



Modelado y simulación de una celda de electrólisis alcalina de agua para la producción de hidrógeno.



J. Luis Merino Cruz, J. Javier López Cruz, R. Mendoza-Vizcaya, F. J. Almazán-Ruiz.

merino.cruz.jose.luis@gmail.com, fjalmazan7@gmail.com

Departamento de Ingeniería y Tecnología, Facultad de Estudios Superiores Zaragoza, UNAM. Col. Ejército de Oriente. Tel: (55)57736331, CP 09239, Iztapalapa, CDMX.

Introducción.

- La formación de burbujas en la superficie de los electrodos afecta a la producción de hidrógeno, reduciendo así su rendimiento.

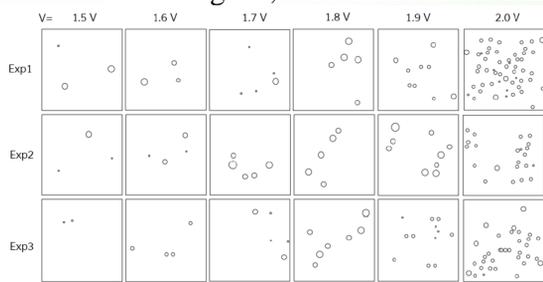


Figura 1. Luna Luna G. Variación de voltaje y generación de burbujas. [Figura]. H. Puebla de Z.: Benemérita Universidad Autónoma de Puebla; 2021.

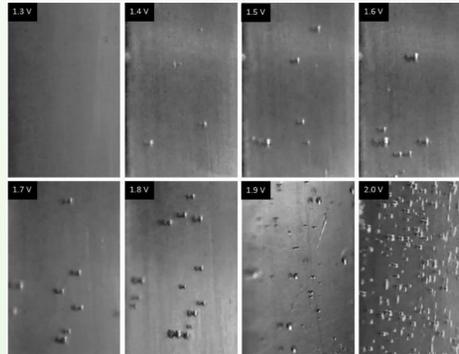


Figura 2. Luna Luna G. Generación de gas a diferentes voltajes [Fotografía]. H. Puebla de Z.: Benemérita Universidad Autónoma de Puebla; 2021. Formación de gases en un electrolizador.

Objetivo.

- Comparar los efectos en la densidad de corriente cuando se considera evolución de gas en los electrodos frente a cuando no se toma en cuenta.
- Analizar en un modelo 2D de la celda la formación de gas en el ánodo y en el cátodo.
- Observar cómo cambia la densidad de corriente a lo largo del separador.

Método.

Usando el software de simulación *COMSOL Multiphysics 6.0* se pudo simular mediante el modelo Euler-Euler el flujo bifásico y la dispersión de burbujas.

Para la dispersión de la burbuja se utiliza una ecuación expuesta por Bideau et al, *Energies* 2020.

Fuerza de dispersión de burbuja: $\vec{F}_{BD} = -\varepsilon_g \rho \frac{K_g}{d_b} |U_r| \vec{V}_{\varepsilon_g} \dots (1)$

ε : es la fracción gas o líquida.
 ρ : es la densidad en $kg\ m^{-3}$.
 d_b : es el diámetro de la burbuja en m .
 U_r : Es la velocidad de la fase gas menos la del líquido en $m\ s^{-1}$.

La corriente de distribución usa la cinética de Butler-Volmer en ambos electrodos.

$$i = i_0 \left(\exp\left(\frac{\alpha_a F \eta}{RT}\right) - \exp\left(-\frac{\alpha_c F \eta}{RT}\right) \right) \dots (2)$$

i_0 : es una cantidad empírica.
 α_a : Coeficiente de reacción en el ánodo.
 F : Constante de Faraday.
 η : Constante de Faraday.
 α_c : Coeficiente de reacción en el cátodo.

Como la efectividad de la conductividad del electrolito depende de la fracción volumen del gas se usa la correlación de Bruggeman:

$$\sigma(\varepsilon) = (1 - \varepsilon_g)^{1.5} \sigma_0 \dots (3)$$

Densidad de corriente de intercambio efectiva dependiente de la fracción volumen de gas local:

$$i_{0,ef} = (1 - \varepsilon_g) i_0 \dots (4)$$

Resultados.

