % al comparar el modelo físico con el numérico. Se han definido ciertos parámetros de funcionamiento en este primer prototipo como, por ejemplo, el porcentaje de volumen de fluido circulando en la dirección principal del flujo, siendo este del 83 %.

En la presente tesis se propone una metodología conjunta basada en la experiencia adquirida en fases previas para proponer parámetros de diseño. Dicha metodología atiende a la definición de los siguientes conceptos: coeficiente de simetría, coeficiente de uniformidad, coeficiente del rango de velocidades y volumen de fluido en la dirección principal.

El coeficiente de simetría indica la diferencia de caudal que circula por ambas partes de la celda en la dirección longitudinal; el coeficiente de uniformidad evalúa la velocidad media de cada canal; el coeficiente del rango de velocidades analiza la velocidad en un punto específico de la membrana para determinar la variabilidad del frente de velocidad; y, por último, se define el volumen de fluido en la dirección principal que cuantifica la laminaridad y dirección del fluido en el interior de la celda. Esta metodología se usa para optimizar la batería basada en modificaciones sobre disposiciones ya existentes, de manera que se llega a una geometría final en la que el número de los canales más cercanos a la membrana es de 84, con una distancia de 1 mm entre canal y canal. Esta geometría construida a escala real y ensayada en el Laboratorio Justo Nieto de Mecánica de Fluidos de la

Universidad Politécnica de Valencia esta validada con mediciones experimentales de presiones y velocidades lo que permite ratificar el modelo numérico propuesto.

La batería diseñada tiene prácticamente una simetría perfecta y una distribución uniforme cuando el fluido alcanza la membrana. El 100 % del fluido que transcurre por la zona de membrana circula en la misma dirección, lo que provoca que se minimicen las zonas de recirculación o zonas muertas. La metodología descrita cuantifica la bondad de un diseño claramente mejorado frente a los ya existentes, al mismo tiempo que valida la metodología propuesta para el diseño de este tipo de elementos basados en la mecánica del flujo del electrolito en el interior de la misma.

La presente tesis se avala con una comunicación a congreso y cuatro artículos presentados a revistas indexadas en la base de datos "Journal Scitation Reports" que se detallan a continuación.

- Escudero González, J.; Alberola, A.; López Jiménez, P.A. 2012. Computational Fluid Dynamics Applied to a Prototype Flow Battery. III International Flow Battery Forum (IFBF 2012). Munich, June de 2012. Minutes Book. Pages 14-16. ISBN 978-0-9571055-2-2.
- Escudero Gonzalez, J.; Alberola, A.; López-Jiménez, P. A. 2013. Redox Cell Hydrodynamics Modelling. Simulation and Experimental Validation. Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics. Volume 7. N 2. Pages 168-181. June 2013. (Factor de Impacto en 2012: 1.144; Q2).
- Escudero-González, J.; López-Jiménez, P. A. 2014. Methodology to Optimize Fluid-Dynamic Design in a Redox Cell. 2014. Journal of Power Sources. Volume 251, 1 April 2014, Pages 243–253. (Factor de Impacto en 2012: 4.675; Q1)
- Escudero-González, E.; López-Jiménez, P.A. 2014. Iron redox battery as electrical energy storage system in the Spanish energetic framework. International Journal of Electrical Power & Energy Systems. Volume 61, October 2014, Pages 421–428. (Factor de Impacto en 2012: 3.432; Q1)
- Escudero-González, J.; López-Jiménez, P.A. Pendiente de publicación. Redox Cell Hydrodynamics Modelling. Towards a Real Improved Geometry based on CFD Analysis. Artículo aceptado para su publicación, en proceso de edición en la revista Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics. (Factor de Impacto en 2012: 1.144; Q2).