



UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA  
BARCELONATECH

Escola d'Enginyeria de Barcelona Est

TREBALL FI DE GRAU

**Grau en Enginyeria Mecànica**

**MODELITZACIÓ I EXPERIMENTACIÓ D'EMMAGATZEMATGE  
D'HIDROGEN EN HIDRURS METÀL·LICS**



**Memòria i Annexos**

**Autor:** Carles Taxonera Pérez  
**Director:** Francesc Font Martínez  
**Codirector:** Alejandro Martínez Alegre  
**Convocatòria:** Juny 2023



## Resum

Aquest treball s'estructura en tres grans blocs. En primer lloc, s'introdueix l'hidrogen com a vector energètic, les principals formes de producció d'hidrogen i el seu emmagatzematge, on es fa èmfasis en l'emmagatzematge en tancs d'hidrurs metàl·lics, les seves característiques principals i el seu funcionament.

El comportament d'aquests tancs d'hidrurs metàl·lics es pot conèixer analitzant els seus paràmetres d'interès, com pot ser la pressió i la temperatura del tanc entre d'altres.

El segon bloc consta d'un model matemàtic reduït a una dimensió que explica el comportament del tanc d'hidrurs metàl·lics on el paràmetre d'interès principal és la temperatura. En aquest bloc es pot veure des del model matemàtic general del que es parteix, fins a la reducció del model a una dimensió amb les condicions inicials i de contorn utilitzades.

Seguidament, s'analitza el comportament de la temperatura i la pressió amb una sèrie d'experiments al laboratori. Aquest tercer bloc consta de dos experiments, amb diferents cabals, on s'han pres imatges del tanc d'hidrurs metàl·lics amb una càmera tèrmica i dades de la pressió i temperatura amb diferents sensors.

Finalment, es troba una comparació qualitativa entre el model matemàtic estudiat i els experiments elaborats al laboratori.

## Resumen

Este trabajo se estructura en tres grandes bloques. En primer lugar, se introduce el hidrógeno como vector energético, las principales formas de producción de hidrógeno y su almacenamiento, donde se pone énfasis en el almacenamiento en tanques de hidruros metálicos, sus características principales y su funcionamiento.

El comportamiento de estos tanques de hidruros metálicos puede conocerse analizando sus parámetros de interés, como puede ser la presión y la temperatura del tanque entre otros.

El segundo bloque consta de un modelo matemático reducido a una dimensión que explica el comportamiento del tanque de hidruros metálicos en el que el parámetro de interés principal es la temperatura. En este bloque puede verse desde el modelo matemático en dos dimensiones del que se parte, hasta la reducción del modelo a una dimensión con las condiciones iniciales y de contorno utilizadas.

Seguidamente, se analiza el comportamiento de la temperatura y la presión con una serie de experimentos en el laboratorio. Este tercer bloque consta de dos experimentos, con distintos caudales, donde se han tomado imágenes del tanque de hidruros metálicos con una cámara térmica y datos de la presión y temperatura con distintos sensores.

Por último, se encuentra una comparación cualitativa entre el modelo matemático estudiado y los experimentos elaborados en el laboratorio.

## **Abstract**

This work is structured in three main blocks. Firstly, hydrogen is introduced as an energy vector, the main forms of hydrogen production and its storage, where emphasis is placed on storage in metal hydride tanks, their main characteristics and their operation.

The behaviour of these metal hydride tanks can be known by analysing their parameters of interest, such as the pressure and temperature of the tank, among many others.

The second block consists of a mathematical model reduced to one dimension that explains the behaviour of the metal hydride tank in which the main parameter of interest is the temperature. In this block we can see from the mathematical model in two dimensions, to the reduction of the model to one dimension with the initial and boundary conditions used.

The behaviour of temperature and pressure is then analysed with different laboratory experiments. This third block consists in two different experiments, with different flow rates, where images of the metal hydride tank have been taken with a thermal camera and pressure and temperature data with different sensors.

Finally, there is a qualitative comparison between the mathematical model studied and the experiments carried out in the laboratory.

## Agraïments

Primer de tot voldria mostrar el meu agraïment al director d'aquest TFG, el professor de l'escola Francesc Font Martínez, per la seva ajuda i predisposició en tot moment durant aquests mesos. També agrair al professor i codirector Alejandro Martínez Alegre la seva implicació durant les sessions de laboratori.

Aquest projecte representa el fi del Grau en Enginyeria Mecànica i, per aquest motiu, també m'agradaria donar les gràcies a la meva família i amics per tot el suport que m'han donat durant tots aquests anys.

Finalment, no puc evitar destacar tots els amics que he fet durant aquest anys a l'escola, ja que simplement el fet de poder compartir les nostres preocupacions i haver viscut noves experiències, han convertit aquesta etapa en una de les més boniques de la meva vida.

Gràcies, de tot cor, a tots i totes.



## Contingut

<b>RESUM</b>	<b>I</b>
<b>RESUMEN</b>	<b>II</b>
<b>ABSTRACT</b>	<b>III</b>
<b>AGRAÏMENTS</b>	<b>IV</b>
<b>1. PREFACI</b>	<b>1</b>
1.2. Origen del treball .....	1
1.3. Motivació .....	1
<b>2. INTRODUCCIÓ</b>	<b>2</b>
2.1. Objectius del treball.....	2
2.2. Abast del treball.....	3
<b>3. L'HIDROGEN</b>	<b>4</b>
3.1. L'energia de l'hidrogen .....	4
3.2. Classificació de l'hidrogen .....	5
3.3. Economia de l'hidrogen.....	6
3.4. Principals formes de producció d'hidrogen .....	7
3.4.1. Reformació del gas natural .....	7
3.4.2. Electròlisi de l'aigua .....	7
3.4.3. Gasificació de biomassa .....	8
3.4.4. Fotòlisi de l'aigua .....	8
3.4.5. Producció d'hidrogen a partir de residus .....	9
3.5. Debilitament per hidrogen .....	9
3.6. Principals aplicacions .....	9
3.6.1. Piles de combustible .....	10
3.6.2. Indústria química .....	11
3.6.3. Sector del transport .....	11
3.6.4. Emmagatzematge i transport d'energia.....	12
3.6.5. Sector metal·lúrgic .....	12
3.6.6. Aplicacions espacials.....	12
3.7. Emmagatzematge.....	12
3.7.1. Hidrogen comprimit.....	12
3.7.2. Hidrogen líquid .....	14
3.7.3. Hidrogen emmagatzemat en materials.....	15



3.8.	Comparació entre formes d'emmagatzematge .....	19
<b>4.</b>	<b>TANCS D'HIDRURS METÀL·LICS</b> .....	<b>21</b>
<b>5.</b>	<b>MODEL MATEMÀTIC DEL TANC D'HIDRURS METÀL·LICS</b> .....	<b>23</b>
5.1.	Suposicions del model .....	23
5.2.	Equacions de conservació del model general .....	23
5.2.1.	Conservació de la massa .....	23
5.2.2.	Conservació del moment .....	24
5.2.3.	Conservació de l'energia .....	24
5.2.4.	Equacions per la reacció d'hidridació i van't Hoff.....	25
5.3.	Equacions de conservació del model 1D i condicions de contorn.....	26
5.3.1.	Conservació de la massa .....	26
5.3.2.	Conservació del moment .....	26
5.3.3.	Conservació de l'energia .....	26
5.4.	Model matemàtic reduït.....	27
5.4.1.	Condicions de contorn i inicials.....	28
5.5.	Adimensionalització.....	28
5.6.	Resultats del model matemàtic.....	30
<b>6.</b>	<b>MODEL EXPERIMENTAL PEL TANC D'HIDRURS METÀL·LICS</b> .....	<b>36</b>
6.1.	Introducció del model experimental .....	36
6.2.	Resultats del model experimental.....	38
6.2.1.	Imatges de la càmera tèrmica amb cabal de 0,38 l/min.....	38
6.2.2.	Imatges de la càmera tèrmica amb cabal de 0,08 l/min.....	45
6.2.3.	Tractament d'imatge amb Matlab.....	51
6.2.4.	Resultats amb cabal de 0,38 l/min.....	53
6.2.5.	Resultats amb cabal de 0,08 l/min.....	56
6.2.6.	Comparació dels resultats experimentals amb cabal de 0,38 l/min i 0,08 l/min 58	
	<b>CONCLUSIONS</b> .....	<b>64</b>
	<b>PRESSUPOST I/O ANÀLISI ECONÒMICA</b> .....	<b>65</b>
	<b>BIBLIOGRAFIA</b> .....	<b>67</b>
	<b>ANNEX A: ESQUEMA NEUMÀTIC DE LA INSTAL·LACIÓ</b> .....	<b>71</b>
	<b>ANNEX B: CODI DE MALTAB PEL TRACTAMENT DE LES IMATGES</b> .....	<b>72</b>
	<b>ANNEX C: CODI DE MALTAB PER A LA SOLUCIÓ DEL MODEL MATEMÀTIC REDUÏT</b>	<b>76</b>



## 1. Prefaci

A continuació s'exposa la presentació i definició de l'objecte d'aquest projecte. S'explica l'origen dels objectius i la motivació personal que recau en ells.

### 1.2. Origen del treball

Aquest projecte té diferents objectius. En primer lloc, s'ha volgut adquirir coneixements sobre combustibles o vectors energètics alternatius als convencionals, en aquest cas l'hidrogen. També conèixer els avantatges i desavantatges que té aquest gas i quines opcions té per la seva posterior utilització, aprendre de quines opcions es disposa pel seu emmagatzematge i transport.

A més, el principal objectiu és entendre el comportament d'un tanc d'hidrurs metàl·lics durant la seva càrrega. Això es realitzarà mitjançant un muntatge experimental d'emmagatzematge d'hidrogen en hidrurs metàl·lics, que permetrà l'estudi i observació dels diferents fenòmens que hi ocorren. La part experimental anirà acompanyada d'un model matemàtic reduït que descriurà l'evolució de la temperatura dins del tanc.

### 1.3. Motivació

Actualment, el planeta enfronta greus problemes ambientals que l'amenacen de manera greu. Les prediccions indiquen que, a curt termini, la situació empitjorarà considerablement. Per tant, aquest projecte intenta submergir-se en el camp de les energies renovables com una manera de contribuir, en un futur proper, a la recerca d'alternatives i solucions que redueixin l'impacte negatiu al medi ambient. Com a desafiament, es faran servir els coneixements adquirits durant la carrera per fer el modelatge matemàtic d'un sistema senzill d'emmagatzematge d'hidrogen i experiments al laboratori en diferents escenaris. D'aquesta manera, es busca aportar un granet de sorra a la recerca de solucions energètiques sostenibles pel medi ambient.

## 2. Introducció

L'emmagatzematge d'energia és un dels reptes més importants al que ens enfrontem actualment. Amb l'increment de la demanda de fonts d'energia renovable, sorgeix la necessitat de trobar solucions efectives i eficients per emmagatzemar i distribuir aquestes fonts intermitents d'energia. L'hidrogen, en particular, ha emergit com un candidat prometedor per a l'emmagatzematge i el transport d'energia, a causa de la seva alta densitat energètica i el seu potencial per ser produït a partir de fonts renovables [1].

En aquest context, els hidrurs metàl·lics s'han convertit en materials clau per emmagatzemar hidrogen. Aquests compostos contenen enllaços químics forts entre l'hidrogen i els metalls, cosa que els permet emmagatzemar grans quantitats d'hidrogen en la seva estructura cristal·lina. La capacitat d'emmagatzematge, la cinètica d'absorció/desorció i l'estabilitat termoquímica dels hidrurs metàl·lics són algunes de les propietats fonamentals que determinen la seva idoneïtat per a aplicacions pràctiques.

El present Treball de Fi de Grau té com a objectiu principal explorar i analitzar la modelització i l'experimentació de l'emmagatzematge d'hidrogen en hidrurs metàl·lics. Aquest estudi se centra a comprendre les propietats termodinàmiques, específicament la temperatura i la pressió, dels hidrurs metàl·lics, així com experimentar al laboratori, el comportament del tanc d'hidrurs metàl·lics durant la càrrega d'hidrogen.

### 2.1. Objectius del treball

Els objectius específics d'aquest TFG són els següents: realitzar una revisió de la literatura científica i tècnica relacionada amb l'hidrogen com a vector energètic i també l'emmagatzematge d'hidrogen en hidrurs metàl·lics, incloent l'anàlisi d'investigacions prèvies sobre propietats termodinàmiques dels tancs. Desenvolupar models teòrics per predir i simular les propietats d'emmagatzematge d'hidrogen en hidrurs metàl·lics, per comprendre i anticipar el comportament d'aquests materials en diferents condicions de temperatura. Realitzar experiments de laboratori per investigar les propietats d'absorció d'hidrogen en hidrurs metàl·lics, aportant dades experimentals per validar els models teòrics desenvolupats. Finalment, analitzar i comparar els resultats obtinguts de la modelització i l'experimentació per identificar els factors clau que afecten a la càrrega de tancs d'hidrurs metàl·lics.

## 2.2. Abast del treball

L'abast d'aquest TFG se centrarà principalment en entendre l'evolució de diverses magnituds termodinàmiques en la direcció axial de l'ampolla, durant la càrrega d'hidrogen dins un tanc d'hidrurs metàl·lics.

Per dur a terme aquesta investigació, es faran servir eines experimentals i de modelització per predir el comportament dels hidrurs metàl·lics en diverses condicions de flux màssic. Es desenvoluparan models teòrics que permetin estimar la temperatura del tanc durant l'absorció d'hidrogen.

Es duran a terme experiments de laboratori i es recolliran dades experimentals que més tard es compararan amb els resultats del model teòric per tal d'entendre i explicar alguns dels fenòmens que s'hi observen. Aquests experiments s'enfocaran en la càrrega d'un tanc d'hidrurs metàl·lics a diferents cabals, podent agafar dades de pressió i temperatura de l'eix del tanc, amb sensors i amb una càmera tèrmica.

### 3. L'Hidrogen

L'hidrogen és un element químic que es pot utilitzar com a combustible per generar energia. A diferència dels combustibles fòssils, com el petroli i el gas natural, l'hidrogen no produeix diòxid de carboni ni altres emissions de gasos d'efecte hivernacle quan es crema. Tot i així, l'hidrogen es vol utilitzar com a vector energètic, per tal de generar electricitat mitjançant dispositius com les piles de combustible, a través de la reacció electroquímica amb l'oxigen. Per aquest motiu, es considera una alternativa prometedora als combustibles fòssils en la lluita contra el canvi climàtic.

A més, tot i no poder obtenir l'hidrogen directament com a recurs natural, és un recurs abundant i es pot obtenir de diverses fonts, com ara l'electròlisi d'aigua, la reforma del gas natural i la biomassa. També es pot utilitzar en una àmplia gamma d'aplicacions, des de la generació d'energia elèctrica en vehicles i edificis, fins a la producció de productes químics i materials.

Tot i així, hi ha alguns reptes que cal abordar abans que l'hidrogen es pugui utilitzar com a principal font d'energia en la nostra societat. Un d'ells és la producció massiva d'hidrogen de manera econòmica i sostenible. Un altre repte és la necessitat d'infraestructures per emmagatzemar, transportar i distribuir l'hidrogen a gran escala. Malgrat aquests reptes, l'hidrogen continua sent una alternativa emocionant i amb gran potencial per convertir-se en el combustible net i renovable del futur.

#### 3.1. L'energia de l'hidrogen

Es pot comparar l'energia de l'hidrogen amb la d'altres combustibles pel que fa al seu contingut energètic i la seva eficiència en la producció d'energia.

Pel que fa al contingut energètic, l'hidrogen té una energia específica molt elevada, és a dir, una gran quantitat d'energia emmagatzemada en comparació amb el seu pes. Per exemple, un quilogram d'hidrogen té aproximadament tres vegades més energia que un quilogram de gasolina [4].

Pel que fa a l'eficiència en la producció d'energia, l'hidrogen és una font d'energia neta i renovable que no produeix diòxid de carboni ni altres emissions de gasos d'efecte hivernacle quan es crema. Això fa que sigui molt atractiu com un combustible alternatiu en la lluita contra el canvi climàtic. A més, l'hidrogen es pot produir a partir de diverses fonts, incloses les energies renovables com el solar i el vent, cosa que el fa altament versàtil [4].

D'altra banda, els combustibles fòssils com el petroli, el gas natural i el carbó tenen un contingut energètic elevat, però la seva combustió produeix emissions de gasos d'efecte hivernacle que

contribueixen al canvi climàtic. A més, la producció i l'extracció d'aquests combustibles pot ser molt perjudicial per al medi ambient i econòmicament inviable a llarg termini.

En resum, l'hidrogen té la capacitat de generar grans quantitats d'energia tèrmica per combustió i d'energia elèctrica per mitja de reaccions electroquímiques, i es pot produir de manera neta i renovable, cosa que la converteix en una alternativa prometedora als combustibles fòssils en la lluita contra el canvi climàtic.

## 3.2. Classificació de l'hidrogen

L'hidrogen es pot classificar per origen en tres categories principals [5]:

**Hidrogen gris:** Aquest tipus d'hidrogen es produeix a partir de combustibles fòssils, com el gas natural, el petroli i el carbó, mitjançant un procés de reforma del vapor. Durant aquest procés, el diòxid de carboni es publica com a subproducte, cosa que significa que la producció d'hidrogen gris contribueix al canvi climàtic i a la contaminació de l'aire. Per produir una tona d'hidrogen gris s'emeten de 9 a 12 tones de CO<sub>2</sub>.

**Hidrogen blau:** l'hidrogen blau es produeix a partir de fonts d'energia fòssil, però a diferència de l'hidrogen gris, es captura i s'emmagatzema el diòxid de carboni resultant. Es coneix com a captació i emmagatzematge de carboni (CAC). L'hidrogen blau es considera una solució de transició per a una producció d'hidrogen més neta, alhora que es desenvolupen tecnologies de producció d'hidrogen més sostenibles.

**Hidrogen verd:** L'hidrogen verd es produeix a partir d'energies renovables, com l'energia solar, el vent i la hidràulica, mitjançant l'electròlisi d'aigua. En aquest procés, l'electricitat s'utilitza per dividir l'aigua en hidrogen i oxigen. L'hidrogen verd es considera el tipus d'hidrogen més net i sostenible, ja que no emet diòxid de carboni ni altres gasos d'efecte hivernacle durant la seva producció.

La difusió de l'hidrogen (*hydrogen embrittlement*) en l'estructura de materials que transporten combustibles és un problema important. Per exemple, en la indústria del petroli i el gas, on l'ús d'hidrogen com a gas per a processos de perfeccionament i extracció pot provocar un debilitament per difusió de l'hidrogen en materials utilitzats en equips i canonades. Per tant, és important prendre mesures preventives, com ara l'ús de materials resistent al debilitament per difusió de l'hidrogen i el seguiment constant dels equips en ús. Els materials menys propensos a aquest tipus de debilitament són els acers de baix aliatge i aliatges de níquel i titani.

### 3.3. Economia de l'hidrogen

L'economia de l'hidrogen es basa en un model energètic que té com a objectiu principal produir hidrogen de manera competitiva per utilitzar-lo com una font d'energia baixa en carboni, reemplaçant així els combustibles fòssils.

Aquest enfocament té un impacte significatiu en la reducció d'emissions, l'estalvi d'energia i la integració de sistemes que utilitzen energies netes i renovables.

Tot i que l'ús generalitzat de l'hidrogen com a combustible pot semblar una opció viable a llarg termini, els avenços tecnològics impulsats per empreses i institucions a tot el món podrien accelerar el procés. Com a resultat, els terminis per implementar una economia de l'hidrogen es podrien veure reduïts [6].

L'hidrogen ofereix tres beneficis principals:

1. Emissió zero de gasos amb efecte d'hivernacle:

Quan l'hidrogen es combina amb oxigen en una pila de combustible, es genera electricitat que es pot utilitzar per a diverses aplicacions, com la propulsió de vehicles o la generació de calor. El gran avantatge de l'ús de l'hidrogen com a portador d'energia és que, en combinar-se amb l'oxigen, només es produeixen aigua i calor com a subproductes. No es generen gasos amb efecte d'hivernacle ni partícules perjudicials en utilitzar piles de combustible d'hidrogen.

2. Producció local a partir de diverses fonts:

L'hidrogen es pot produir a partir de diferents fonts, com ara metà, gasolina, biomassa, carbó o aigua. Això brinda flexibilitat en la seva producció, ja sigui per a consum local o per al seu emmagatzematge i distribució.

3. Producció sostenible a partir de l'aigua:

Quan l'hidrogen es produeix a partir de l'aigua, mitjançant el procés d'electròlisi s'obté un sistema de producció sostenible. L'energia renovable pot alimentar els electrolitzadors per generar hidrogen verd a partir de l'aigua sense generar emissions addicionals.

Aquests beneficis fan de l'hidrogen una opció atractiva per aconseguir una sostenibilitat energètica més gran i reduir la dependència dels combustibles fòssils.



### 3.4. Principals formes de producció d'hidrogen

La generació i producció d'hidrogen és un procés fonamental per a l'ús d'hidrogen com a font d'energia i combustible. L'hidrogen és un recurs energètic versàtil i net, capaç de produir calor mitjançant la combustió i electricitat a través de piles de combustible. Tanmateix, per utilitzar l'hidrogen com a combustible, primer s'ha de produir de manera eficient i sostenible. Hi ha diversos mètodes per produir hidrogen, incloent la reformació del gas natural, l'electròlisi d'aigua, la gasificació de biomassa i la fotòlisi d'aigua, cadascun amb els seus avantatges i desavantatges.

#### 3.4.1. Reformació del gas natural

Obtenir hidrogen per reformació del gas natural és un dels mètodes més comuns i barats de producció d'hidrogen. Aquest procés implica la conversió del metà en gas natural en hidrogen, mitjançant la reacció química coneguda com a reformació del gas. La reformació del gas es pot dur a terme de diverses maneres, però el més comú és la reformació del vapor, que utilitza vapor d'aigua i calor per descompondre el metà i produir hidrogen i diòxid de carboni.

El procés de reformació del vapor de gas natural té diverses etapes. Primer, es pretén que el gas natural elimini impureses com el sofre. A continuació, es barreja amb vapor d'aigua i s'escalfa a una temperatura alta, al voltant de 800 °C, en presència d'un catalitzador, que accelera la reacció química. La reacció produeix hidrogen i diòxid de carboni, així com monòxid de carboni, que es transforma en diòxid de carboni mitjançant un procés anomenat canvi de gas d'aigua. L'hidrogen i el diòxid de carboni estan separats i purificats per utilitzar-los com a combustible o en la producció de productes químics.

La reforma del vapor de gas natural és un procés madur i ben establert, que s'utilitza a gran escala en la producció d'hidrogen a tot el món. Tanmateix, la producció d'hidrogen procedent del gas natural genera emissions de gasos d'efecte hivernacle a causa de l'alliberament de diòxid de carboni a l'atmosfera. Per tant, la cerca de mètodes més sostenibles i eficients per produir hidrogen és cada cop més important per reduir l'impacte ambiental d'aquesta indústria.

#### 3.4.2. Electròlisi de l'aigua

L'electròlisi de l'aigua és un procés químic que utilitza electricitat per descompondre l'aigua en hidrogen i oxigen. El procés d'electròlisi implica l'aplicació d'un corrent elèctric mitjançant una solució d'aigua salada o aigua destil·lada que conté electròlits, que provoca la separació dels ions d'hidrogen i oxigen presents a l'aigua [9].

Aquest procés es realitza en un dispositiu anomenat electrolitzador, que conté dos elèctrodes immersos en una solució d'aigua amb electròlits. Un elèctrode es carrega positivament, ànode, i a l'altre

els ions d'hidrogen negatius ( $H^-$ ) de l'aigua, mentre que l'altre elèctrode està carregat negativament, càtode, i atrau ions d'oxigen positius ( $O_2^+$ ). Quan el corrent elèctric flueix a través de l'electrolitzador, els ions d'aigua es divideixen en àtoms d'hidrogen i oxigen, el que produeix gas d'hidrogen al càtode i gas d'oxigen a l'ànode.