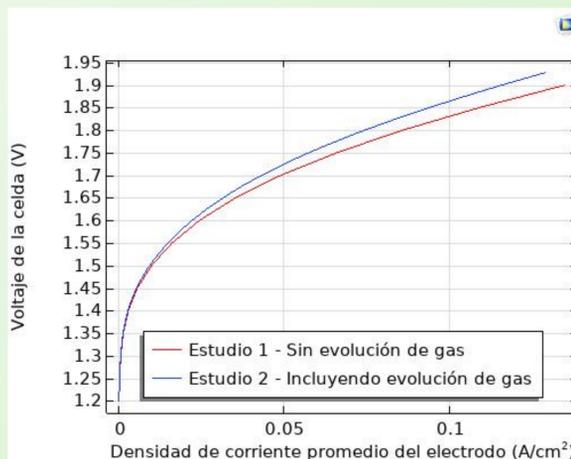


Figura 3. Curvas que muestran una pequeña pero importante polarización entre incluir la evolución de gas contra omitirla.

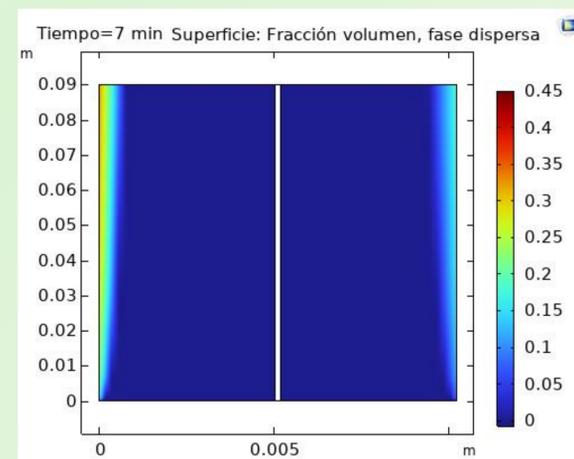


Figura 4. Modelo 2D de la fracción volumen de gas en los electrodos (Izquierdo hidrógeno, derecho oxígeno).

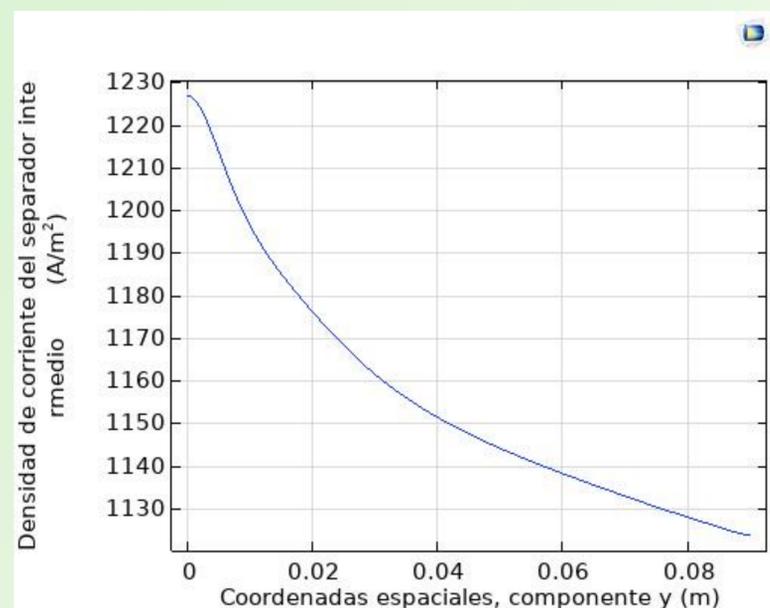


Figura 5. Cambio en la densidad de corriente a lo largo del separador.

Conclusión.

En la simulación podemos observar los cambios que existen cuando se toma en cuenta la evolución de gas, realizando una acción de resistencia a la densidad de corriente en los electrodos provocando el uso de un mayor voltaje para mantenerla (figura 1). De igual manera el modelo 2D nos da información respecto a una mayor acumulación de burbujas a la salida de la celda (figura 2) esto genera que en el separador haya una caída en la densidad de corriente hacia al final de este (figura 4).

Bibliografía.

- Luna Luna G. Modelación y simulación de los fenómenos hidrodinámicos en un sistema de electrólisis alcalina usando CFD [tesis de maestría]. H. Puebla de Z., Benemérita Universidad Autónoma de Puebla; 2021.
- COMSOL. Electrochemistry Module [Internet]. Disponible en: <https://doc.comsol.com/6.0/doc/com.comsol.help.echem/ElectrochemistryModuleUsersGuide.pdf>
- Le Bideau et al, "Eulerian Two-Fluid Model of Alkaline Water Electrolysis for Hydrogen Production" [Artículo] *Energies*, 2020.