

Resum

La present tesi proposa una metodologia basada en la modelació de la mecànica de fluids computacional per a optimitzar la hidrodinàmica del flux d'electròlit en els reactors electroquímics amb validacions experimentals.

Es presenta una investigació de manera que a través de la proposició i anàlisi d'uns paràmetres indicadors, es puga millorar els dissenys actuals de les cel·les que constitueixen els reactors en aquest estudi i proposar un òptim realitzable.

El objectiu de la present tesi és, per tant, analitzar i revelar els estats de flux de l'electròlit dins del reactor electroquímic utilitzant un codi numèric que resolgui en profunditat, en les geometries proposades la mecànica del flux d'electròlit. Açò permet, per una banda, determinar uns paràmetres quantificables que analitzen la bondat dels dissenys a fi de tindre visualitzacions dels fluxos; i d'una banda, disposar d'aspectes quantificables que permeten l'optimització dels dissenys de l'altra. El disseny i el paràmetres proposats es validen experimentalment en dues geometries diferents desenvolupades per tal fi.

Este objectiu de caràcter general s'ha concretat en una sèrie d'objectius més específics, que són detallats a continuació:

- Realitzar un estudi de la viabilitat econòmica basat en el cas d'Espanya d'este tipus de bateries.
- Realitzar estudi detallat sobre les investigacions realitzades fins a la data relativa a l'optimització per mitjà de tècniques CFD (per les seues sigles a l'anglès: Computational Fluid Dynamics) de l'interior d'un reactor electroquímic redox, ja siga per mitjà de metodologies funcionals o per mitjà d'un altre tipus de tècniques de disseny.
- Avaluar la bondat dels distints models desenrotllats per mitjà de les tècniques CFD enfront de models experimentals, observant l'adequació dels models computacionals enfront dels models físics.
- Proposar paràmetres propis en este camp per a la quantificació de l'eficiència del reactor basant-se en la velocitat a què circula el fluid en l'interior de la cel·la.

- Definir l'ajust més adequat dels distints operadors de disseny per a cada una de les propostes d'optimització realitzades.
- Obtindrem d'una geometria òptima en funció dels paràmetres de disseny per a la construcció d'una cel·la a escala real.

A partir de la metodologia proposada, s'ha seguit un procés per a la determinació d'un òptim quant al paper que juga el flux del fluid d'intercanvi en l'interior de la cel·la per a desenvolupar una geometria final optimitzada.

A partir dels anàlisis ací desenrotllats, s'ha conclòs la importància que en el sistema energètic espanyol té la tecnologia d'emmagatzemament d'energia que ací es proposa i s'ha realitzat una anàlisi econòmica d'una bateria concreta que avala la viabilitat de les bateries proposades, estimant si és el cas particular un temps d'amortització de 8 anys i mig.

Així mateix s'ha realitzat un model validat para prototip experimental amb mesuraments en laboratori i contrastacions numèriques que avalen l'ús de la fluid-dinàmica computacional que es proposa. A través del programari comercial STAR-CCM+ de CD-Adapco©, s'ha validat un model inicial a escala de laboratori departament d'Electroquímica de la Universitat d'Alacant (Espanya) , en que començar a assajar els paràmetres. Esta validació ha donat uns errors menors del 2,22 % al comparar el model físics amb el numèric. S'han estimat en este primer prototip certs paràmetres de funcionament, com per exemple, el percentatge de volum de fluid circulant en la direcció principal del flux, d'aquesta el 83 %.

La present tesis proposa una metodologia conjunta a la llum de l'experiència adquirida en les fases prèvies basada en la definició dels conceptes següents: coeficient de simetria, coeficient d'uniformitat, coeficient del rang de velocitats i volum de fluid en la direcció principal.

El coeficient de simetria indica la diferència de cabal que circula per ambdós parts de la cel·la en la direcció longitudinal, el coeficient d'uniformitat avalua la velocitat mitjana de cada canal. El coeficient del rang de velocitats analitza la velocitat en un punt específic de la membrana per a determinar la variabilitat del front de velocitat i finalment, el volum de fluid en la direcció principal, el qual quantifica quantificar la laminaritat i direcció del fluid en l'interior de la cel·la. Esta metodologia , s'usa per a optimitzar la bateria basat en modificacions sobre disposicions ja existents de manera que s'arriba a una geometria final en què: el nombre de canals mes apropat de la membrana és de 84, amb una distància de 1 mm entre canals. Esta geometria construïda a escala real i assajada en el Laboratori Justo Nieto de Mecànica de Fluids de la Universitat Politècnica de València està validada amb mesuraments experimentals de pressions i velocitats que permet ratificar el model numèric proposat.

La bateria així dissenyada té pràcticament una simetria perfecta i una distribució uniforme quan el flux aconsegueix la membrana. El 100 % del fluid que transcorre per la zona de membrana circula en la mateixa direcció, la qual cosa provoca que es minimitzen les zones de recirculació o zones mortes. La metodologia així descrita, quantifica la bondat d'un disseny clarament millorat enfront dels ja existents, al mateix temps que valida la metodologia proposada per al disseny d'este tipus d'elements basats en la mecànica del flux de l'electròlit en l'interior de la mateixa.

La bateria així dissenyada té pràcticament una simetria perfecta i una distribució uniforme quan el flux aconsegueix la membrana amb un volum de recirculació en la zona de membrana pràcticament nul. La metodologia així desenrotllada, quantifica la bondat d'un disseny clarament millorat enfront dels ja existents, al mateix temps que valida la metodologia proposada per al disseny d'este tipus d'elements basats en la mecànica del flux de l'electròlit en l'interior de la mateixa.

La present tesis és avalada amb una comunicació a Congrés i quatre articles presentats a revistes indexades en la base de dades "Journal Scitation Reports", com es detallats a continuació.

- 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. pp 168-181. June 2013. (Factor de Impacte al 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 Impacte al 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 Impacte al 2012: 3.432; Q1)
- Escudero-González, J.; López-Jiménez, P.A. Pendent de publicació. Redox Cell Hydrodynamics Modelling. Towards a Real Improved Geometry based on CFD Analysis. Article acceptat a la revista i en proccés d'edició a la revista Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics. (Factor de Impacte al 2012: 1.144; Q2).