L'electròlisi de l'aigua és una forma prometedora de producció d'hidrogen perquè de la separació de l'oxigen i l'hidrogen es pot generar mitjançant electricitat de fonts renovables, com la generada en plantes solars o eòliques. Tanmateix, el procés requereix actualment molta energia elèctrica i la tecnologia encara no és prou madura per ser competitiva amb altres formes de producció d'hidrogen, com la reforma del gas natural. En un futur, s'espera que la tecnologia es perfeccioni, permetent una producció d'hidrogen a gran escala més sostenible i rentable.

### 3.4.3. Gasificació de biomassa

La generació d'hidrogen mitjançant gasificació de biomassa és una tècnica que permet obtenir un gas de síntesi ric en hidrogen, que després es pot separar del gas de síntesi i utilitzar-lo com a combustible o amb altres finalitats.

La gasificació de biomassa per a la generació d'hidrogen és una tecnologia en desenvolupament que encara es troba en fase de recerca i desenvolupament. Tot i això, alguns estudis indiquen que la gasificació de biomassa pot ser una alternativa prometedora per a la producció d'hidrogen renovable, ja que la biomassa és una font d'energia renovable i sostenible que es pot conrear i collir contínuament.

El procés de gasificació de biomassa per a la generació d'hidrogen és similar al procés convencional de gasificació. Els materials orgànics s'escalfen i es posen sota pressió en una cambra de gas, que separa els materials en una barreja de gas que consisteix principalment en hidrogen, monòxid de carboni, diòxid de carboni i altres gasos [10].

En resum, és una tecnologia en desenvolupament que té el potencial de proporcionar una font d'hidrogen renovable i sostenible. Tanmateix, cal més investigació i desenvolupament per millorar l'eficiència i reduir els costos d'aquesta tecnologia.

### 3.4.4. Fotòlisi de l'aigua

La fotòlisi d'aigua és un procés que utilitza la llum solar per descompondre l'aigua en hidrogen i oxigen. Aquest procés es produeix de manera natural en la fotosíntesi vegetal, però també es pot produir artificialment mitjançant l'ús de cèl·lules solars especials.

Producció d'hidrogen a partir de residus: també és possible produir hidrogen a partir de residus, com ara residus d'aliments i residus municipals. Aquests materials pateixen processos de descomposició

anaeròbica o termoquímica per produir gas sintètic, que es pot processar per produir hidrogen i altres productes químics [11].

### 3.4.5. Producció d'hidrogen a partir de residus

Producció d'hidrogen a partir de residus: també és possible produir hidrogen a partir de residus, com ara residus d'aliments i residus municipals. Aquests materials pateixen processos de descomposició anaeròbica o termoquímica per produir gas sintètic, que es pot processar per produir hidrogen i altres productes químics [12].

## 3.5. Debilitament per hidrogen

El debilitament per hidrogen, també conegut com "fissuració d'hidrogen" o "ruptura per hidrogen", és un fenomen que es produeix quan l'hidrogen penetra en un material i debilita la seva estructura, que pot causar la fractura del material. Aquest fenomen és especialment rellevant en materials metàl·lics, com ara acers i aliatges.

El debilitament de l'hidrogen es produeix quan l'hidrogen es difon en el material metàl·lic, que es pot produir durant el procés de fabricació, el tractament tèrmic o l'ús del material. Un cop dissolt l'hidrogen en el material, pot emigrar a zones d'alta tensió, on l'estructura del material s'acumula i es debilita. Si la tensió del material supera el seu límit de resistència, el material pot fracturar-se.

## 3.6. Principals aplicacions

Hi ha diverses aplicacions de l'hidrogen que es poden classificar en tres categories principals: com a matèria primera, per a generació d'energia tèrmica i per a generació d'energia elèctrica.

L'hidrogen s'utilitza com a valuosa matèria primera en diferents sectors industrials, com la indústria química, petroquímica i siderúrgica. A la indústria química, l'hidrogen és àmpliament utilitzat en processos de producció, com la fabricació d'amoníac per a fertilitzants, metanol, la indústria del vidre i en la hidrogenació de greixos a la indústria alimentària. La utilització d'hidrogen d'origen renovable a la indústria petroquímica i a les biorefineries permet reduir les emissions de CO<sub>2</sub> associades a aquestes activitats. A més, la indústria siderúrgica també presenta un gran potencial per utilitzar hidrogen als seus processos [14].

L'hidrogen posseeix excel·lents propietats calorífiques i la seva combustió no genera emissions de CO<sub>2</sub>. Per aquesta raó, es pot fer servir en cremadors per reduir les emissions de CO<sub>2</sub> relacionades amb la necessitat de calor d'alt grau a la indústria (superior a 650°C). Així mateix, hi ha solucions tècniques per

a l'ús d'hidrogen en calderes i turbines, cosa que en permet la utilització com a font d'energia tèrmica [15].

A més, l'hidrogen es fa servir per generar energia elèctrica. Una de les tecnologies més destacades és la cèl·lula o pila de combustible, que converteix l'energia química de l'hidrogen i l'oxigen en electricitat i aigua de manera eficient i sense emissions. Aquesta tecnologia és especialment prometedora en vehicles de pila de combustible d'hidrogen (FCEV) i sistemes de generació elèctrica estacionaris [16].

Figure 16: Total demand for hydrogen in 2020 by application  
Source: Fuel Cells and Hydrogen Observatory

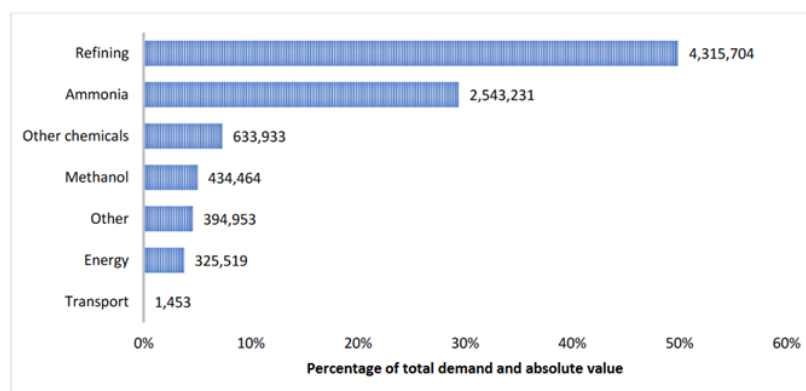


Figura 1: Demanda total a l'any 2020 per us i aplicació de l'hidrogen. <https://www.ariema.com/usuarios-y-aplicaciones-del-hidrogeno>

### 3.6.1. Piles de combustible

Les piles de combustible són dispositius electroquímics que converteixen un combustible, en aquest cas hidrogen, en energia elèctrica de manera eficient i amb un impacte ambiental mínim. A diferència dels dispositius tèrmics, el seu rendiment no és limitat pel Cicle de Carnot.

Hi ha diferents tipus de piles de combustible, que es distingeixen per les característiques de l'electròlit i el catalitzador que utilitzen, així com per la seva mida i temperatura de funcionament.

Les piles de combustible d'alta temperatura són més adequades per a aplicacions estacionàries, a causa del seu pes i mida més grans. Tot i això, ofereixen una major eficiència i una vida útil més prolongada. Aquestes piles són especialment adequades per a aplicacions on la mida i el pes no són limitacions crítiques [18].

D'altra banda, hi ha piles de combustible més petites i d'activació ràpida, dissenyades per a sectors com el transport, on la lleugeresa i la compacitat són aspectes prioritaris. Un exemple d'aquest tipus

és la pila de combustible de Membrana d'intercanvi Protònic (PEM), que utilitza un electròlit especial per aconseguir una activació ràpida i un rendiment eficient.

En resum, les piles de combustible són dispositius electroquímics que converteixen hidrogen en energia elèctrica amb alta eficiència i baix impacte ambiental. Els diferents tipus de piles s'adapten a diverses aplicacions, ja sigui al sector estacionari o al transport, i ofereixen avantatges específics segons les necessitats de cada sector.

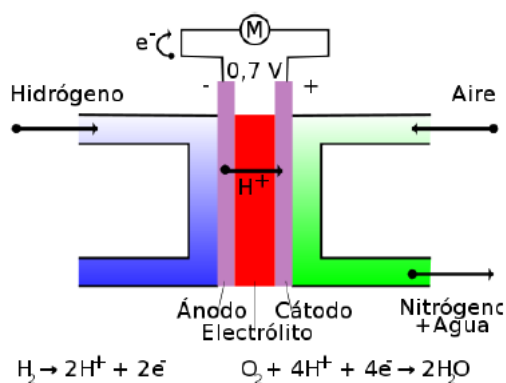


Figura 2: Representació esquemàtica d'una pila de combustible.

[https://es.wikipedia.org/wiki/Pila\\_de\\_combustible](https://es.wikipedia.org/wiki/Pila_de_combustible)

### 3.6.2. Indústria química

A l'indústria química, l'hidrogen pot ser utilitzat com a matèria prima per la producció d'una ampla varietat de compostos com amoníac, metanol i altres productes petroquímics. Aquests compostos són essencials per la fabricació de fertilitzants, productes farmacèutics i plàstics, entre d'altres.

### 3.6.3. Sector del transport

En aquest cas, s'utilitza com a combustible per vehicles mitjançant una pila de combustible d'hidrogen. Tot i que existeixen vehicles particulars amb aquest funcionament, pel moment l'opció més viable es centra en el transport pesat com autobusos i camions, ja que tenen suficient espai per emmagatzemar l'hidrogen necessari perquè aquests vehicles tinguin una autonomia de recorregut suficient perquè l'aplicació sigui viable. Aquestes cel·les ofereixen una major autonomia i temps de recàrrega més ràpids en comparació amb els vehicles elèctrics de bateria convencionals, el que els converteix en una alternativa prometedora a llarg termini per reduir les emissions i la dependència dels combustibles fòssils.

### 3.6.4. Emmagatzematge i transport d'energia

Com bé s'ha esmentat anteriorment, l'hidrogen pot ser produït a partir de fonts d'energia renovables, com l'energia solar o eòlica, majoritàriament, a partir de l'electròlisi de l'aigua. Aquesta electròlisi utilitza electricitat per descompondre l'aigua en hidrogen i oxigen. Aquest hidrogen resultant pot ser emmagatzemat i utilitzar posteriorment per generar electricitat en moments que la producció d'energia renovable és baixa, ajudant a superar fluctuacions i la intermitència d'aquestes fonts d'energia.

A més, l'hidrogen pot ser transportat a través de diferents medis, com canonades o camions cisterna, permetent transportar l'energia produïda d'una ubicació a una altra.

L'hidrogen emmagatzemat també pot ser utilitzat per generar electricitat a llocs on no és possible accedir directament a la xarxa elèctrica [19].

### 3.6.5. Sector metal·lúrgic

L'hidrogen té aplicacions a la indústria metal·lúrgica, especialment en la producció d'acer, per reduir el contingut de sofre en aquest metall, en la reducció directa del ferro, permetent obtenir un producte de ferro amb un contingut d'impureses baix i propietats físiques millorades en comparació amb el ferro obtingut mitjançant mètodes convencionals, i també en processos de tractament tèrmic de metalls, com el tremp i el reveniment. Durant aquests processos, l'hidrogen s'utilitza com atmosfera protectora per evitar l'oxidació i la descarburació dels metalls a altes temperatures. També té una funció similar a la soldadura, on s'utilitza com a gas de protecció per evitar l'oxidació del metall fos i millorar la qualitat de les juntes soldades.

### 3.6.6. Aplicacions espacials

En aquest cas s'utilitza l'hidrogen com propel·lent en coets espacials, ja que proporciona una alta densitat d'energia i un rendiment eficient en termes d'empenta i pes. L'hidrogen líquid s'utilitza als coets per l'exploració espacial i en el llançament de satèl·lits [20].

## 3.7. Emmagatzematge

### 3.7.1. Hidrogen comprimit

Aquest mètode implica l'emmagatzematge d'hidrogen a alta pressió en recipients dissenyats per suportar les altes pressions requerides. La pressió d'emmagatzematge típica oscil·la entre 350 i 700 bars, i l'hidrogen es comprimeix mitjançant compressors especialitzats. La principal avantatge de

L'emmagatzematge d'hidrogen comprimit és la seva simplicitat i baix cost. No obstant, la mida i la massa dels recipients d'emmagatzematge són significatives, el que limita el seu ús en aplicacions mòbils.

El mètode d'emmagatzematge d'hidrogen comprimit implica emmagatzemar l'hidrogen en forma gasosa i comprimida en dipòsits d'alta pressió, ja sigui en dipòsits mòbils o estacionaris a la superfície, o en caveres subterrànies. Aquests dipòsits han d'estar dissenyats per suportar altes tensions i cicles de càrrega i descàrrega, i utilitzen materials que no siguin susceptibles a la fragilització per hidrogen. A causa del petit mida de les molècules d'hidrogen, és important triar els materials adequats per evitar que l'hidrogen s'infiltri a través dels dipòsits. Hi ha diversos tipus de dipòsits segons el seu ús i ubicació [21].

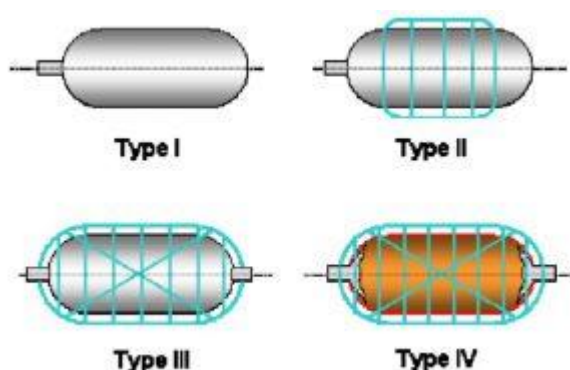


Figura 3: Tipus de dipòsits d'emmagatzematge d'hidrogen.

- El dipòsit Tipus I és un dipòsit sense costura fabricat amb acer o alumini, que pot operar amb pressions inferiors a 175 bar en el cas de l'alumini i no superiors a 200 bar en el cas de l'acer. A causa de les seves parets gruixudes, és un dipòsit molt pesat, i quan està ple, l'hidrogen emmagatzemat representa només el 1% del pes total. Tot i que és una opció econòmica, sovint s'utilitza en laboratoris.
- El dipòsit Tipus II és similar al Tipus I, però està reforçat amb materials compostos de fibra de carboni en la direcció de l'anell del dipòsit. Pot emmagatzemar hidrogen a pressions entre 700 i 1000 bar, i s'utilitza habitualment en hidrogeneres.
- Els dipòsits Tipus III tenen una làmina metàl·lica interna, amb o sense costures, per evitar fuites d'hidrogen per difusió, i estan recoberts amb materials compostos disposats en diferents direccions. Són capaços de suportar fins a 700 bar, i a causa que les seves parets són més primes, el seu pes és molt menor que el dels dipòsits Tipus I i Tipus II esmentats anteriorment.
- El dipòsit Tipus IV té un revestiment intern de material plàstic i està reforçat amb fibres de carboni en totes les direccions. A vegades, també estan recoberts externament amb vidre per protegir la part exterior. Són capaços de suportar al voltant de 700 bar, són molt lleugers i

l'hidrogen emmagatzemat representa al voltant del 11,3% del pes total del dipòsit quan està ple.

### 3.7.2. Hidrogen líquid

L'emmagatzematge d'hidrogen líquid és una opció atractiva per a la seva utilització com a combustible, ja que el seu volum es redueix considerablement en estat líquid, permetent així un major emmagatzematge d'aquesta energia. Aquest procés es duu a terme a través de la refrigeració de l'hidrogen gasós a temperatures inferiors als  $-253\text{ °C}$ , moment en el qual es converteix en líquid. Aquest procés de refrigeració és energèticament intensiu i requereix tecnologies avançades per mantenir les condicions necessàries per a l'emmagatzematge [22].

Els dipòsits per a l'emmagatzematge d'hidrogen líquid es fabriquen amb materials aïllants que eviten que l'energia tèrmica entri o surti del dipòsit.



*Figura 4: Transport d'hidrogen mitjançant portadors líquids*

A més, l'emmagatzematge d'hidrogen en estat líquid requereix un control constant de la temperatura per mantenir-lo en aquest estat. Això és especialment important durant la càrrega i la descàrrega del dipòsit, ja que les fluctuacions de temperatura poden afectar la quantitat d'hidrogen que es pot emmagatzemar.

Malgrat els reptes que presenta l'emmagatzematge d'hidrogen líquid, és una opció atractiva per als usos que requereixen una alta densitat d'energia, com ara el transport. La seva capacitat de reduir el volum de l'hidrogen gasós en estat líquid el fa ideal per a aplicacions en què l'espai d'emmagatzematge és limitat.



### 3.7.3. Hidrogen emmagatzemat en materials

L'hidrogen es pot emmagatzemar en una gran varietat de materials sota diverses condicions de pressió i temperatura, en alguns casos amb materials que han estat processats químicament o per fisiorció [23].

#### - Emmagatzematge químic

L'emmagatzematge químic d'hidrogen és un procés que implica la combinació d'hidrogen amb altres elements o compostos per a formar un material d'emmagatzematge d'hidrogen. Aquest procés pot implicar la formació d'enllaços covalents forts entre l'hidrogen i altres elements com el carboni, el nitrogen o el magnesi. Els materials resultants es poden emmagatzemar en forma líquida o sòlida a temperatura i pressió ambient.

##### o Amoníac

L'emmagatzematge d'hidrogen en amoníac és una opció atractiva per a la seva utilització com a vector energètic. L'amoníac es produeix a gran escala i té una infraestructura de transport i emmagatzematge desenvolupada. A més, té un alt contingut d'hidrogen, del 17,6% en pes, i pot ser obtingut a partir d'energies renovables.

El procés d'emmagatzematge d'hidrogen en amoníac consisteix en la seva combinació amb nitrogen per formar amoníac en un reactor. L'amoníac líquid es pot emmagatzemar a pressions moderades, al voltant de 10-12 bar i a temperatures de -33 °C, el que el fa més segur i pràctic que l'emmagatzematge d'hidrogen en estat gasós comprimit o líquid.

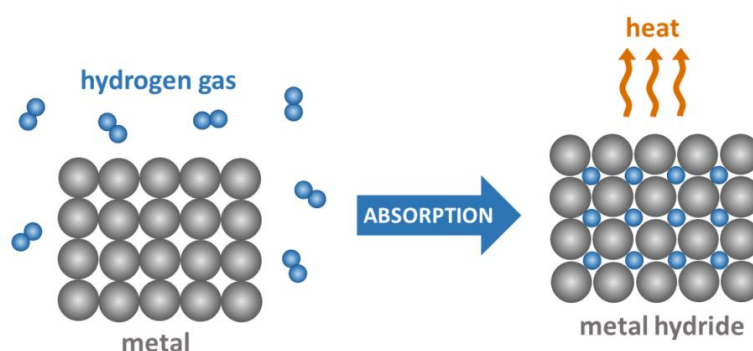
El principal inconvenient de l'emmagatzematge d'hidrogen en amoníac és que la conversió de l'amoníac en hidrogen implica la separació del nitrogen, la qual cosa requereix energia i pot reduir l'eficiència general del sistema. A més, també hi ha riscos relacionats amb la manipulació d'amoníac, ja que és un gas tòxic i altament reactiu.

En conclusió, l'emmagatzematge d'hidrogen en amoníac té potencial per a ser una opció viable per a l'emmagatzematge i transport d'hidrogen. No obstant això, és important tenir en compte els aspectes de seguretat i eficiència, així com la seva integració en les infraestructures existents.

##### o Hidrurs metàl·lics

Els hidrurs metàl·lics prototip solen estar compostos per dos elements. L'element "A" sol ser un metall de terres rares o de la sèrie dels alcalinoterris (com per exemple?) i

té tendència a formar hidrurs estables. L'element "B" és sovint un metall de transició i forma hidrurs inestables. El níquel és freqüentment utilitzat com a element B ja que és un excel·lent catalitzador per a la dissociació de l'hidrogen.



*Figura 5: Representació esquemàtica de l'emmagatzematge d'hidrogen en hidrurs metàl·lics. <https://www.hystorsys.no/our-story>.*

Alguns hidrurs metàl·lics absorbeixen i des absorbeixen hidrogen a temperatura ambient i prop de la pressió atmosfèrica, i la densitat volumètrica dels àtoms d'hidrogen presents en la matriu de l'hidruro és extremadament alta. S'ha arribat a una densitat volumètrica (massa d'hidrogen per unitat de volum d'hidruro) de 115 kg/m<sup>3</sup> en el cas de LaNi<sub>5</sub>H<sub>6</sub>. No obstant això, tots els hidrurs reversibles que funcionen a temperatura ambient i pressió atmosfèrica estan formats per metalls de transició, i per tant, la densitat volumètrica de l'hidrogen està limitada a menys del 3% en massa; per exemple, la densitat gravimètrica de l'hidrogen en LaNi<sub>5</sub>H<sub>6</sub> és només del 1,4%.

Els hidrurs metàl·lics són capaços d'absorbir hidrogen a través de reaccions químiques reversibles i emmagatzemar-lo en forma sòlida. A mesura que el gas d'hidrogen es bombeja a l'interior del material d'hidruro metàl·lic, els enllaços entre l'hidrogen i els metalls es debiliten, permetent que l'hidrogen s'infiltra en el material. A mesura que el material absorbeix l'hidrogen, aquest es combina amb els metalls per formar hidrurs metàl·lics. L'hidrogen és alliberat quan es necessita energia, com en una pila de combustible.



Figura 6: Ampolla d'emmagatzematge d'hidrurs metàl·lics utilitzada al laboratori.

El principal avantatge de l'emmagatzematge d'hidrogen en hidrurs metàl·lics és la seva alta densitat d'energia. En comparació amb l'emmagatzematge d'hidrogen en forma gasosa, l'emmagatzematge d'hidrogen en hidrurs metàl·lics pot proporcionar densitats d'energia més altes, la qual cosa significa que una quantitat major d'energia es pot emmagatzemar en un volum menor. A més, els hidrurs metàl·lics són relativament fàcils d'obtenir i manipular, el que els fa una opció atractiva per a l'emmagatzematge d'hidrogen en comparació amb altres tecnologies [24].

- Àcid fòrmic

L'emmagatzematge d'hidrogen per àcid fòrmic és una tecnologia que utilitza l'àcid fòrmic com a vector d'emmagatzematge d'hidrogen. Aquest procés implica la dissolució d'hidrogen en una solució d'àcid fòrmic per produir reformació d'hidrogen i aigua. El reformat d'hidrogen es pot separar de l'aigua i descomposar per produir hidrogen gasós quan és necessari [25].

El procés d'emmagatzematge per àcid fòrmic té avantatges com ara la alta densitat d'emmagatzematge de hidrogen, ja que l'àcid fòrmic té una alta capacitat de dissolució de hidrogen. També és una opció segura, ja que aquest és un líquid no inflamable i no tòxic. A més, el format de hidrogen produït a partir de l'àcid fòrmic es pot utilitzar directament en cel·les de combustible, motors de combustió interna i altres aplicacions de hidrogen.

Tot i així, el procés també té desavantatges com ara la necessitat de processos energètics addicionals per separar el format d'hidrogen de l'aigua i la necessitat de dissenyar sistemes que permetin l'emmagatzematge, la producció i el transport segurs d'àcid fòrmic. També cal considerar el cost econòmic i ambiental de la producció d'àcid fòrmic, ja que la major part del format d'hidrogen es produeix a partir de diòxid de carboni i hidrogen que es produeixen a partir de combustibles fòssils.

No obstant això, aquesta és una tecnologia emergent que podria proporcionar una alternativa prometedora per a l'emmagatzematge de hidrogen a llarg termini, ja que ofereix una solució de baixa emissió de carboni i segura per als problemes d'emmagatzematge i transport de hidrogen.

- Carbohidrats

Els carbohidrats (polímers  $C_6H_{10}O_5$ ) són els recursos biològics renovables més abundants i tenen una alta densitat d'emmagatzematge d'hidrogen en forma líquida, sense requerir altes pressions o condicions criogèniques, i també poden ser emmagatzemats en forma de pols sòlida. Recentment, els investigadors han aconseguit produir aproximadament 12 mols d'hidrogen per unitat de glucosa a partir de materials cel·lulòsics i aigua. A causa de la seva conversió completa i condicions de reacció moderades, els carbohidrats poden actuar com un portador d'hidrogen d'alta densitat energètica (14.8% en pes) [26].

- Portadors d'hidrogen líquid orgànic (LOHC)

Aquests són compostos orgànics insaturats capaços d'emmagatzemar grans quantitats d'hidrogen, amb densitats d'emmagatzematge gravimètric del voltant del 6% en pes. Els portadors líquids orgànics d'hidrogen (LOHCs) com l'*N*-etilcarbazol poden ser hidrogenats/deshidrogenats quan cal energia [27].

- **Fisorció**

L'emmagatzematge d'hidrogen per fisorció és un procés en què l'hidrogen s'adhereix a la superfície d'un material mitjançant forces de Van der Waals. Aquest procés ocorre a temperatura ambient i a pressions moderades, el que el converteix en una tècnica d'emmagatzematge molt prometedora degut a la seva simplicitat i baix cost.

Els materials porosos, com els carbons activats, les zeolites i els metal-organic frameworks (MOFs), són excel·lents candidats per a l'emmagatzematge d'hidrogen per fisorció. Aquests materials tenen una gran superfície específica i una alta capacitat d'adsorció, el que els permet emmagatzemar grans quantitats d'hidrogen en la seva estructura porosa.

La fisorció d'hidrogen en els materials porosos és reversible i no requereix de reaccions químiques per al seu emmagatzemament o alliberament. No obstant, la quantitat d'hidrogen que es pot emmagatzemar en aquests materials és limitada, el que els fa adequats per a aplicacions que requereixen una petita quantitat d'hidrogen, com ara en petites cel·les de combustible o en vehicles de curt abast.

Un dels majors desafiaments en l'emmagatzematge d'hidrogen per fisiorció és millorar la capacitat d'emmagatzematge dels materials porosos sense comprometre la seva estabilitat tèrmica i química. Els científics estan treballant en la síntesi de materials porosos amb estructures i composicions optimitzades per a millorar la seva capacitat d'adsorció d'hidrogen [28].

Tot i que la fisiorció d'hidrogen en materials porosos és una tècnica d'emmagatzematge molt prometedora, encara es necessita més recerca i desenvolupament tecnològic per fer-la comercialment viable i competitiva en termes de cost i eficiència en comparació amb altres tècniques d'emmagatzematge d'hidrogen.

### 3.8. Comparació entre formes d'emmagatzematge

Mètode	Avantatges	Inconvenients
<b>Hidrogen comprimit</b>	<p>És la tecnologia amb més experiència, emmagatzematge estacionari a 50 bar i emmagatzematge en transport des de 350 a 700 bar.</p> <p>D'aquesta forma es pot transportar per carretera, ferrocarril, vaixell, avió i gasoductes.</p> <p>L'emmagatzematge subterrani resulta el més econòmic.</p>	<p>A baixes pressions, la quantitat d'hidrogen emmagatzemat és petita.</p> <p>La compressió de l'hidrogen fins a 350 bar consumeix al voltant del 20% d'energia continguda a l'hidrogen.</p> <p>La tecnologia a pressions molt altes encara està en desenvolupament.</p> <p>L'energia per unitat de volum emmagatzemada és molt menor en comparació amb els combustibles fòssils líquids.</p> <p>Els contenidors o cilindres són pesats.</p>
<b>Hidrogen líquid</b>	<p>Bon coneixement de la tecnologia, per l'ús de coets espacials.</p> <p>Un tanc estàndard emmagatzema sis vegades més hidrogen que aquest mateix a 700 bar.</p>	<p>La liquació (refredament a 20 K) és un procés que consumeix entre el 30% i el 40% de l'energia continguda a l'hidrogen.</p> <p>Gran preocupació amb l'evaporació <i>flash</i> per raons d'eficiència i seguretat.</p>

	És el mètode més econòmic per l'emmagatzematge a llarg termini.	L'energia emmagatzemada per unitat de volum és menor respecte els combustibles fòssils líquids.
<b>Hidrogen emmagatzemat en materials</b>	<p>Major densitat d'emmagatzematge.</p> <p>L'hidrogen emmagatzemat en materials es pot alliberar a demanda, el que permet un subministrament constant d'hidrogen.</p> <p>Els materials d'emmagatzematge es poden transportar i distribuir de manera més segura en comparació amb l'hidrogen comprimit o líquid.</p>	<p>L'eficiència de l'emmagatzematge és baixa en comparació amb altres mètodes, el que significa que es necessita més energia per emmagatzemar l'hidrogen.</p> <p>L'alliberament de calor pot ser un problema.</p> <p>Alguns materials poden ser costosos i/o tòxics.</p>

*Taula 1: Comparació entre formes d'emmagatzematge*

## 4. Tancs d'hidrurs metàl·lics

Els tancs d'hidrurs metàl·lics s'han convertit en una opció important per a l'emmagatzematge d'hidrogen degut a la seva alta densitat d'emmagatzematge i la seva capacitat per a emmagatzemar hidrogen de manera segura i eficient. Aquests tancs estan dissenyats per a contenir materials d'hidrurs metàl·lics, que poden dur a terme l'absorció i desorció de l'hidrogen a pressions i temperatures moderades.

La recerca sobre l'emmagatzematge d'hidrogen en hidrurs metàl·lics va començar en la dècada de 1970, quan es va descobrir que alguns materials d'hidrurs metàl·lics podien absorbir i alliberar hidrogen en condicions moderades de temperatura i pressió. Aquests tancs estaven fets d'aliatges de terres rares, com ara l'aliatge de LaNi<sub>5</sub>, i es van usar per a emmagatzemar hidrogen en aplicacions mòbils i estacionàries. En aquells temps, la capacitat d'emmagatzematge d'hidrogen d'aquests tancs era bastant limitada, i també sofrien de problemes d'alliberament de calor durant la càrrega i descàrrega d'hidrogen [30].

Un dels primers estudis sobre l'emmagatzematge d'hidrogen en hidrurs metàl·lics va ser realitzat per L. Schlapbach i A. Züttel el 1998, els qui van demostrar la capacitat dels hidrurs metàl·lics per a emmagatzemar hidrogen en un estat sòlid. Des de llavors, s'han realitzat nombrosos estudis sobre els hidrurs metàl·lics i la seva capacitat d'emmagatzematge d'hidrogen.

En la dècada dels 2000, els investigadors van començar a desenvolupar nous tancs d'hidrurs metàl·lics per a l'emmagatzematge d'hidrogen. Un dels primers dissenys va ser desenvolupat per l'empresa francesa TechnoFutur Industries en col·laboració amb l'Institut d'Energia Solar de la Universitat Politècnica de Catalunya. Aquest tanc va utilitzar una matriu d'hidrurs metàl·lics per a absorbir i alliberar hidrogen i va ser dissenyat per al seu ús en aplicacions de vehicles.

Des d'aleshores, s'han desenvolupat i millorat diversos dissenys de tancs d'hidrurs metàl·lics, incloent-hi tancs de llit fix, tancs de llit fluïditzat i tancs d'absorció. A més, s'han dut a terme nombrosos estudis sobre l'optimització dels materials d'hidrurs metàl·lics per a l'emmagatzematge d'hidrogen i la millora de l'eficiència dels tancs d'hidrurs metàl·lics [31].

L'emmagatzematge d'hidrogen en un tanc d'hidrurs metàl·lics es basa en la capacitat d'uns certs metalls i aliats d'hidrurs metàl·lics per a adsorbir i alliberar hidrogen de manera reversible. Quan s'exposa hidrogen a un metall, l'hidrogen s'adsorbeix a la superfície i penetra dins del material, formant enllaços químics amb els àtoms del metall per a formar l'hidrur metàl·lic.

Durant aquest procés, l'hidrogen s'emmagatzema a l'interior del tanc i es manté en forma sòlida a temperatura ambient i pressions relativament baixes. Quan es necessita utilitzar l'hidrogen, s'escalfa

el tanc d'hidrurs metàl·lics, la qual cosa fa que l'hidrogen s'alliberi del material en forma de gas. Aquest procés de desorció és reversible, cosa que significa que l'hidrogen pot ser absorbit i alliberat diverses vegades sense perdre les seves propietats.

La capacitat d'un tanc d'hidrurs metàl·lics per a emmagatzemar hidrogen depèn de diversos factors, com la composició de l'hidrur metàl·lic, la temperatura i la pressió d'emmagatzematge. A més, la capacitat d'absorció i desorció de l'hidrogen pot disminuir amb el temps degut a la degradació del material, la qual cosa limita la vida útil del tanc d'hidrurs metàl·lics [32].

En el procés d'emmagatzematge, l'hidrogen s'absorbeix a l'estructura cristal·lina del metall, formant un compost d'hidrur metàl·lic. El procés d'absorció es produeix mitjançant una reacció reversible entre metall i hidrogen:



On M representa metall i x és el nombre d'àtoms d'hidrogen que s'uneixen al metall per formar el compost. La quantitat d'hidrogen que es pot emmagatzemar a l'hidrur metàl·lic depèn del nombre d'àtoms d'hidrogen que puguin combinar amb el metall per formar el compost.

El procés d'absorció d'hidrogen a l'hidrur metàl·lic es produeix a temperatures i pressions moderades, cosa que el fa adequat per a aplicacions d'emmagatzematge d'hidrogen de baixa pressió. Quan es necessita hidrogen emmagatzemat, es deixa anar per una reacció inversa:



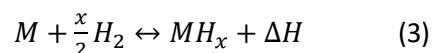
Aquesta alliberació d'hidrogen es produeix a temperatures i pressions lleugerament superiors a les d'absorció.



## 5. Model matemàtic del tanc d'hidrurs metàl·lics

Primerament es modela un contenidor d'emmagatzematge d'hidrur metàl·lic bidimensional per analitzar els fenòmens físics clau que succeeixen durant l'absorció de l'hidrogen.

La reacció de l'hidrogen i el metall és la següent:



On M representa el metall,  $MH_x$  és l'hidrur i x el rati d'hidrogen que es transforma en metall. Finalment,  $\Delta H$  és la quantitat de calor de la reacció per cada molècula [33] [34] [35][36].

### 5.1. Suposicions del model

A continuació, enumerarem les suposicions [17] més estàndard que es fan alhora de formular els models matemàtics per a la descripció de l'emmagatzematge d'hidrogen en tancs d'hidrurs metàl·lics (HM):

1. La fase gasosa es considerarà un gas ideal a les pressions que es consideren a aquest treball.
2. L'hidrur metàl·lic serà tractat com isotròpic i medi porós homogeni.
3. S'assumeix equilibri tèrmic local entre el metall sòlid i l'hidrogen gasós. Això significa que les temperatures del gas i del metall dins del recipient seran les mateixes.
4. L'expansió volumètrica del HM durant l'absorció serà negligible.
5. Les propietats de l'HM com la porositat, la permeabilitat i la conductivitat tèrmica es mantindran constants durant el procés d'absorció.

### 5.2. Equacions de conservació del model general

Seguint les suposicions anteriors, el contenidor d'HM està regit per la conservació de la massa, la conservació del moment i la conservació d'energia.

#### 5.2.1. Conservació de la massa

Per l'hidrogen l'equació de conservació de la massa és

$$\varepsilon \frac{\partial \rho^g}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho^g \vec{u}) = -S_m \quad (4)$$

On  $\varepsilon$  és la porositat del material,  $\rho^g$  la densitat de l'hidrogen i  $\vec{u}$  la velocitat de Darcy del gas. La densitat del gas es relaciona amb la temperatura i la pressió a partir de la llei dels gasos ideals. Finalment,  $S_m$  descriu la reacció que es dona quan l'hidrogen gas entra en contacte amb el metall que es transforma en HM.

Per l'HM l'equació de conservació de la massa és

$$(1 - \varepsilon) \frac{\partial \rho^m}{\partial t} = S_m \quad (5)$$

On es pot notar que, a diferència de l'equació (4), no hi ha terme d'advecció degut a que el metall és un sòlid.

### 5.2.2. Conservació del moment

La conservació del moment està modelada a partir d'una aproximació continua mitjançant les equacions de Navier Stokes - Brinkman. D'aquesta manera, el model proporciona un flux mig pel volum total, que és suficient si es considera un cabal en àrees grans.

$$\frac{\rho^g}{\varepsilon} \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} = -\nabla P + \nabla T - \frac{\mu}{K} \vec{u} - \frac{S_m}{\varepsilon^2} \vec{u} + \rho^g \vec{g} \quad (6)$$

On  $p$  és la pressió del gas,  $T$  la temperatura,  $\mu$  la viscositat i  $\vec{g}$  la gravetat. Tot i que alguns articles científics utilitzen les equacions de Navier Stokes - Brinkman [37] per descriure la conservació del moment, l'equació de govern per a la velocitat del gas en l'hidruir metàl·lic es pot simplificar mitjançant l'equació de Darcy

$$\nabla P = \frac{\mu}{K} \vec{V} \quad (7)$$

Aquesta equació descriu la variació de la velocitat d'un fluid en un medi porós degut a un gradient de pressió. La permeabilitat  $K$  representa la dificultat del fluid per propagar-se a través del medi porós.

### 5.2.3. Conservació de l'energia

Respecte al camp de temperatura, es suposa un equilibri tèrmic local entre la fase gasosa i l'HM sòlid, aleshores, l'equació de l'energia es pot expressar com una única variable de temperatura.

$$\rho \overline{C_p} \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla(\rho^g c_p^g \vec{u} T) = \nabla(k^{eff} \nabla T) + S_T \quad (8)$$

A l'equació (8), la capacitat calorífica efectiva ( $\rho \overline{C_p}$ ), i la conductivitat tèrmica efectiva ( $k^{eff}$ ) es poden expressar com funcions ponderades de porositat de les fases d'hidrogen i metall.

$$\rho \overline{C_p} = (1 - \varepsilon) \rho^m c_p^m + \varepsilon \rho^g c_p^g \quad (9)$$

$$k^{eff} = (1 - \varepsilon) k^m + \varepsilon k^g \quad (10)$$

Aquesta equació de conservació d'energia engloba tota l'ampolla d'HM, tant la part gasosa com la metàl·lica.

El segon terme,  $\nabla \cdot (\rho^g c_p^g \vec{u} T)$ , és el terme convectiu i descriu el transport de calor degut al moviment del fluid a través del medi porós. El primer terme de la part dreta de la igualtat,  $\nabla \cdot (k^{eff} \nabla T)$ , és el terme difusiu i descriu la difusió de la calor dins el tanc. L'últim terme,  $S_T$ , descriu la generació de calor deguda a la reacció de l'hidrogen amb el metall.

#### 5.2.4. Equacions per la reacció d'hidridació i van't Hoff

A la literatura, l'equació de govern per la quantitat transformada de metall,  $\alpha$ , pren diverses formes i moltes vegades depèn de les característiques de l'experiment concret que es vol modelitzar [38] [39].. Típicament, aquesta equació té la següent estructura

$$\frac{d\alpha}{dt} = A \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \left(\frac{p-p_{eq}}{p_{eq}}\right) g(\alpha) \quad (11)$$

on la funció  $g(\alpha)$  conté informació sobre la dinàmica concreta de la reacció química. En el cas més senzill,  $g(\alpha) = 1 - \alpha$ . El terme exponencial descriu com l'hidrogen ha de vèncer una certa energia d'activació per tal de ser absorbit al metall i que la reacció tingui lloc. Com més alta la temperatura més fàcilment tindrà lloc la reacció. El factor preexponencial  $A$  es troba mitjançant ajustos estadístics amb les dades experimentals [38] [39]. El terme de pressions indica que com més gran sigui la diferència entre la pressió del tanc (és a dir, la pressió de l'hidrogen en estat gasós),  $p$ , i la pressió d'equilibri de la reacció,  $p_{eq}$ , més ràpida serà la reacció.

La pressió d'equilibri a la qual té lloc la reacció química és en si mateixa una funció de la temperatura. En concret, la pressió d'equilibri està descrita per l'equació de van't Hoff

$$p_{eq} = p_0 \exp\left(\frac{\Delta H}{RT} - \frac{\Delta S}{R}\right) \quad (12)$$

on  $p_0$  és una pressió de referència, per exemple, la pressió a l'inici de l'experiment,  $\Delta H$  és l'entalpia de la reacció i  $\Delta S$  l'entropia de la reacció.

Cal notar que l'acoplament d'aquestes equacions amb les demés equacions de govern fa que el model sigui molt complex de resoldre, fins i tot, numèricament. I posa de manifest la necessitat de reduir i simplificar el model per fer-lo més tractable matemàticament.

### 5.3. Equacions de conservació del model 1D i condicions de contorn

Per simplificar la modelització matemàtica, s'ha optat per transformar el model general descrit anteriorment a un model unidimensional. El motiu de la simplificació és que el model es redueix a la direcció axial, sense tenir en compte la direcció radial, com si que la tenia en compte el model general. Tot i així, les suposicions són les mateixes que en el model matemàtic general.

#### 5.3.1. Conservació de la massa

Per l'hidrogen:

$$\varepsilon \frac{\partial \rho^g}{\partial t} + \frac{\partial \rho^g u_z}{\partial z} = -S_m \quad (13)$$

Per l'HM:

$$(1 - \varepsilon) \frac{\partial \rho^m}{\partial t} = S_m \quad (14)$$

#### 5.3.2. Conservació del moment

L'equació de Darcy en la direcció axial és

$$\frac{\partial P}{\partial z} = \frac{\mu}{K} V_z \quad (15)$$

On  $V_z$  és la velocitat mitjana del fluid en tot el volum i es podria expressar com  $\varepsilon u_z$ , per tant:

$$\frac{\partial P}{\partial z} = \frac{\mu}{K} \varepsilon u_z \quad (16)$$

On  $u_z$  és la velocitat mitjana del fluid a través del medi porós en la direcció z.

#### 5.3.3. Conservació de l'energia

L'equació de govern per la temperatura és

$$\rho \overline{C_p} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} (\rho^g c_p^g u_z T) = \frac{\partial}{\partial z} \left( k^{eff} \frac{\partial T}{\partial z} \right) + S_T \quad (17)$$

Com que  $k^{eff}$  es considera constant,

$$\rho \overline{C_p} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} (\rho^g c_p^g u_z T) = k^{eff} \frac{\partial^2}{\partial z^2} (T) + S_T \quad (18)$$

On,

$$\rho \bar{C}_p = (1 - \varepsilon) \rho^m c_p^m + \varepsilon \rho^g c_p^g \quad (19)$$

$$k^{eff} = (1 - \varepsilon) k^m + \varepsilon k^g \quad (20)$$

## 5.4. Model matemàtic reduït

En aquesta secció es formularà un model matemàtic simplificat per donar explicació als fenòmens més rellevants observats als experiments. Concretament, es focalitzaran els esforços en reproduir l'evolució de la temperatura del tanc i de la fracció emmagatzemada d'hidrogen, i es deixarà de banda l'evolució de la pressió, densitat i velocitat de l'hidrogen en el medi porós.

En primer lloc, per tal de reduir la complexitat del problema, les densitats i els calors específics de l'hidrur metàl·lic i del gas es consideren constants. La velocitat del gas es considera una funció lineal que decreix, assumint que és zero a la base del tanc i que té el seu valor màxim a l'entrada del tanc. És a dir,  $u = u_0 \frac{(L-z)}{L}$ . En segon lloc, apel·lant a la simetria radial del problema, es considera l'equació de la calor promitjada en les seccions transversals del tanc

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\rho^g c_p^g}{(1-\varepsilon)\rho^m c_p^m + \varepsilon \rho^g c_p^g} \frac{\partial}{\partial z} (u T) = \alpha_T \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \frac{2h(T_0 - T)}{R((1-\varepsilon)\rho^m c_p^m + \varepsilon \rho^g c_p^g)} + \frac{\rho_m w t (1-\varepsilon) \Delta H}{((1-\varepsilon)\rho^m c_p^m + \varepsilon \rho^g c_p^g) M} \frac{d\alpha}{dt} \quad (21)$$

on  $T$  és la temperatura mitjana a les seccions transversals,  $R$  és el radi del tanc,  $h$  el coeficient de transferència de calor del tanc amb l'aire i  $\alpha_T = k_{eff} / ((1 - \varepsilon) \rho^m c_p^m + \varepsilon \rho^g c_p^g)$  representa la difusivitat tèrmica efectiva del tanc. El segon terme a la dreta de la igualtat descriu la transferència de calor per convecció del tanc a través de les parets laterals [40].

En la secció anterior, s'ha descrit la dependència no-lineal de la velocitat de la reacció,  $k$ , respecte de la pressió i de la temperatura de l'hidrogen. Per tal de simplificar aquesta dependència, en primera instància es considerarà que aquesta velocitat és constant. Després, per tal de reproduir alguna de les característiques observades als experiments, es considerarà que aquesta velocitat de reacció és una funció lineal de l'espai. Per tant, l'equació de govern que descriu la reacció metall-hidrur metàl·lic es redueix a

$$\frac{d\alpha}{dt} = k(z)(1 - \alpha) \quad (22)$$

on  $k(z) = k_0$ , o bé  $k(z) = k_0[1 + (2z/L)]/2$ .

### 5.4.1. Condicions de contorn i inicials

Considerem condicions de contorn convectives per a la temperatura als contorns  $z = 0$  i  $z = L$  del domini, per tant

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial z} = h(T_0 - T) \quad a \quad z = 0 \quad (23)$$

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial z} = h(T - T_0) \quad a \quad z = L \quad (24)$$

Inicialment, el tanc conté quantitats petites d'hidrur metàl·lic de càrregues anteriors,  $\alpha_0$ . Per altra banda, la temperatura del tanc a l'inici dels experiments és igual a la temperatura de l'aire del laboratori. Per tant, les condicions inicials son

$$T(z, 0) = T_0 \quad (25) \quad i \quad \alpha(z, 0) = \alpha_0 \quad (26)$$

## 5.5. Adimencionalització

L'objectiu d'aquesta secció és transformar el model reduït en un model adimensional per tal d'analitzar quins termes son dominants en les equacions de govern i per facilitar la resolució numèrica del model. Introduint les variables adimensionals

$$\hat{z} = \frac{z}{\Delta L} \quad (27) \quad \hat{t} = \frac{t}{\Delta t} \quad (28) \quad \hat{T} = \frac{T - T_0}{\Delta T} \quad (29)$$

a les equacions de govern, i agafant les escales característiques de temps, longitud i temperatura següents

$$\Delta L = \sqrt{\alpha_T \Delta t} \quad (30) \quad \Delta t = \frac{1}{k_0} \quad (31) \quad \Delta T = \frac{wt \Delta H}{c_{p,m} M} \quad (32)$$

s'obté, eliminant la notació de barrets “^”, el sistema d'equacions adimensional

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \delta_1 \frac{\partial}{\partial z} (u(1 + \delta_2 T)) = \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} - \delta_3 T + \frac{d\alpha}{dt} \quad (33)$$

$$\frac{d\alpha}{dt} = f(z)(1 - \alpha) \quad (34)$$

on  $f(z) = 1$  en el cas d'una velocitat de reacció constant, o bé  $f(z) = [1 + (2z/l)]/2$  en el cas de velocitat de reacció amb distribució espacial. Els paràmetres adimensionals

$$\delta_1 = \frac{\epsilon c_{p,g} u_0 \rho_{g,0} T_0 \Delta t}{(1 - \epsilon) \rho_m c_{p,m} \Delta L \Delta T} \quad (35) \quad \delta_2 = \frac{\Delta T}{T_0} \quad (36) \quad \delta_3 = \frac{2h\Delta t}{R(1 - \epsilon)\rho_m c_{p,m}} \quad (37)$$

representen, la raó entre les longituds característiques d'advecció i difusió, el creixement de temperatura relatiu a la temperatura inicial i la importància relativa de la pèrdua de calor per convecció per les parets laterals respecte la conducció del material. Les condicions de contorn esdevenen

$$Bi^{-1} \frac{\partial T}{\partial z} = T \quad a \quad z = 0 \quad (38)$$

$$- Bi^{-1} \frac{\partial T}{\partial z} = T \quad a \quad z = l \quad (39)$$

on  $Bi^{-1} = \lambda/\Delta L h$  és el nombre de Biot invers, indicant la importància relativa de la transferència de calor per conducció respecte de la convecció amb l'aire. Les condicions inicials són,

$$T(z, 0) = 0 \quad (40) \quad i \quad \alpha(z, 0) = \alpha_0 \quad (41)$$

Agafant els valors dels paràmetres de la Taula 2 s'obté  $\delta_1 = 0.07$ ,  $\delta_2 = 0.2$  i  $\delta_3 = 0.54$ . S'ha de fer notar que els valors reals dels paràmetres físics del model corresponents al tanc no son coneguts. A banda de la geometria del tanc, el fabricant no dona informació sobre quin metall o hidrur metàl·lic es troba a l'interior del tanc i, per tant, paràmetres molt importants com ara l'entalpia de reacció o la conductivitat tèrmica son desconeguts. En aquest estudi s'ha triat per agafar alguns paràmetres de la literatura i per la resta s'ha intentat triar valors representatius per tal de poder solucionar el model. Per tant, la comparació amb els experiments serà qualitativa i en cap cas es pot fer una comparació quantitativa entre model i experiments.

Els valors petits de  $\delta_1 = 0.07$  i  $\delta_2 = 0.2$  indiquen que la contribució del terme d'advecció a l'equació de la calor te una importància baixa. El terme de convecció a través de les parets laterals està multiplicat per  $\delta_3 = 0.54$ , indicant que te certa importància en termes globals. Cal notar que aquest terme és el terme principal a través del qual el tanc perd calor, a banda de la pèrdua de calor als extrems del domini mitjançant les condicions de contorn convectives. Els termes que no estan multiplicats per cap paràmetre adimensional son els termes més dominants en l'equació. Aquests, son els termes de difusió i el terme de reacció.

L'objectiu principal d'aquest treball no és el de fer un anàlisi matemàtic detallat de les equacions del model. Així doncs, s'ha optat per implementar una solució numèrica de les equacions del model mitjançant diferències finites. Aquesta implementació s'ha fet en Matlab a través d'un script fet a mida per aquest problema. Per simplicitat, l'esquema numèric utilitzat ha estat el *forward time centered space* (FTCS), triant passos de temps i espai per tal d'assegurar que es compleixen les condicions d'estabilitat de l'esquema.

Descripció	Variable	Unitats	Valor
Conductivitat tèrmica efectiva del medi	$k_{eff}$	W/m·K	9,5
calor específic del medi metall (solid)	$c_{p,s}$	J/kg·K	500
calor específic del medi hidrogen (gas)	$c_{p,g}$	J/kg·K	14000
densitat efectiva del metall/hidrur metàl·lic	$\rho^m$	Kg/m <sup>3</sup>	6000
porositat	$\epsilon$	-	0,44
constant dels gasos	$R$	J/mol·K	8,314
Fracció de massa d'hidrogen en hidrur metàl·lic	$wt$	-	0,0594
Massa molar hidrogen	$M$	Kg/mol	$2,0116 \cdot 10^{-3}$
Entalpia de reacció	$\Delta H$	J/mol	1000
Temperatura inicial	$T_0$	K	22 + 273,15
Pressió inicial	$P_0$	Pa	$0,1 \cdot 10^{-5}$
Velocitat de reacció - constant cinètica	$k_0$	m/s	$1 \cdot 10^{-3}$
Coefficient transferència calor (convecció)	$h$	W/m <sup>2</sup> ·K	5
Radi de l'ampolla	$r$	m	$1,1 \cdot 10^{-2}$

Taula 2: Paràmetres del model.

## 5.6. Resultats del model matemàtic

Tal i com es pot observar a la distribució de temperatures obtinguda a partir de la càmera tèrmica, els gradients de temperatura a dins del tanc son relativament petits. Essent relativament més grans en el cas del cabal de 0.38 l/min que en el cas de 0.08 l/min. Un altre tret característic és que el canvi absolut de temperatura  $T_{max}-T_{min}$  s'assoleix pel cabal 0.38 l/min. Mitjançant la solució numèrica del model s'intentaran reproduir aquests fenòmens.



En les Figures 7 i 8, presentem la distribució de temperatures i fracció reaccionada corresponent al cas en que es suposa la velocitat de reacció constant per un cabal de 0.38 l/min. El que es pot veure és que els perfils de temperatura son pràcticament simètrics respecte del centre del tanc. Això es degut a que l'únic terme que pot introduir algun tipus d'asimetria en la distribució de temperatura és el terme convectiu (mitjançant el perfil de velocitats linealment decreixent que s'ha utilitzat), però aquest té un pes específic petit respecte dels demás termes tal i com s'ha comentat en la secció 5.4. Així doncs, podem deduir que, molt probablement, els gradients de temperatura observats estiguin causats per la dependència de la velocitat de reacció,  $k$ , respecte de les demás variables del model (tal i com es mostra en l'equació general per  $\alpha$  en la secció del model general).

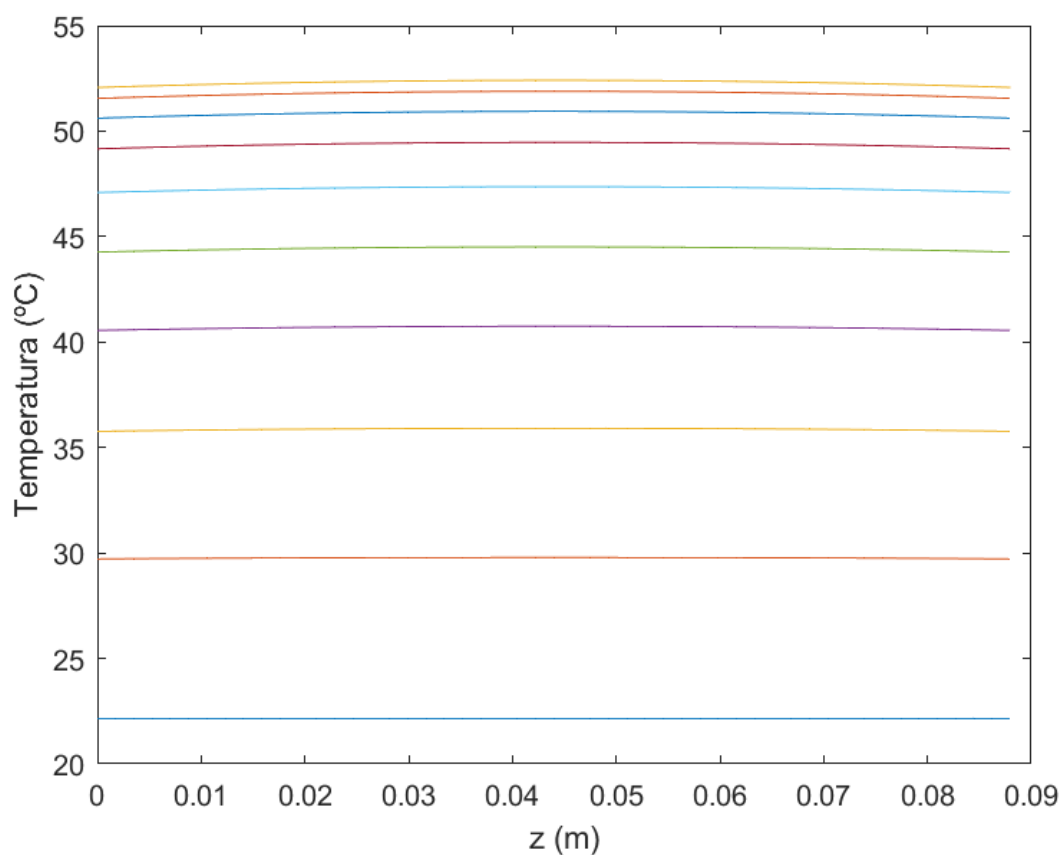


Figura 7: Perfils de temperatura a diversos temps

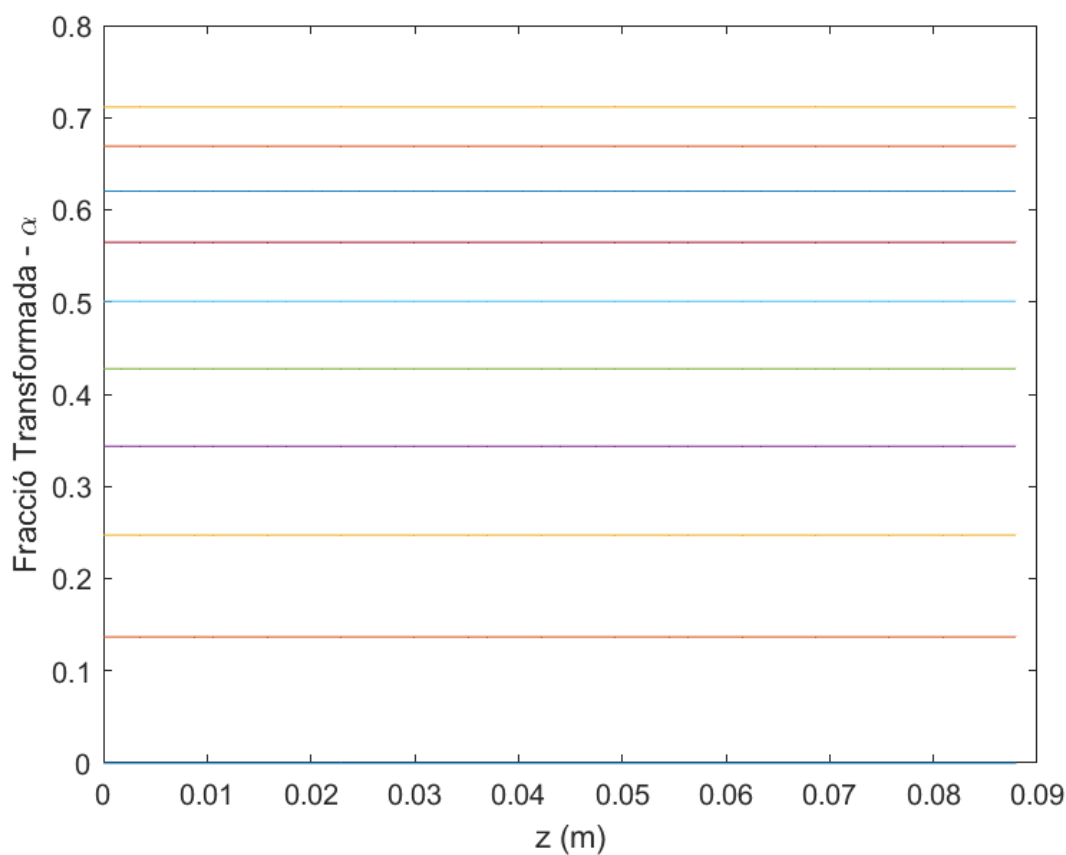


Figura 8: Fracció transformada a diversos temps

Per tal de veure quin efecte té una velocitat de reacció que varia en l'espai sobre la distribució de temperatures i fracció reaccionada es considera el cas en que  $k(z) = k_0[1 + (2z/L)]/2$ . Aquesta suposició no té una justificació forta des d'un punt de vista físic, simplement descriu una situació en que o bé el terme exponencial d'activació o bé el terme de pressions en l'equació general per  $\alpha$  introdueix una distribució espacial en la velocitat de reacció. De fet, aquesta variació de  $k$ , dona més pes a la reacció a la base del tanc, ja que en els experiments el que s'observa és que la temperatura és més alta en aquest extrem.

En les figures 9 i 10 es presenten resultats equivalents als de les figures 7 i 8 però en aquest cas suposant la velocitat de reacció variable. En la Figura 9, es pot veure com els perfils de temperatura s'assemblen més al que s'observa experimentalment en relació als gradients de temperatura dins del tanc. Per tant, una reacció  $k(z)$  com la que s'ha suposat, explica els gradients observats de temperatura als experiments. Per altra banda, a la figura 10 s'observa com la fracció reaccionada és més gran a la base del tanc que no pas a l'entrada. Això era d'esperar degut a la forma de  $k(z)$  proposada.

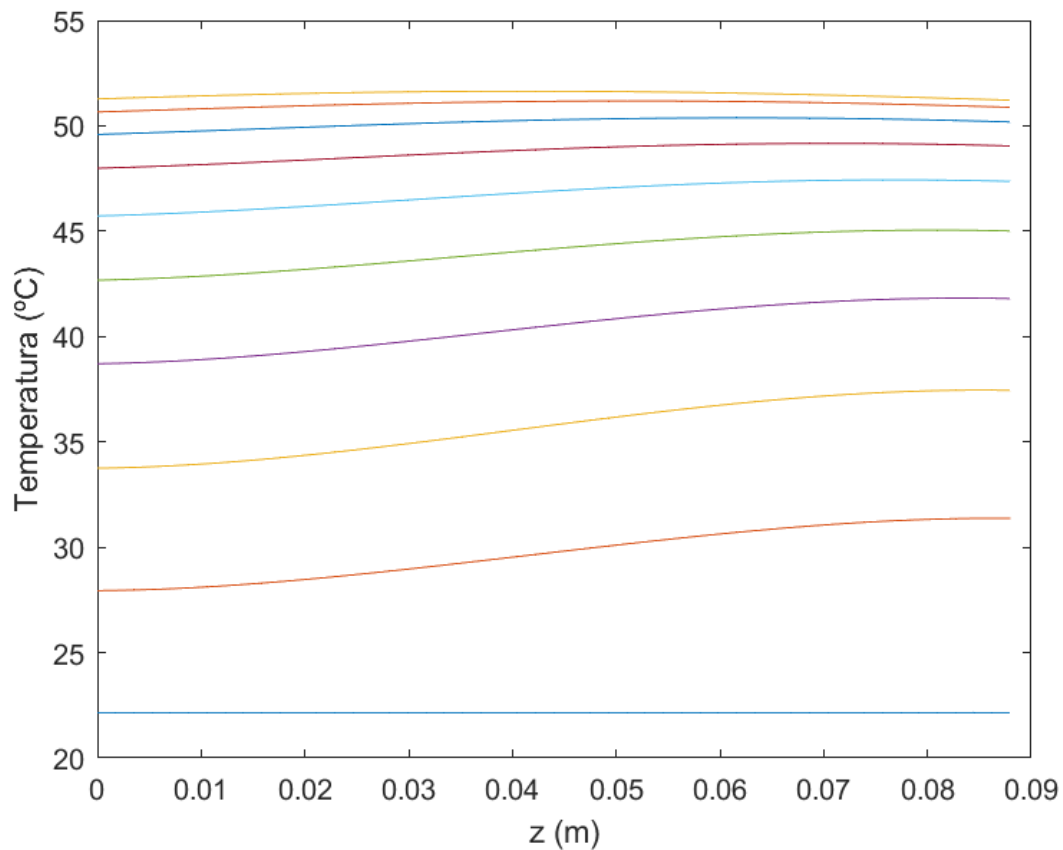


Figura 9: Perfils de temperatura per a diversos temps.

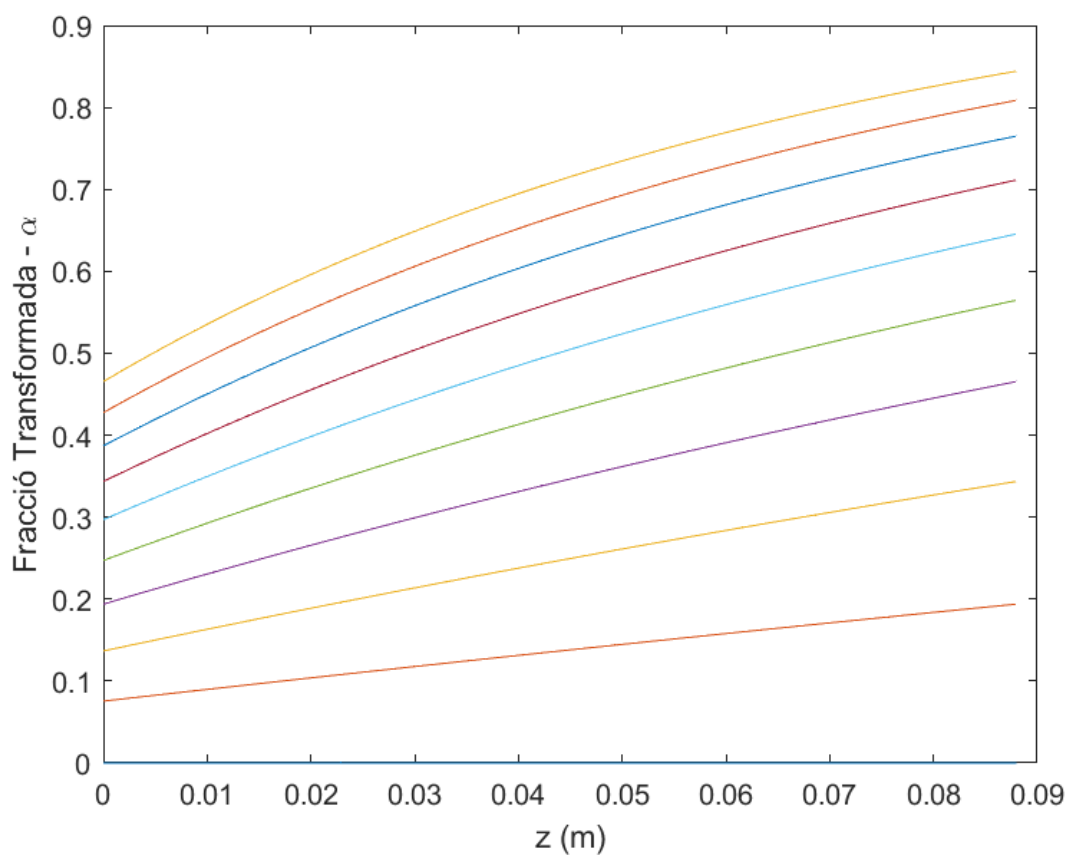


Figura 10: Fracció molar per a diversos temps

A la Figura 11 es mostra l'evolució de la temperatura al centre del tanc per als dos cabals estudiats. Es pot veure com la temperatura màxima assolida (o diferència absoluta  $T_{\max} - T_{\min}$ ) és més gran en el cas del cabal de 0,38 l/min que no pas en el cas del cabal de 0,08 l/min, tal i com s'observa als experiments dels capítols següents. Això és degut a la diferència en els valors de  $\delta_1$  diferents pels dos casos, que fa que en un cas el terme convectiu sigui una mica més important que en l'altre. Tot i així, veiem que en ambdós casos s'assoleix la temperatura màxima en instants de temps similars, contràriament al que succeeix als experiments. Això és clarament una qüestió important que el model no pot explicar i, probablement, la raó també estigui relacionada amb la forma reduïda que s'ha suposat per a la velocitat de la reacció. Aquesta doncs és una part a millorar en versions futures del model.

Cal especificar que les  $\delta_1$ ,  $\delta_2$  i  $\delta_3$  utilitzades en el model reduït han estat les del cas de 0,38 l/min. En el cas de 0,08 l/min,  $\delta_1$  té un valor menor, i això és el que explica que la pujada de T sigui més gran en el cas del cabal de 0,38 l/min.

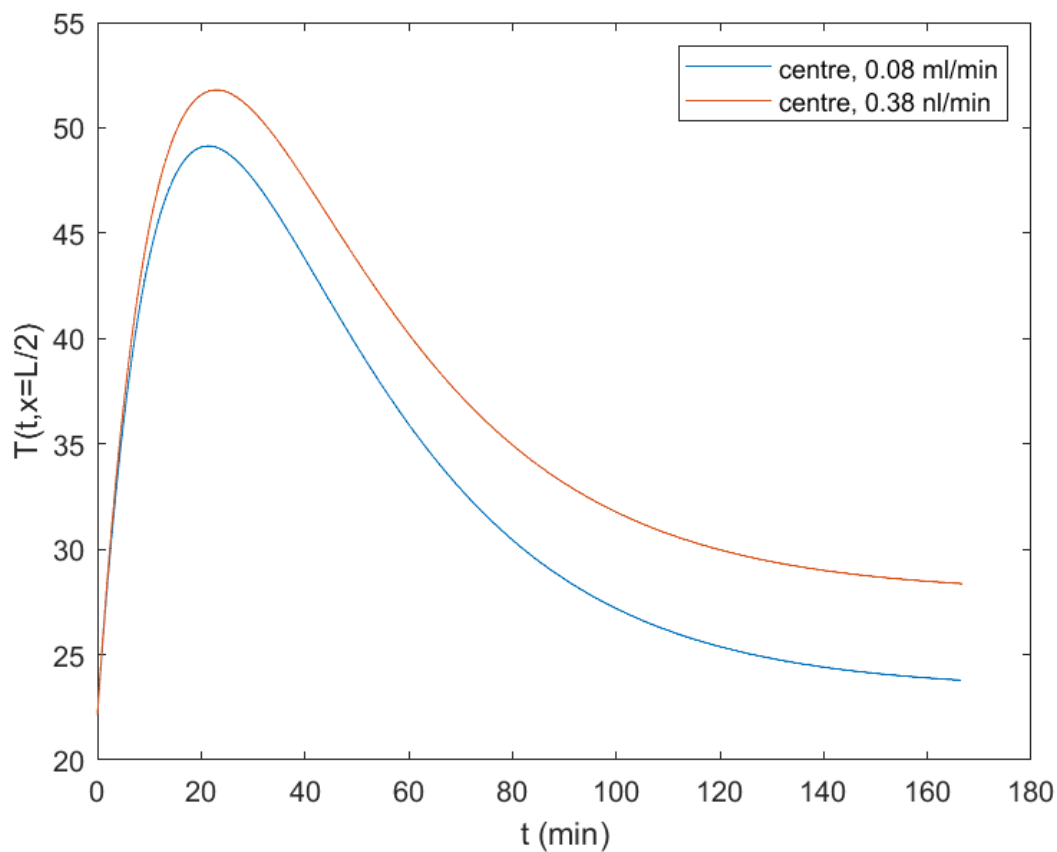


Figura 11: Temperatura del centre del tanc per a diversos temps.

## 6. Model experimental pel tanc d'hidrurs metàl·lics

### 6.1. Introducció del model experimental

En aquesta secció es presenta un muntatge experimental que té com a objectiu carregar un tanc d'hidrurs metàl·lics amb un cabal controlat i utilitzant una càmera tèrmica per monitoritzar la temperatura del sistema. L'experiment s'ha dut a terme amb l'objectiu d'estudiar el comportament del tanc d'hidrurs metàl·lics durant el procés de càrrega, i analitzar la influència de la pressió i la temperatura en la capacitat d'emmagatzematge d'hidrogen.

Una de les qüestions més importants en l'emmagatzematge d'hidrogen en tancs d'hidrurs metàl·lics és la gestió de la gran quantitat de calor alliberada durant la càrrega. Un dels objectius de l'experiment és el d'analitzar l'evolució i la distribució de temperatures en el tanc durant el procés de càrrega. La mesura experimental de la temperatura és complicada ja que no es pot accedir a l'interior del tanc per tal de col·locar-hi algun dispositiu de mesura. La càmera tèrmica permet obtenir una mesura aproximada de la distribució de la temperatura en la direcció axial del tanc. En seccions posteriors es presentarà un model matemàtic reduït amb el qual es podrà comparar els resultats de l'experiment, i ajudarà a donar explicació a algun dels fenòmens observats.

Per dur a terme l'experiment s'ha utilitzat una instal·lació de generació d'hidrogen, que consta d'un electrolitzador de membrana protònic (PEM) de la marca h2planet.



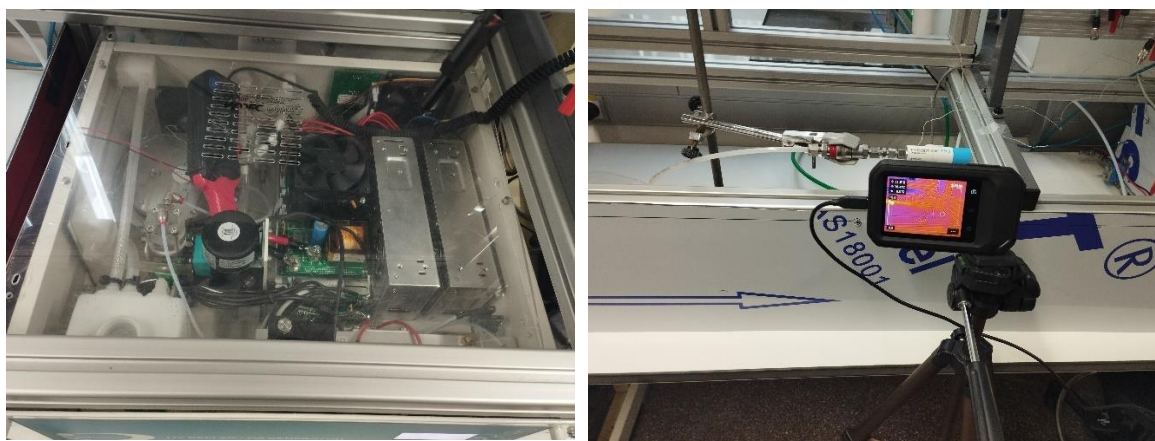
*Figura 12: Electrolitzador PEM h2planet*

Un electrolitzador de membrana d'intercanvi protònic (PEM) és un dispositiu que utilitza energia elèctrica per separar molècules d'aigua ( $H_2O$ ) en hidrogen ( $H_2$ ) i oxigen ( $O_2$ ). L'electrolitzador PEM

d'h2planet consta d'un conjunt de cel·les d'electròlisi connectades en sèrie. Cada cel·la està formada per dos elèctrodes, un anòdic i un altre catòdic, i una membrana electrolítica al mig.

Quan s'aplica un corrent elèctric a través de la cel·la, els ions d'hidrogen ( $H^+$ ) es desplacen cap a l'elèctrode catòdic, mentre que els ions d'oxigen ( $O_2^-$ ) es desplacen cap a l'elèctrode anòdic. A l'elèctrode catòdic, els ions d'hidrogen reaccionen amb els electrons rebuts de l'exterior i es formen molècules d'hidrogen ( $H_2$ ) gasós. A l'elèctrode anòdic, els ions d'oxigen reaccionen amb els electrons que han estat enviats per l'exterior per formar molècules d'oxigen ( $O_2$ ) gasós.

La membrana electrolítica té un paper important en el procés de separació dels gasos. Aquesta membrana és selectiva, permetent que només els ions d'hidrogen passin a través d'ella cap a l'elèctrode catòdic, mentre que els ions d'oxigen no poden passar i es mantenen al costat anòdic de la cèl·lula.



*Figura 13: Interior de l'electrolitzador PEM d'h2planet a l'esquerra, muntatge càmera termogràfica a l'esquerra.*

L'electrolitzador H2planet PEM utilitza una membrana d'intercanvi protònic d'alta eficiència que proporciona una separació efectiva dels gasos.

L'hidrogen en estat gasós surt de l'electrolitzador i passa per un regulador de cabal, que fa que aquest sigui constant. Seguidament entra al tanc. A l'entrada d'aquesta ampolla hi ha un sensor de pressió que permet monitoritzar la pressió d'entrada. La pressió d'entrada i la temperatura al centre del tanc s'han monitoritzat mitjançant el software LabView. Les temperatures de la part superior i inferior del tanc s'han registrat mitjançant imatges tèrmiques amb la càmera termogràfica Flir C3-X i el software Flir Thermal Studio.

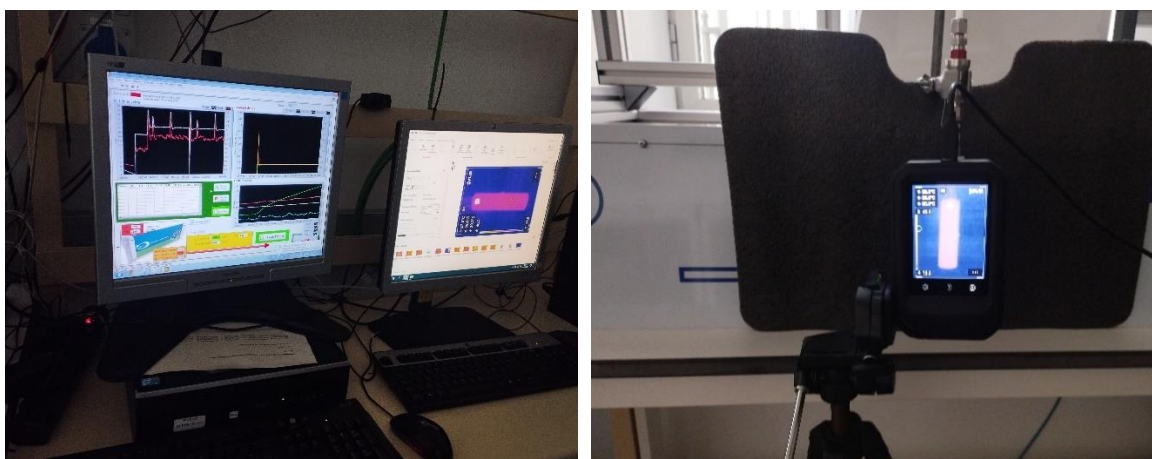


Figura 14: Monitoratge de les dades a l'esquerra. Càmera termogràfica Flir a la dreta.

## 6.2. Resultats del model experimental

Quan s'omple un tanc d'hidrurs metàl·lics amb hidrogen, l'hidrogen es propaga a través del tanc d'hidrurs metàl·lics tant en la direcció axial com en la direcció radial. A mesura que l'hidrogen penetra el metall, es produeix una reacció d'absorció, cosa que significa que els àtoms d'hidrogen són capturats i retinguts als llocs actius del metall. Aquesta absorció pot produir una disminució en la pressió i densitat de l'hidrogen al tanc a mesura que s'omple, ja que els àtoms d'hidrogen s'uneixen al material i ja no estan disponibles a la fase gasosa.

A mesura que es va omplint el tanc amb hidrogen, el metall va absorbint hidrogen. És a dir, es va convertint progressivament en un hidrur metàl·lic. Un cop s'ha convertit tot el metall en hidrur metàl·lic, ja no hi cap més hidrogen al metall. En aquest punt, el tanc es considera ple i s'ha assolit la capacitat màxima d'emmagatzematge d'hidrogen. Sovint, les parts més superficials de l'hidrur metàl·lic oposen resistència a la propagació de l'hidrogen cap a zones més interiors del metall, cosa que pot produir una disminució en la taxa d'absorció d'hidrogen i que es saturi l'absorció d'hidrogen sense haver pogut transformar tot el metall en hidrur metàl·lic.

### 6.2.1. Imatges de la càmera tèrmica amb cabal de 0,38 l/min

En aquest cas, només amb les imatges de la càmera termogràfica es pot veure com l'hidrogen comença convertir-se en HM a la oposada part més allunyada de l'entrada de l'ampolla. Aquest fenomen es detecta perquè quan succeeix, la temperatura del tanc augmenta en aquesta regió.

Com es pot veure a la figura 15 esquerra, la temperatura inicial del tanc és de 20,8°C. Un cop es deixa entrar hidrogen, es nota que la temperatura augmenta. A la imatge 15 dreta es pot veure la imatge del



tanc als 19 segons, on la temperatura al cul de l'ampolla ha augmentat fins a 23,6°C, però a la boca del tanc és de 21,5°C, ja que l'hidrogen ha començat a convertir-se en HM per la part d'abaix.

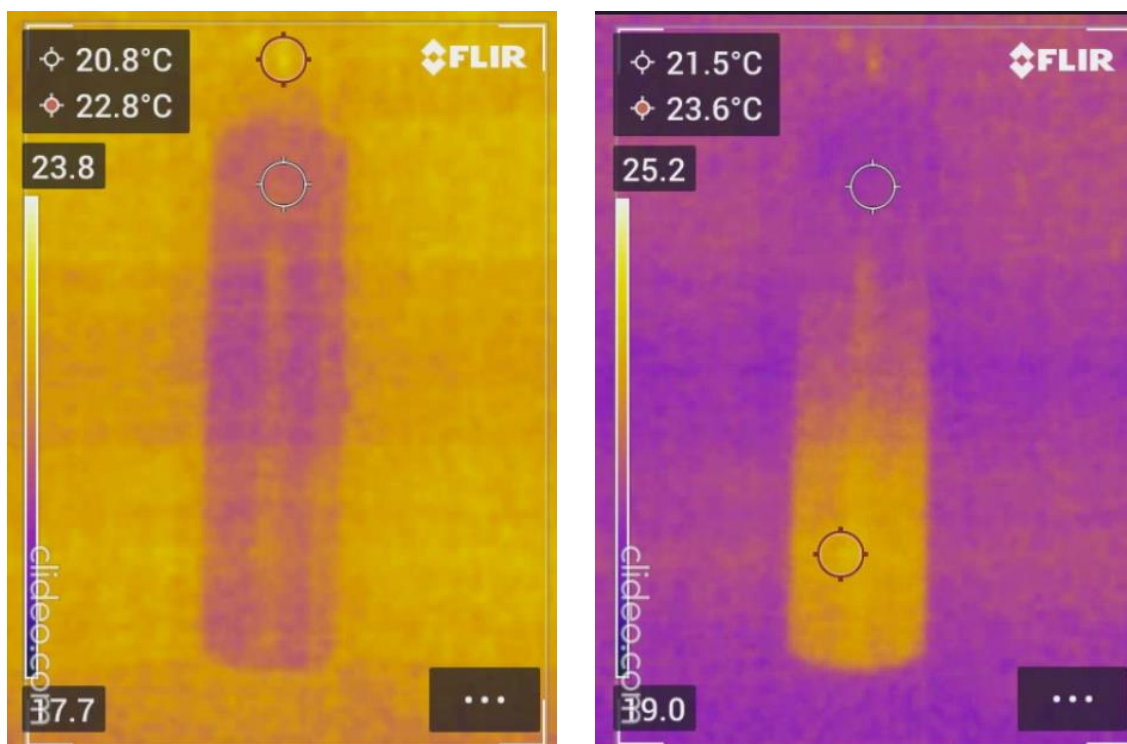


Figura 15. Imatges termogràfiques als instants 0s i 19s respectivament.

A mesura que el temps de l'experiment passa, totes les temperatures al llarg de l'eix axial de l'ampolla augmenten, però tant visualment com amb les dades extretes amb del tractament de les imatges amb Matlab, es posa de manifest que el tanc es va omplint, ja que tant la Tmax com la Tmin són més elevades.

A la figura 16 es veu que la temperatura màxima del tanc ha augmentat a 25°C als 40 segons i a 28,6°C als 64 segons. De la mateixa forma la temperatura de la boca de l'ampolla augmenta fins a 24,3°C als 64 segons.

A les mateixes imatges, visualment es percep que hi ha un augment gradual de temperatura al llarg de l'eix axial, és a dir, l'ampolla poc a poc va absorbint l'hidrogen gas per convertir-lo en HM.

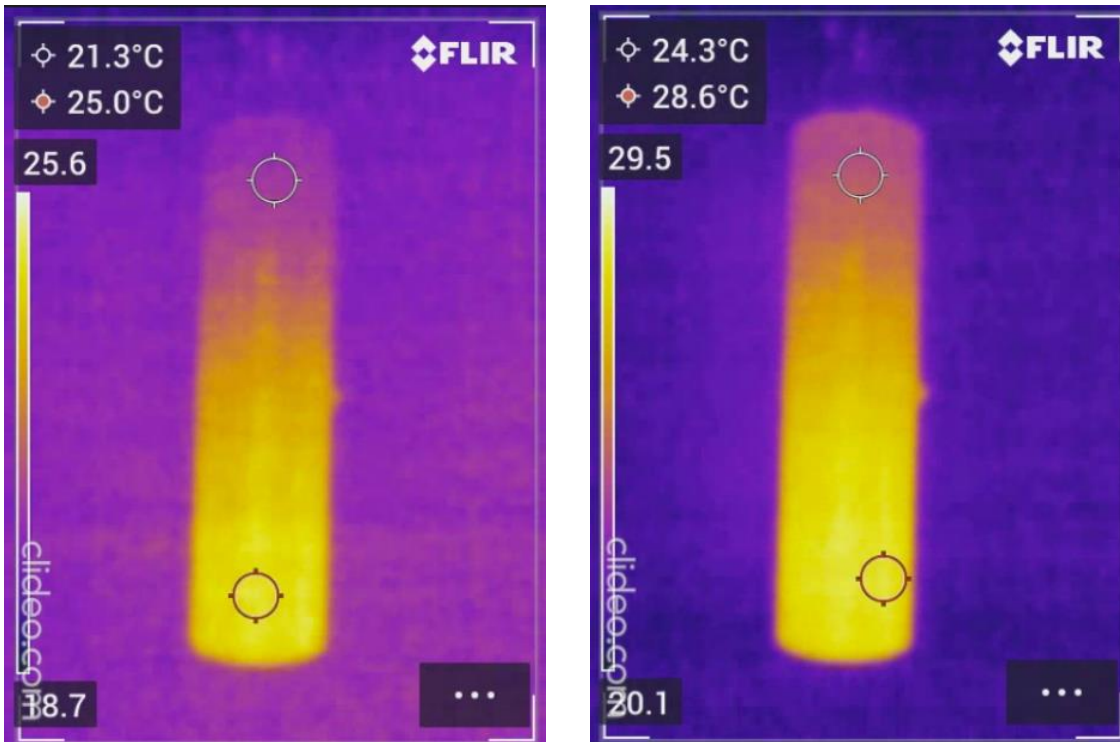


Figura 16: Imatges termogràfiques als instants 35s i 59s respectivament.

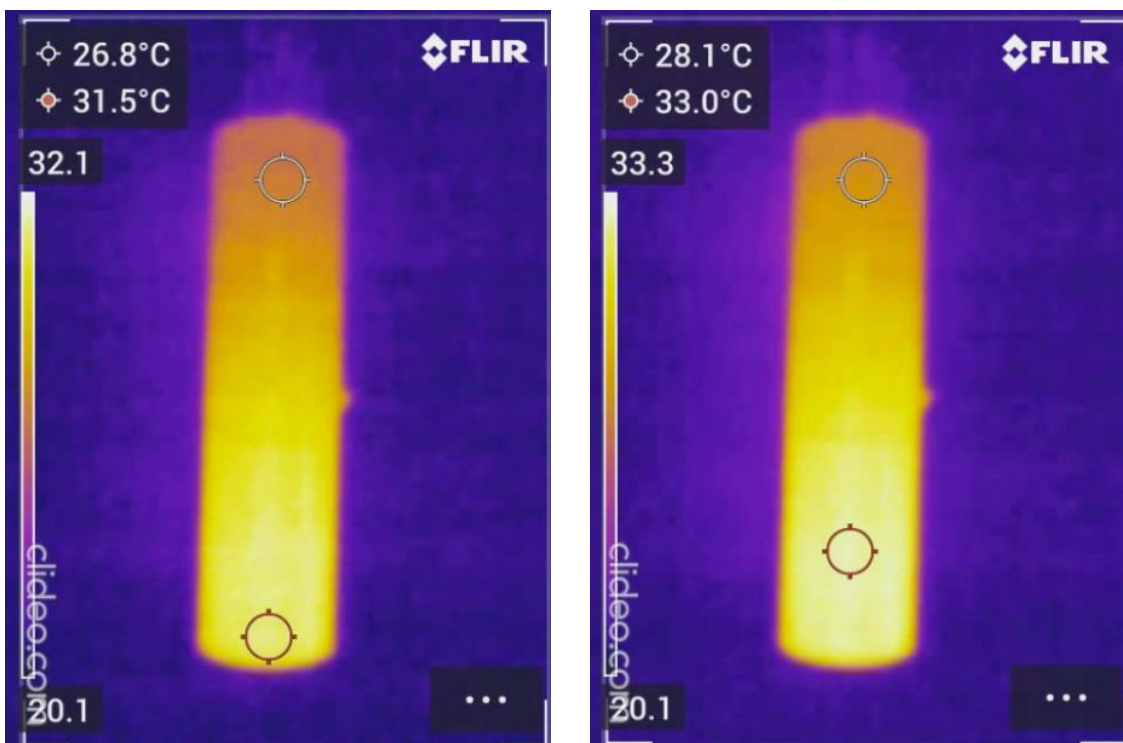


Figura 17: Imatges termogràfiques als instants 83s i 99s respectivament.

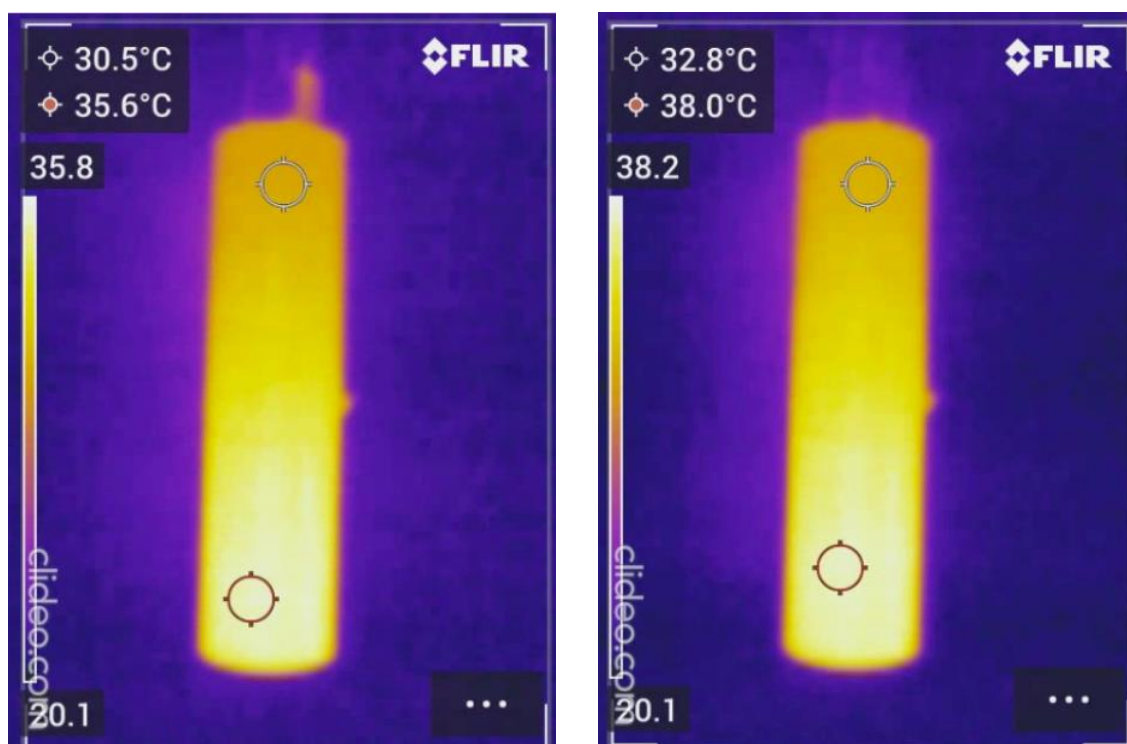


Figura 18: Imatges termogràfiques als instants 123s i 151s respectivament.

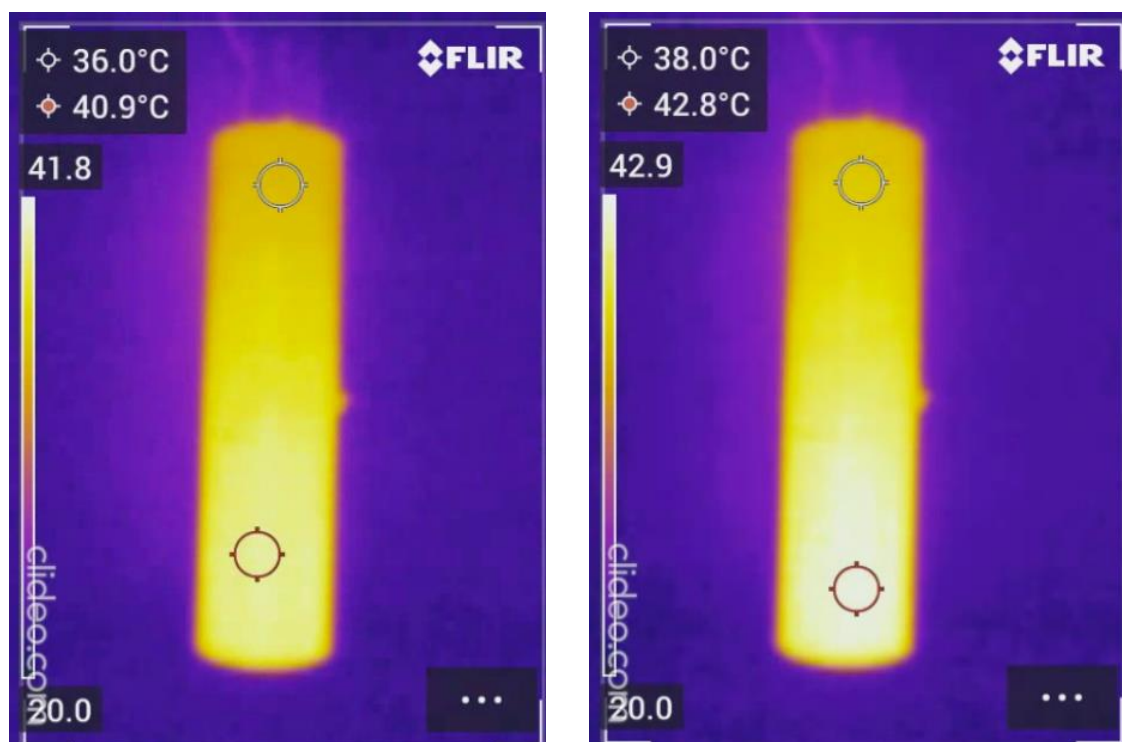


Figura 19: Imatges termogràfiques als instants 179s i 203s respectivament.

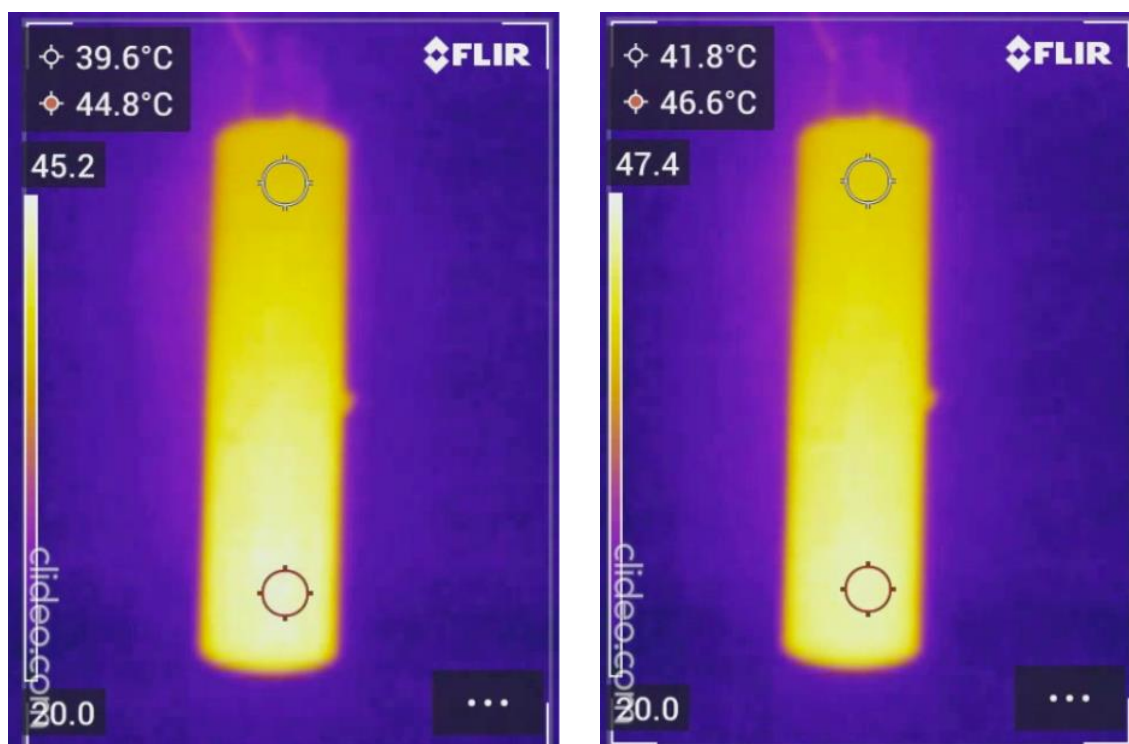


Figura 20: Imatges termogràfiques als instants 231s i 259s respectivament.

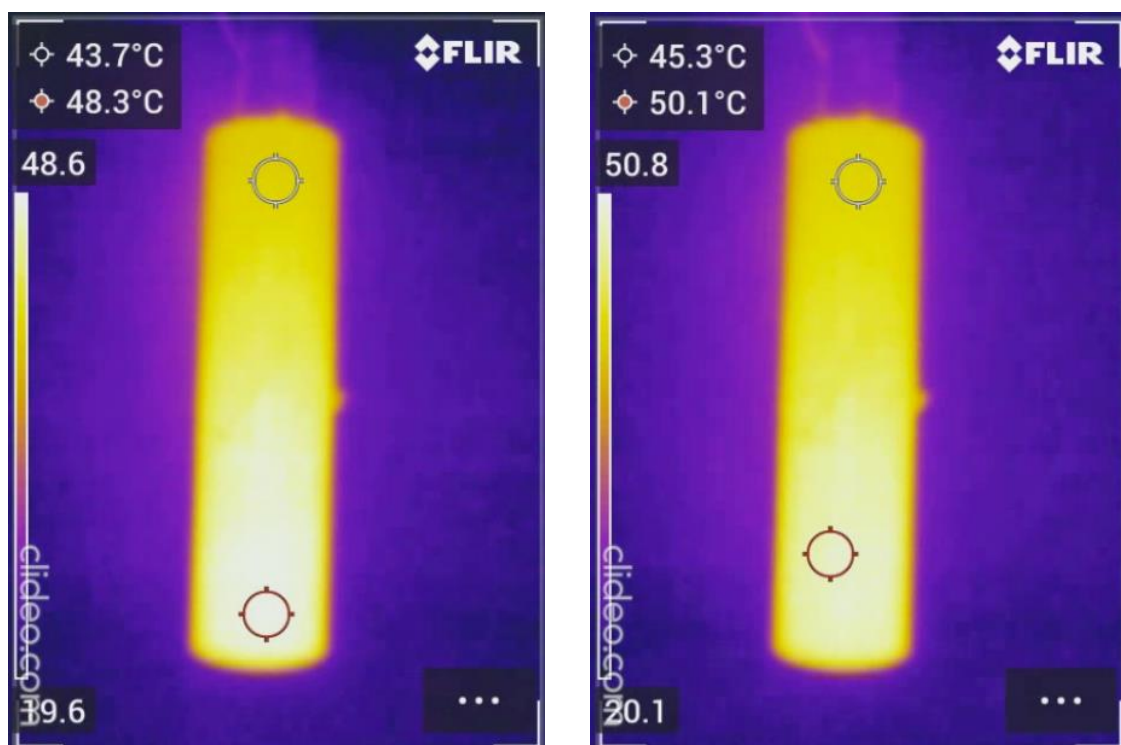


Figura 21: Imatges termogràfiques als instants 283s i 311s respectivament.

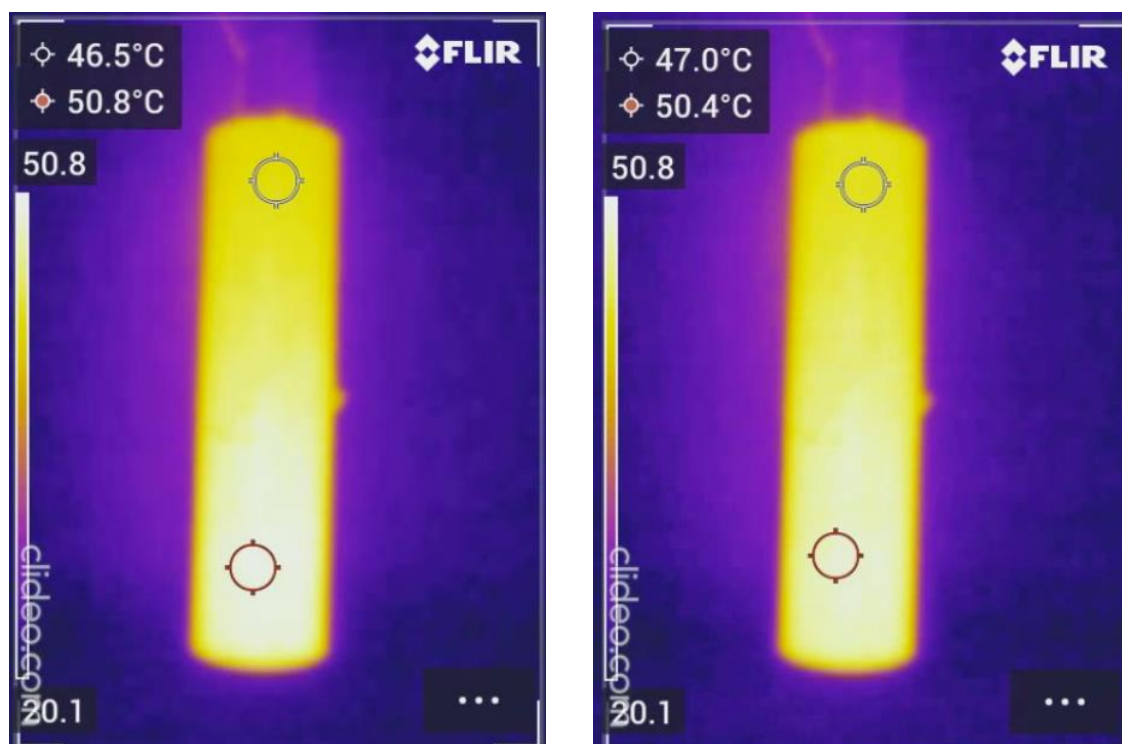


Figura 22: Imatges termogràfiques als instants 339s i 367s respectivament.

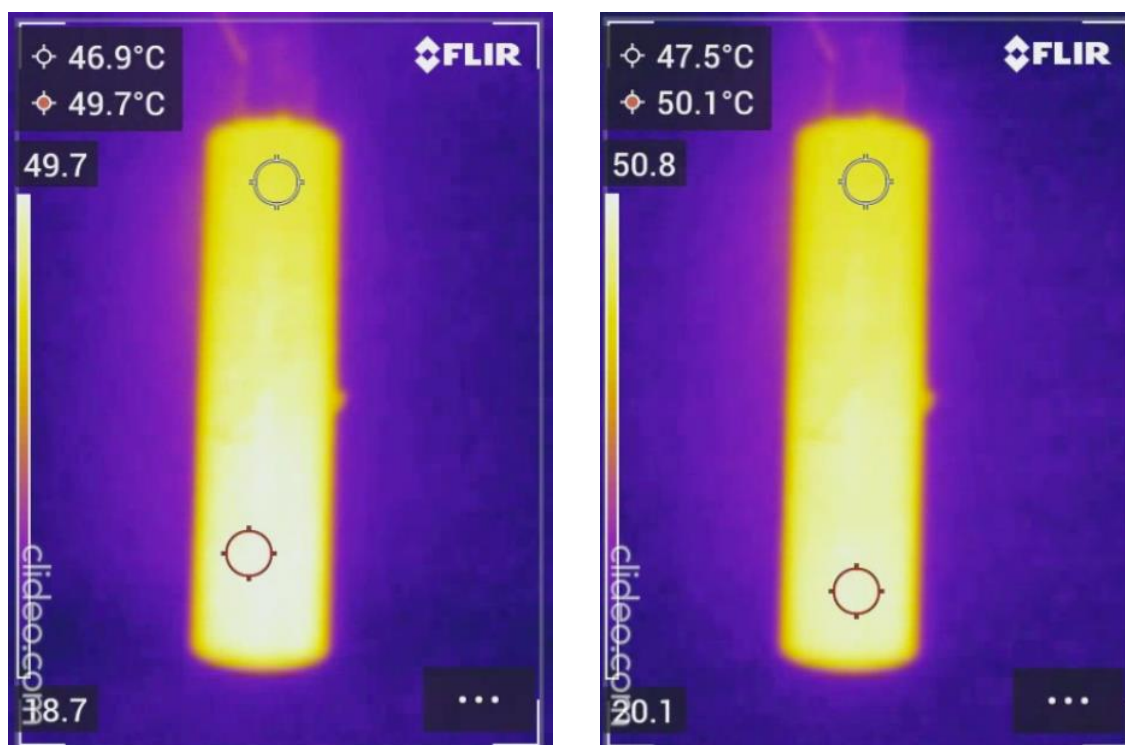


Figura 23: Imatges termogràfiques als instants 391s i 419s respectivament.

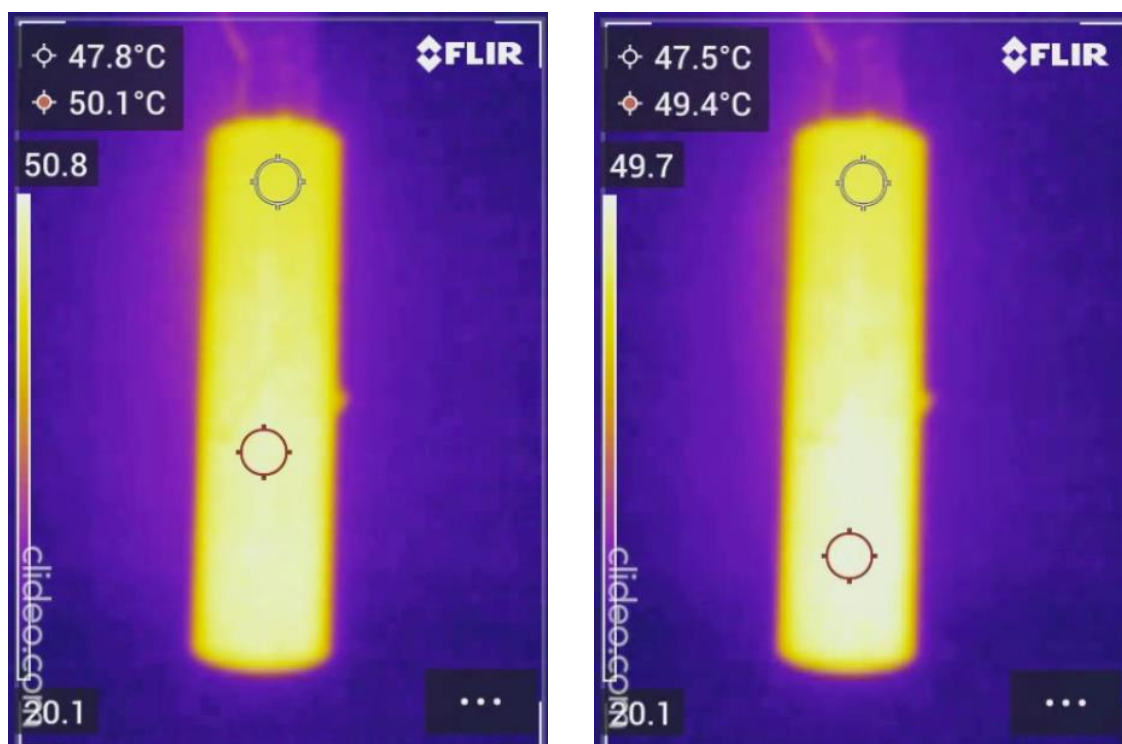


Figura 24: Imatges termogràfiques als instants 457s i 471s respectivament.

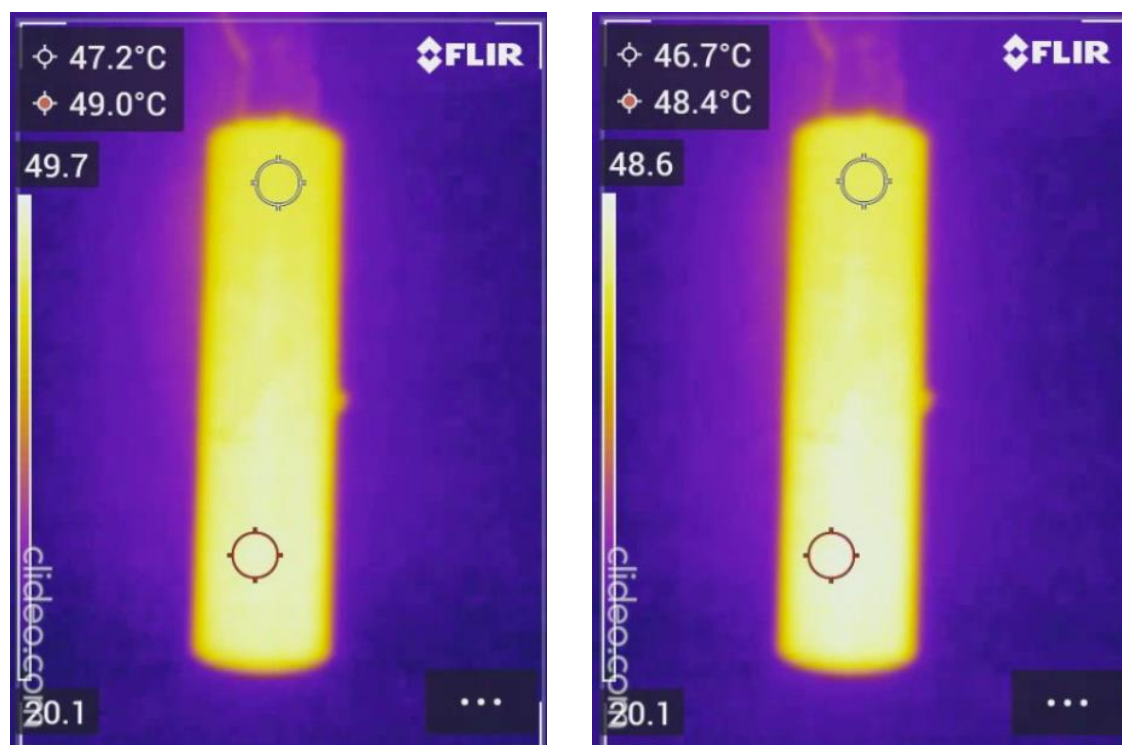


Figura 25: Imatges termogràfiques als instants 499s i 527s respectivament.

### 6.2.2. Imatges de la càmera tèrmica amb cabal de 0,08 l/min

En aquesta subsecció es mostren resultats del mateix experiment que amb el cabal de 0,38 l/min però amb un cabal de 0,08 l/min. Les imatges de les figures 26 a la 36, mostren l'evolució de la temperatura a aquest cabal.

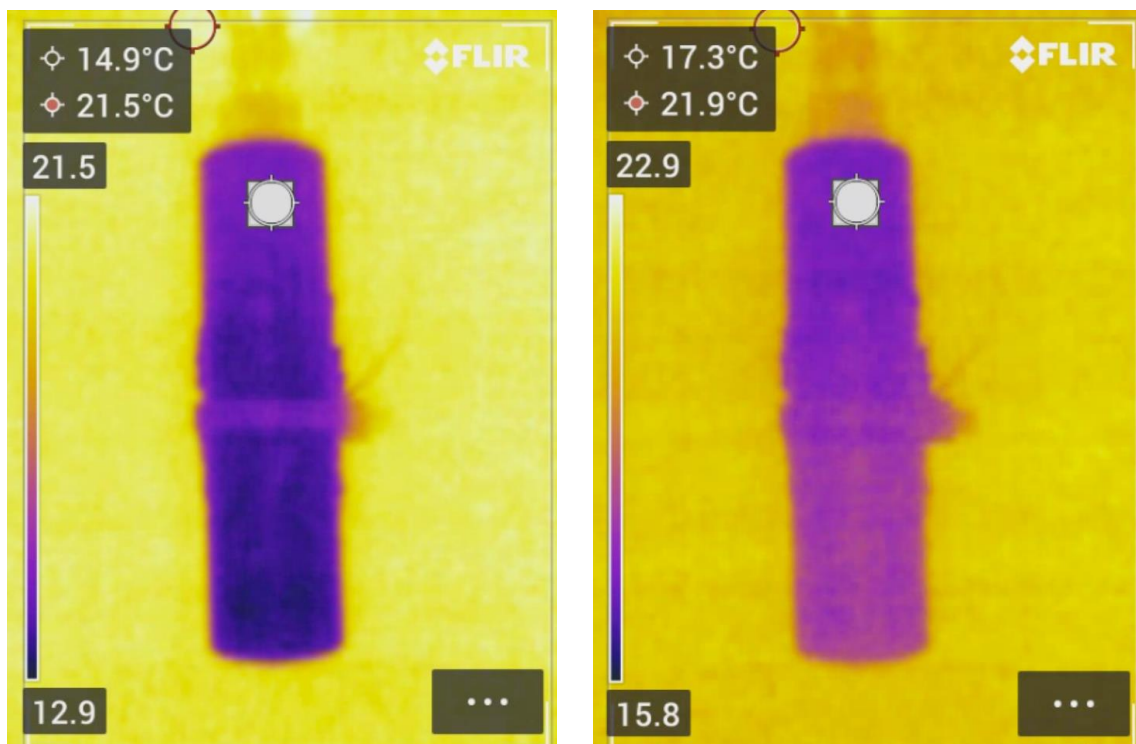


Figura 26: Imatges termogràfiques als instants 0 i 116s respectivament.

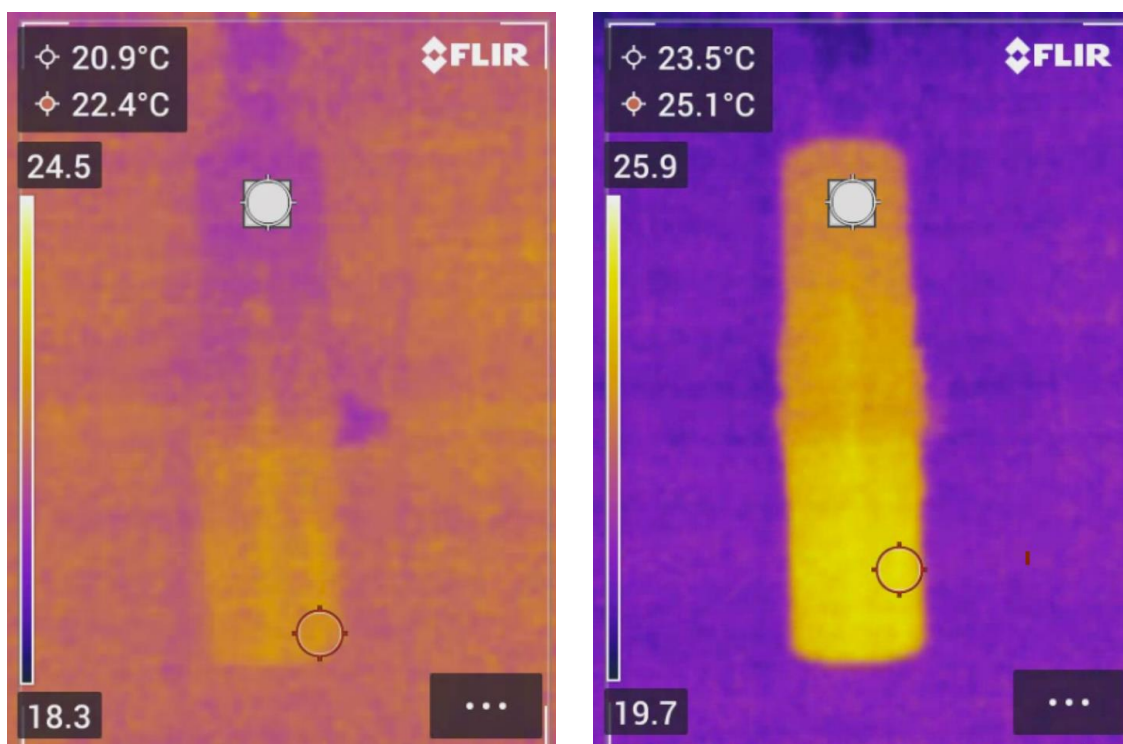


Figura 27: Imatges termogràfiques als instants 232s i 348s respectivament.

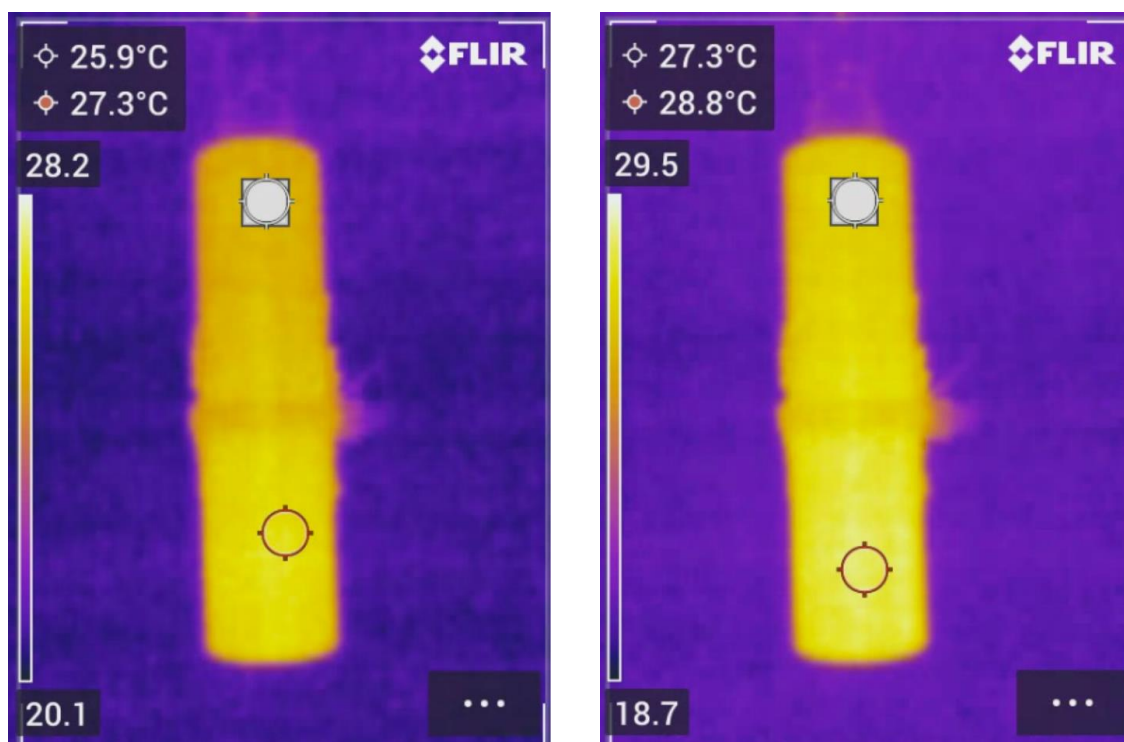


Figura 28: Imatges termogràfiques als instants 464s i 580s respectivament.



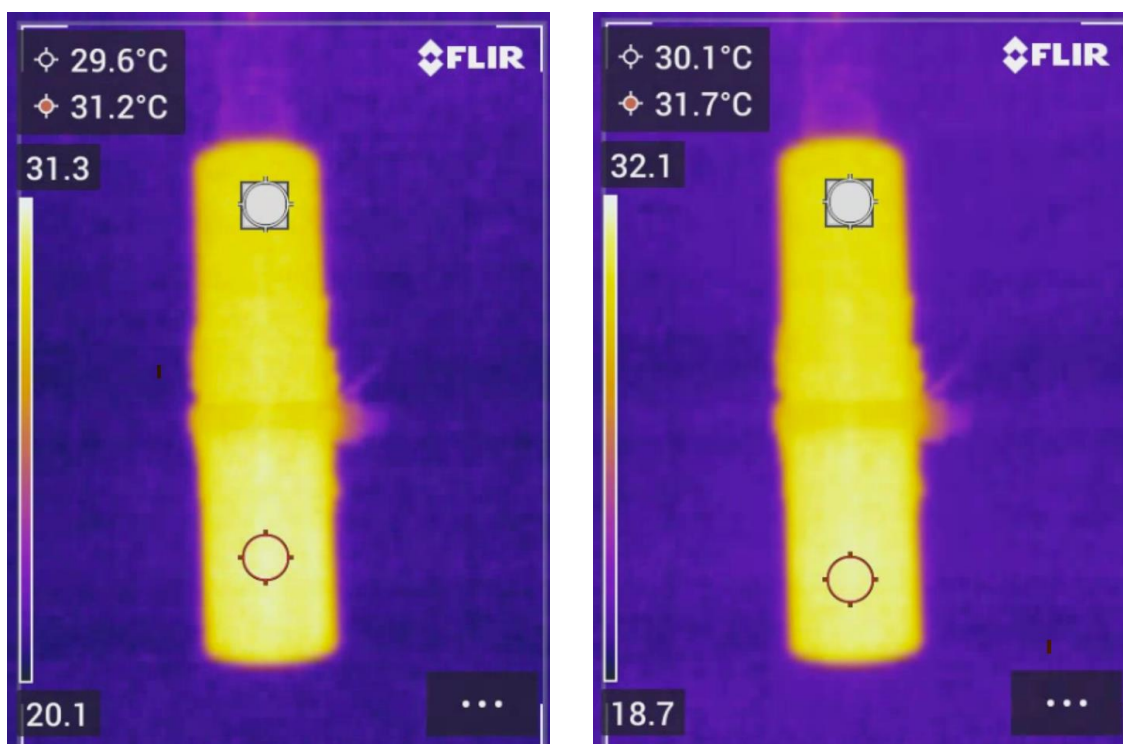


Figura 29: Imatges termogràfiques als instants 696s i 812s respectivament.

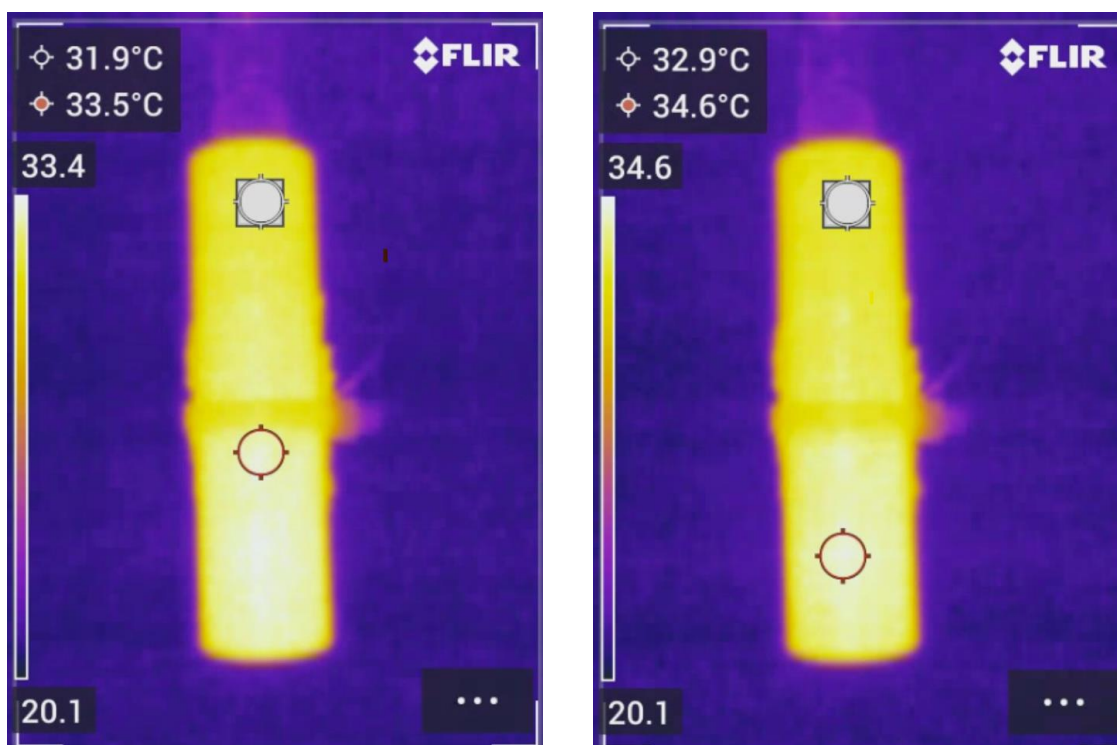


Figura 30: Imatges termogràfiques als instants 928s i 1044s respectivament.

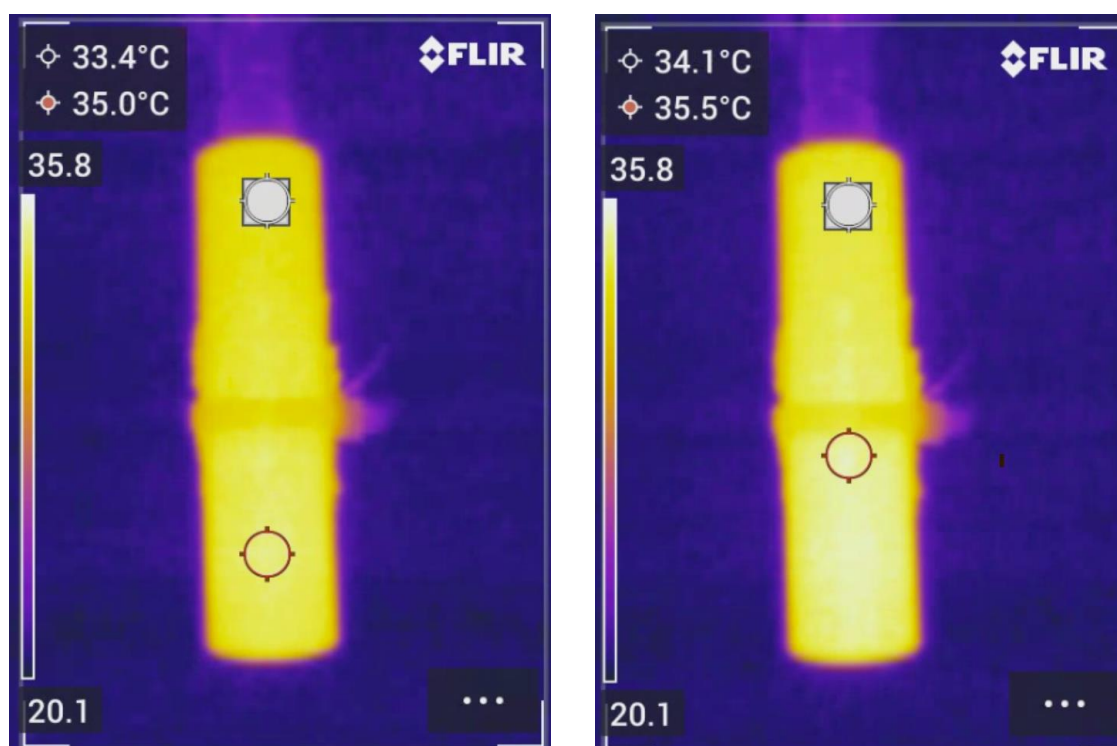


Figura 31: Imatges termogràfiques als instants 1160s i 1276s respectivament.

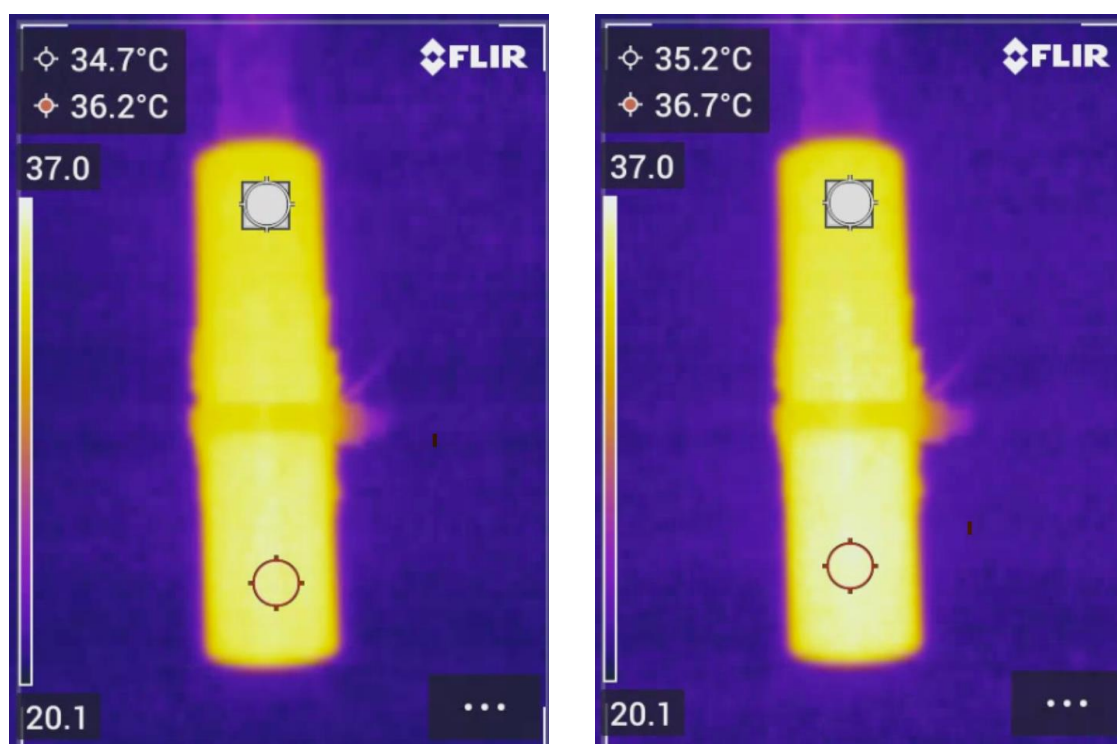


Figura 32: Imatges termogràfiques als instants 1392s i 1508s respectivament.

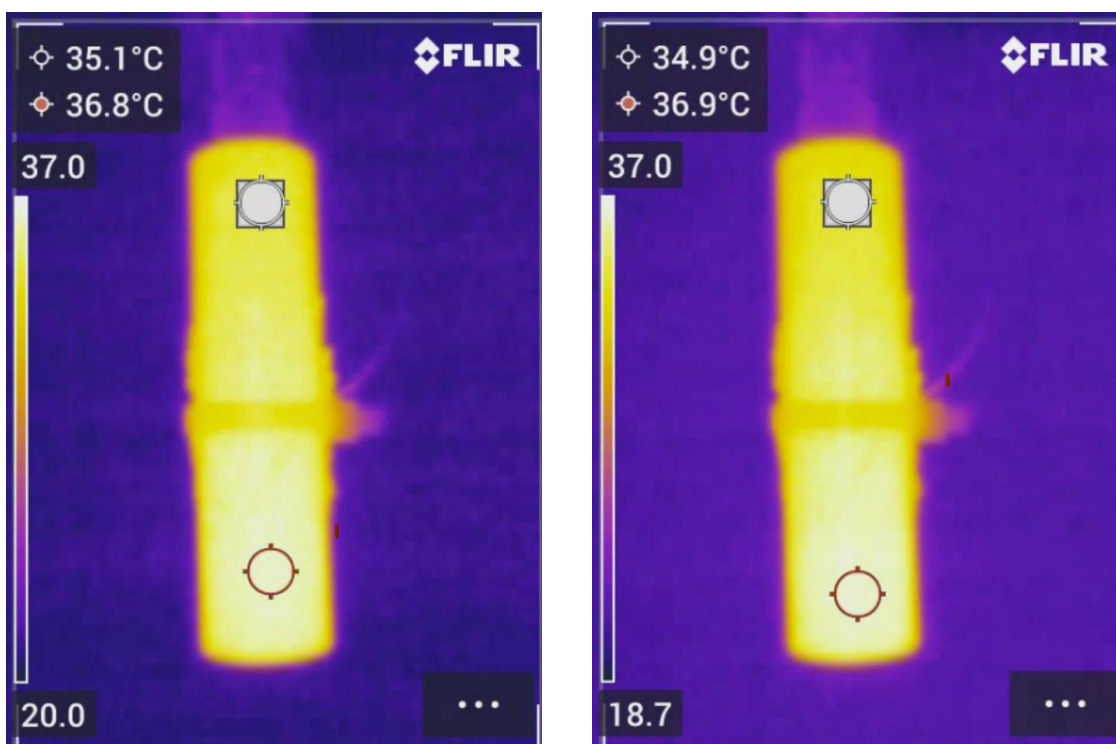


Figura 33: Imatges termogràfiques als instants 1624s i 1740s respectivament.

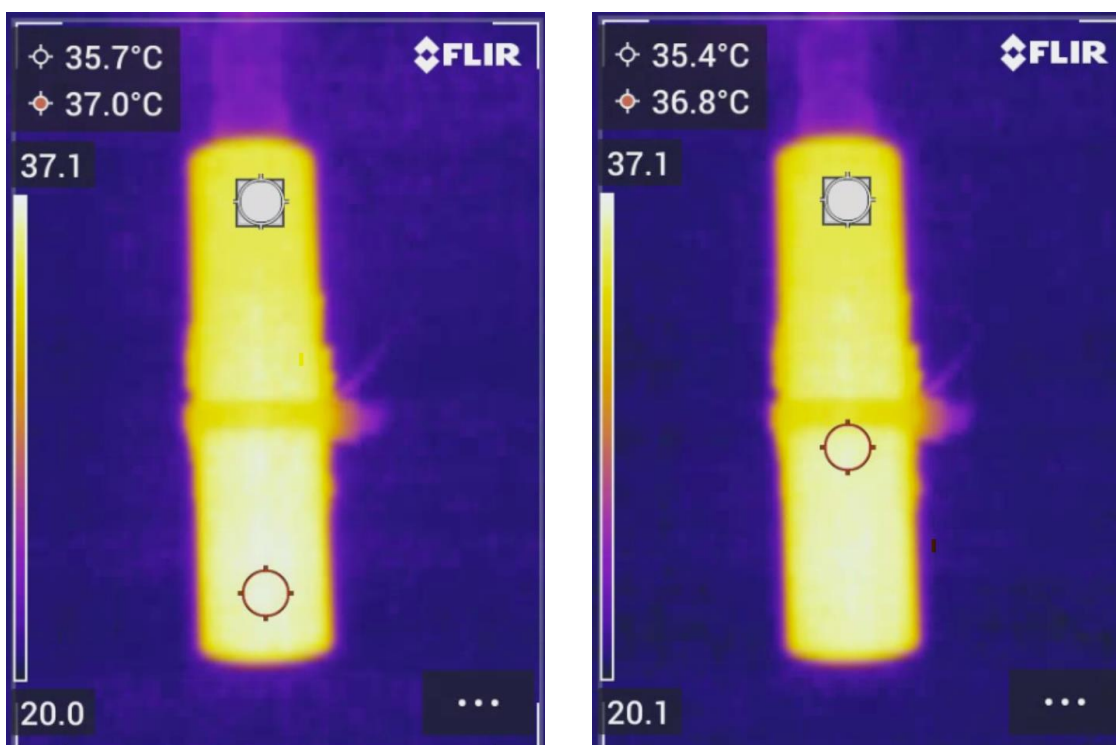


Figura 34: Imatges termogràfiques als instants 1856s i 1972s respectivament.

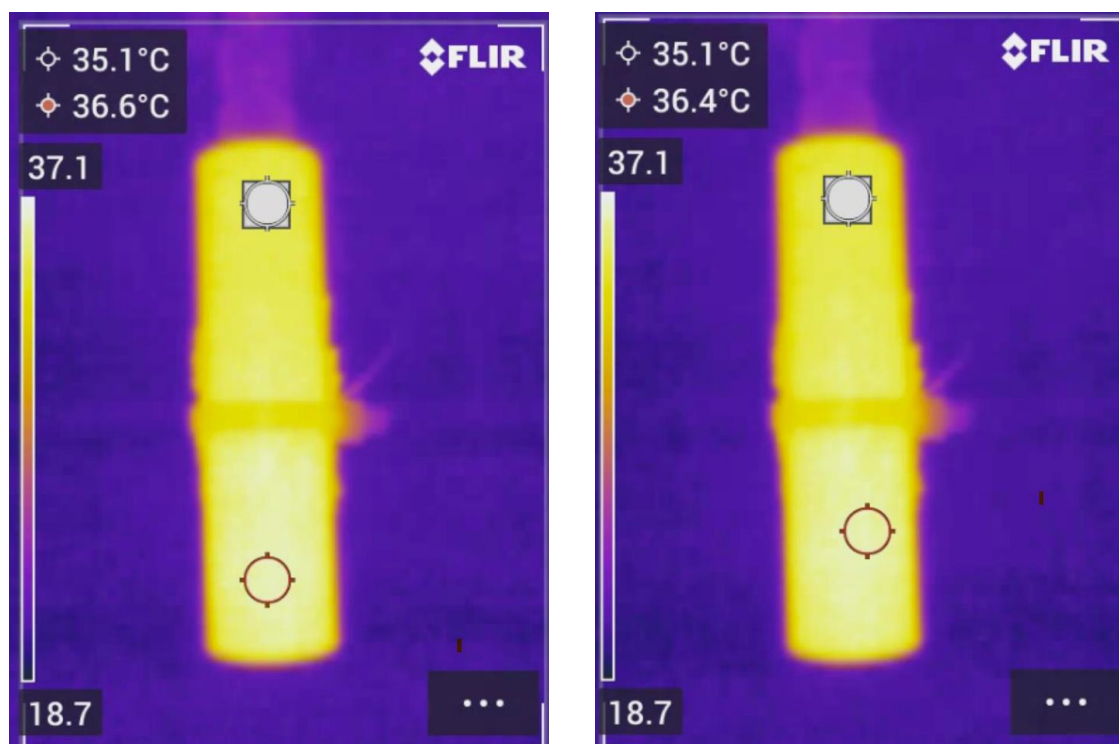


Figura 35: Imatges termogràfiques als instants 2088s i 2204s respectivament.

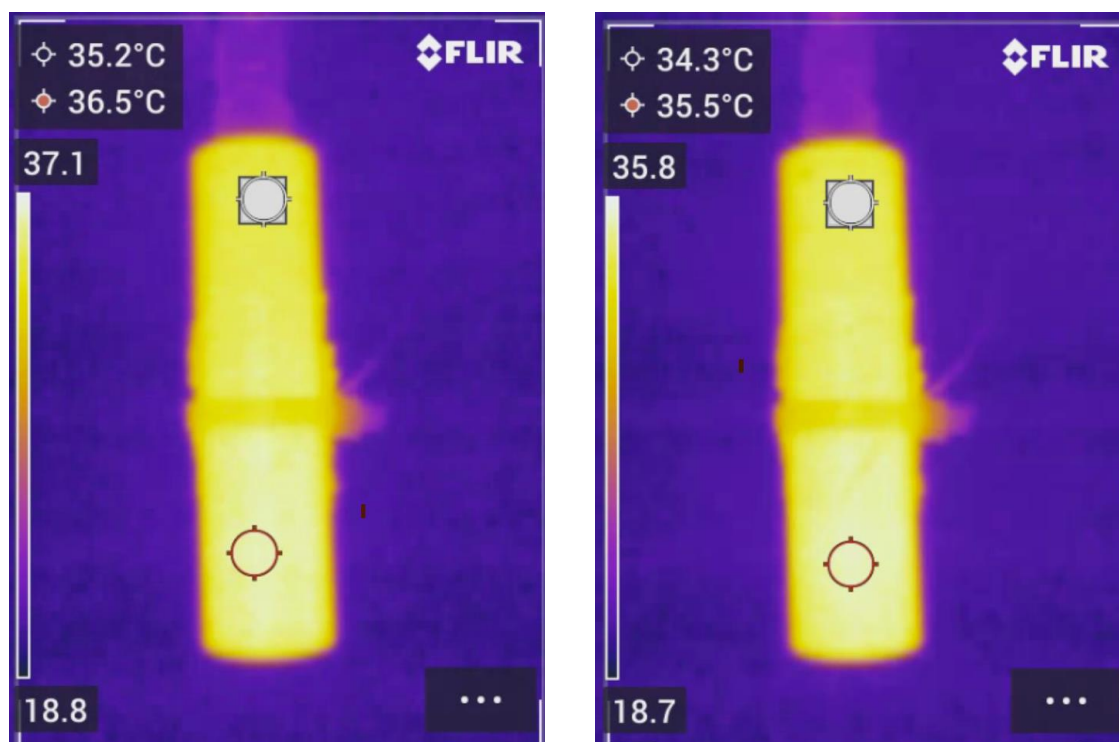


Figura 36: Imatges termogràfiques als instants 2320s i 2436s respectivament.

A les figures 34-35-36 es pot veure com les temperatures s'estabilitzen.

### 6.2.3. Tractament d'imatge amb Matlab

Utilitzant un script de Matlab (Anexe B), s'han tractat les imatges anteriors, podent extreure les temperatures en la direcció axial de cada imatge.

Primerament, com a input, s'importa una imatge RGB tèrmica de la càmera FLIR. A continuació es demana seleccionar la regió de la imatge que es vol tractar. En aquest cas, s'ha seleccionat la part central del tanc, que és d'on es vol extreure les dades. Seguidament es demana seleccionar la barra de colors, que és la llegenda gràfica de temperatures.

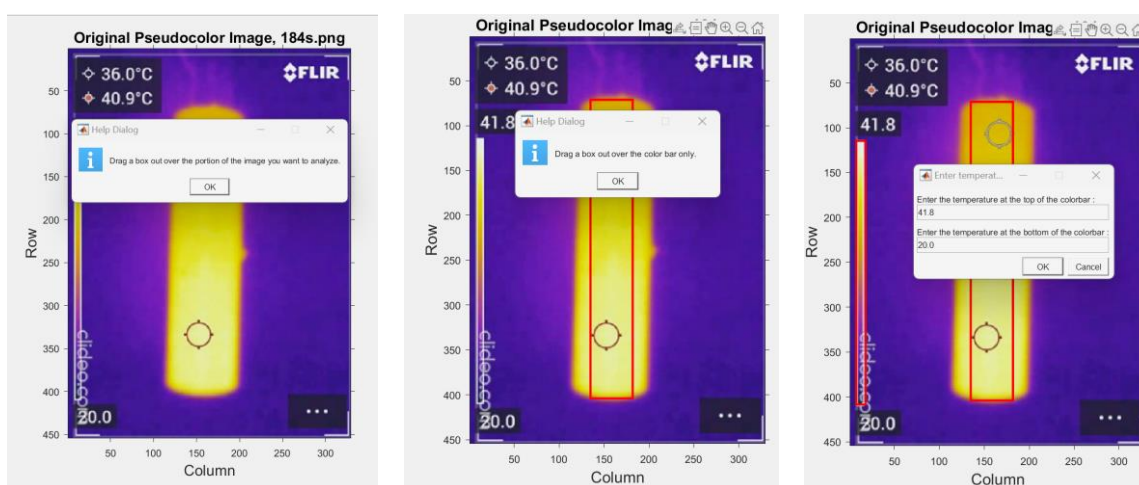


Figura 37: Tractament d'imatge amb Matlab.

Un cop seleccionada la barra de colors, s'ha de marcar quina és la temperatura màxima i quina és la mínima de la llegenda. Finalment, el script determina les temperatures a partir dels colors per a cada píxel de la imatge i crea una imatge de temperatura.

Per acabar, es mostra la figura 37, on es pot veure la temperatura a cada píxel de la imatge passant el cursor per sobre.

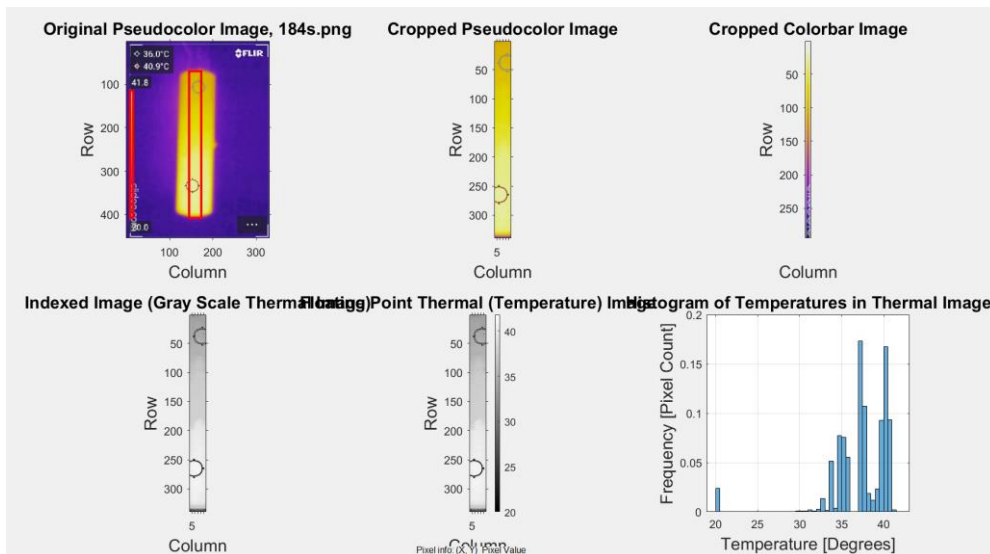


Figura 38: Pantalla de resultats del tractament d'imatge amb Matlab.

### 6.2.4. Resultats amb cabal de 0,38 l/min

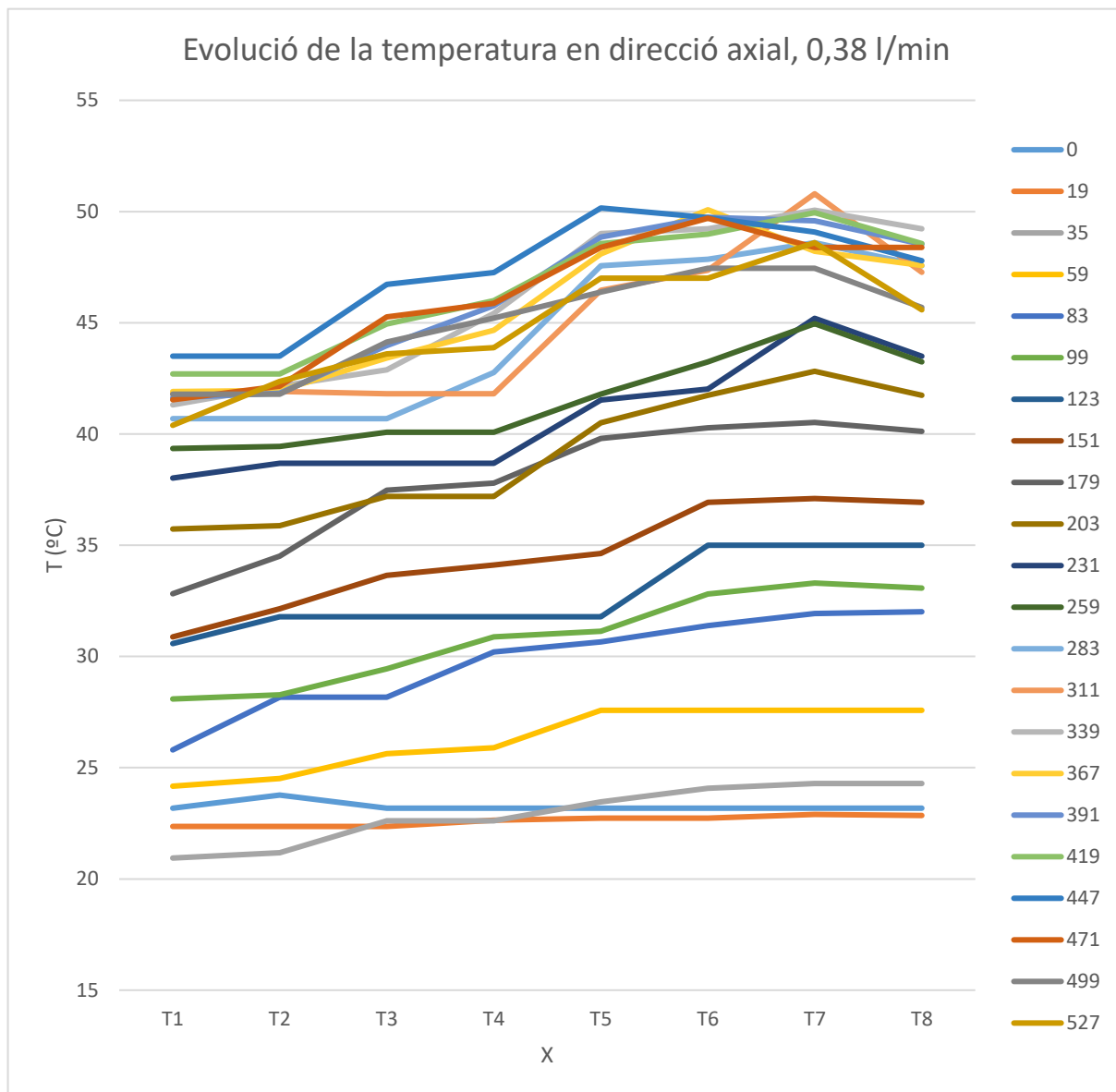


Figura 39: Gràfica de l'evolució de la temperatura a l'eix axial del tanc a 0,38 l/min

A la figura 39 es pot veure representada la temperatura en diferents punts del tanc d'hidrurs metàl·lics durant la càrrega amb un cabal de 0,38 l/min. Aquesta càrrega és la més ràpida que ha sigut possible fer amb la instal·lació del Laboratori d'Energia. Cada línia és un instant de temps i en total se'n poden veure 22 mostres.

En tots els instants de temps representats es pot notar que la tendència és la mateixa. A la boca del tanc la temperatura és menor que a les zones properes a la base de l'ampolla.

Quan té lloc la reacció química d'hidrur metàl·lic, aquesta genera una calor, que fa augmentar la temperatura de la zona on succeeix. Aquest fenomen pot indicar que quan s'inicia la càrrega, l'hidrogen en forma de gas s'acumula al final de l'ampolla, sent aquesta regió la primera en sofrir la reacció química d'hidrur metàl·lic, aleshores augmentant la temperatura d'aquesta regió del tanc.

Per aquest motiu es justifica que, al acumular-se l'hidrogen en estat gas a la base del tanc, es crea un diferencial de pressió més gran que en les altres regions de l'ampolla, aconseguint que la reacció comenci per aquesta regió.

En els primers segons de la reacció no hi ha una gran diferència de temperatura entre l'entrada de l'hidrogen i la base de l'ampolla. En canvi, a partir de l'instant de temps  $t = 59$  s, si que es pot notar un increment de temperatura entre les dues regions.

Al llarg de l'experiment, l'increment de temperatura entre regions es manté, però a  $t = 203$ s, el punt més allunyat de la boca del tanc ja no és el que té la temperatura més elevada. Això es deu a que aquesta zona no permet reaccionar amb l'hidrogen, ja que el metall en qüestió ja ha absorbit tot el gas possible o bé, a que s'estigui perdent calor per convecció al mateix ritme que s'està generant degut a la reacció. I trasllada el gradient de pressió més alt a punts més propers a l'entrada del tanc, fent aparèixer la temperatura màxima a aquesta zona, consegüentment.

Aquest fenomen a la gràfica es pot veure de manera que a mesura que avança el temps, el punt amb més temperatura es va apropant a l'entrada d'hidrogen del tanc.

Arribat a  $t = 311$ s, s'assoleix la màxima temperatura,  $50,80$  °C. I a partir de  $t = 391$ s, en línies generals, la temperatura disminueix a tots els punts respecte l'instant de temps anterior.

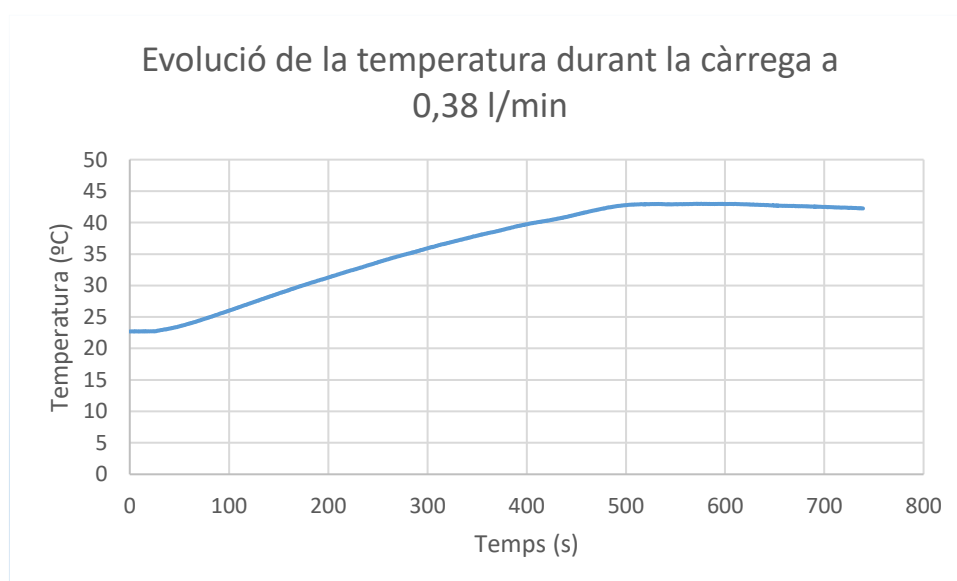




Figura 40: Gràfica de l'evolució de la temperatura a 0,08 l/min amb sensor de temperatura de la instal·lació situat al mig de l'eix del tanc.

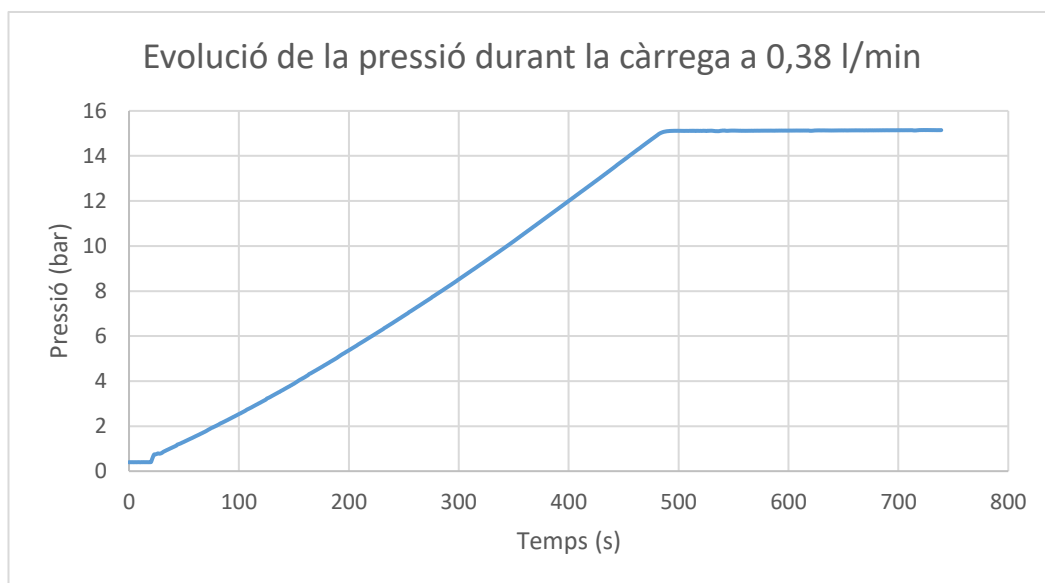


Figura 41: Gràfica de l'evolució de la pressió a 0,38 l/min amb sensor de pressió de la instal·lació.

A la figura 41 es pot notar que quan la pressió es manté constant, la temperatura de la figura 40 deixa d'augmentar i passat uns instants disminueix.

### 6.2.5. Resultats amb cabal de 0,08 l/min

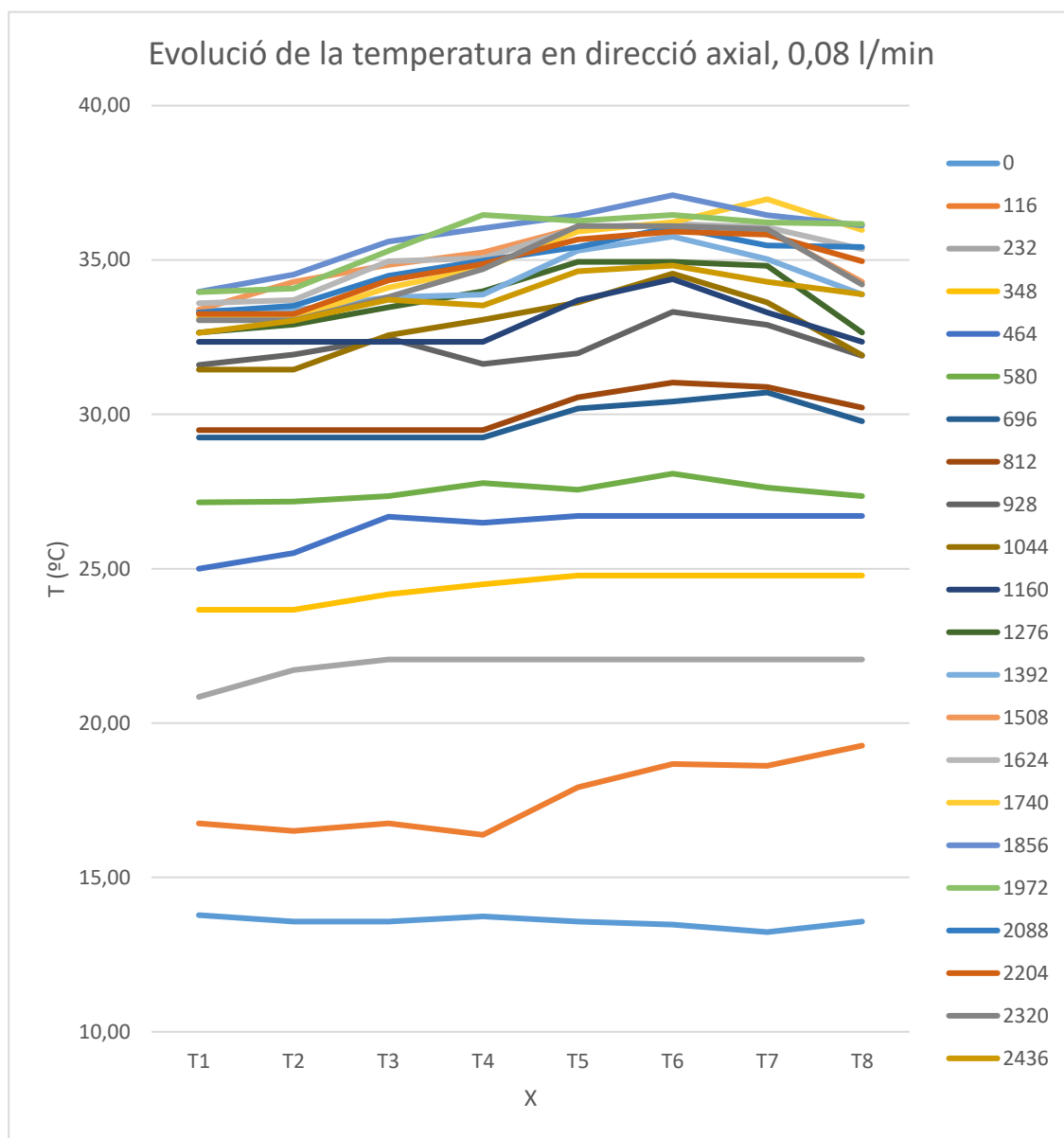


Figura 42: Gràfica de l'evolució de la temperatura a l'eix axial del tanc a 0,08 l/min

El cabal de 0,08 l/min ha estat la càrrega més lenta possible per poder registrar dades de temperatura amb la càmera tèrmica FLIR.

A simple vista es nota que la tendència és la mateixa que amb un cabal de 0,38 l/min, ja que es pot veure que el metall del tanc reacciona en la regió més allunyada de l'entrada d'hidrogen i aquesta reacció es va desplaçant cap a la boca de l'ampolla.

Hi ha dues diferències molt importants respecte el primer experiment. La primera és que el temps que necessita el tanc d'hidrurs metàl·lics per assolir la pressió de 15 bar a 0,08 l/min és major que amb un cabal de 0,38 l/min. En el primer cas s'assoleixen a l'instant  $t = 3775$  s i en el segon a  $t = 480$  s, com es pot veure a les figures 43-44 respectivament.

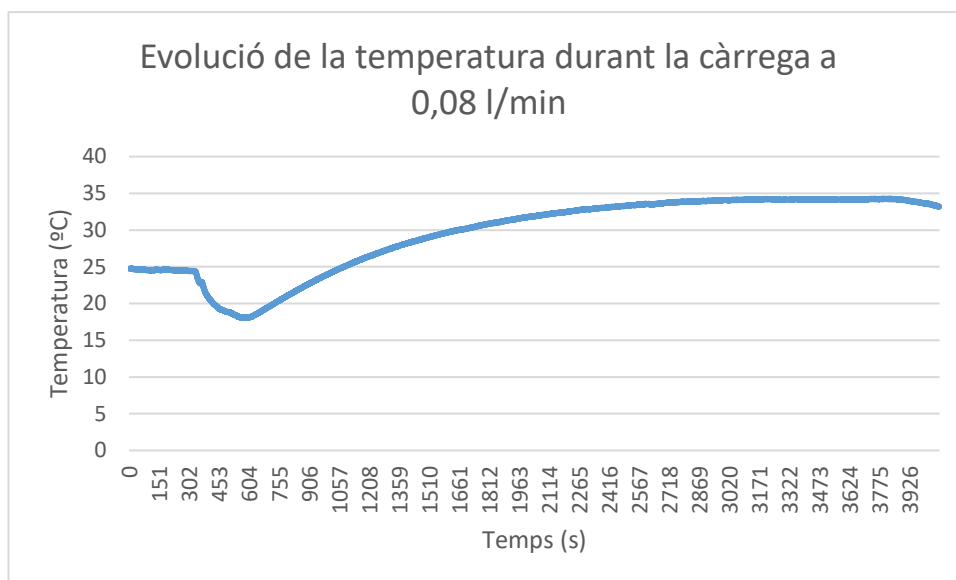


Figura 43: Gràfica de l'evolució de la temperatura a 0,08 l/min amb sensor

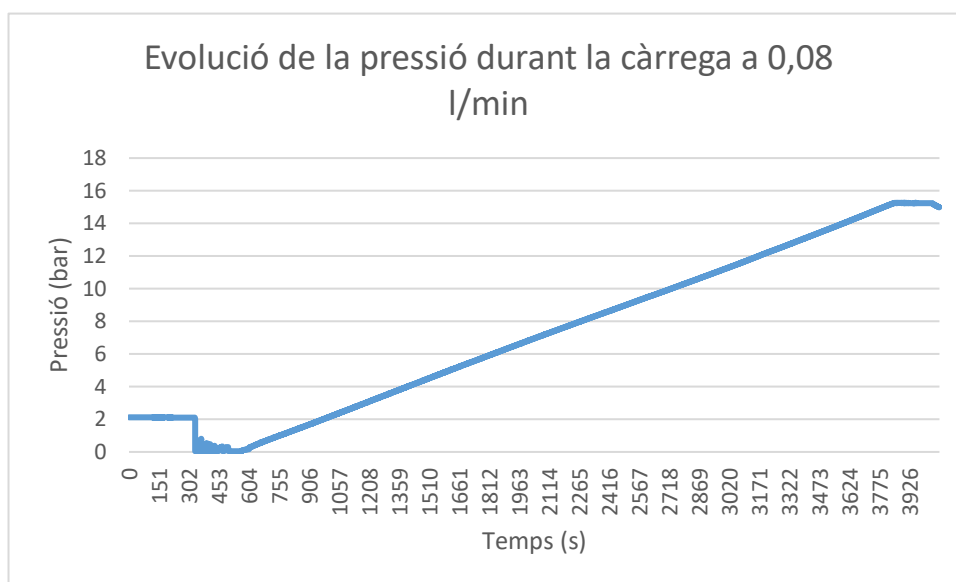


Figura 44: Gràfica de l'evolució de la pressió a 0,08 l/min amb sensor

La segona diferència es troba a la temperatura. Tant la diferència de temperatura entre el punt més proper a l'entrada de l'hidrogen i el més allunyat com la temperatura màxima assolida és menor quan el cabal també és menor.

Cal comentar que la gràfica de les figures 43 i 44, abans dels 600 segons hi ha unes petites perturbacions. El motiu pel qual la temperatura té una baixada fins als 17 graus es pot deure a que no es va deixar passar suficient temps entre la descàrrega i la càrrega i aleshores el tanc no va arribar a la temperatura ambient. El motiu d'això és que quan es fa una descàrrega descontrolada del tanc, la temperatura disminueix fins a una temperatura inferior a la ambient.

### 6.2.6. Comparació dels resultats experimentals amb cabal de 0,38 l/min i 0,08 l/min

Es pot veure gràficament a les figures 45-46 com la diferència de temperatura entre l'entrada i la base del tanc, amb el cabal de 0,38 l/min, és major comparada amb la diferència de temperatures amb el cabal de 0,08 l/min.

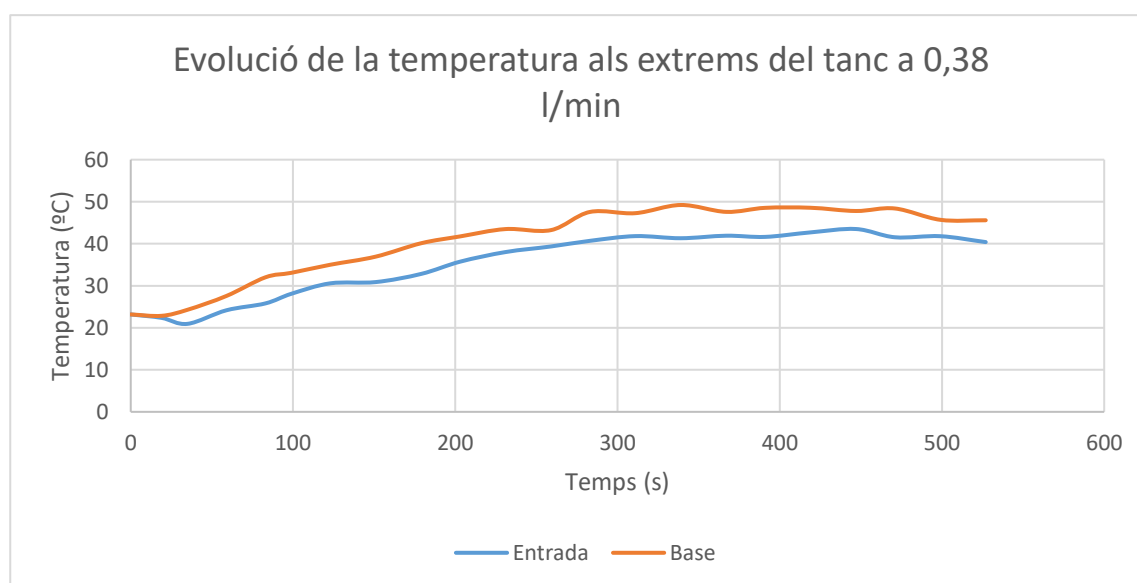


Figura 45: Gràfica de l'evolució de la temperatura a 0,38 l/min a l'entrada i base del tanc.

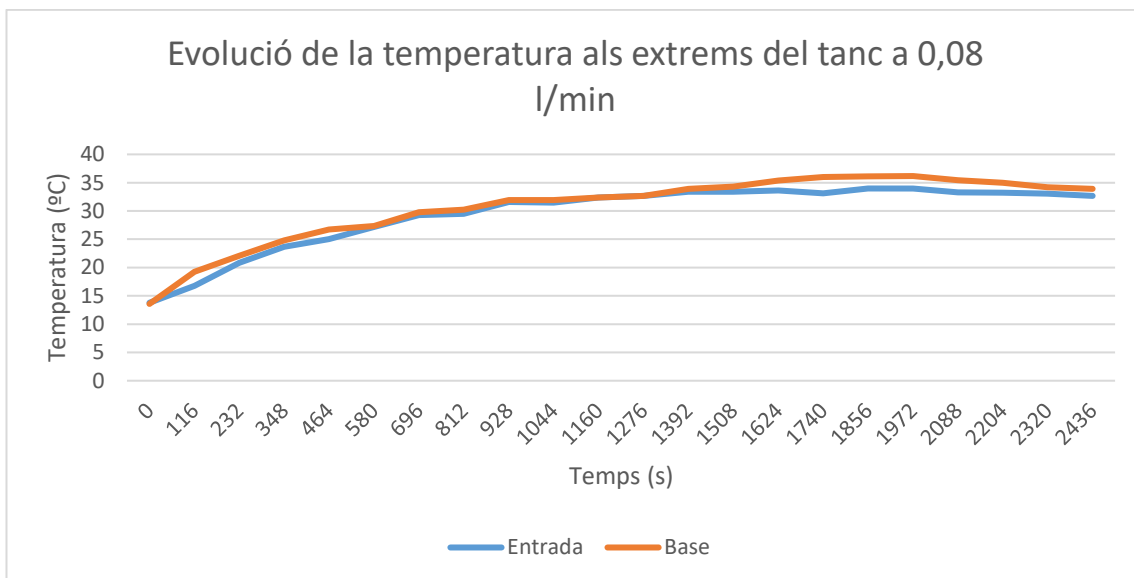


Figura 46: Gràfica de l'evolució de la temperatura a 0,08 l/min a l'entrada i base del tanc.

Més concretament, la diferència màxima de temperatura entre aquests dos punts a 0,38 l/min és de 7,91 °C mentre que a 0,08 l/min és de 2,84 °C.

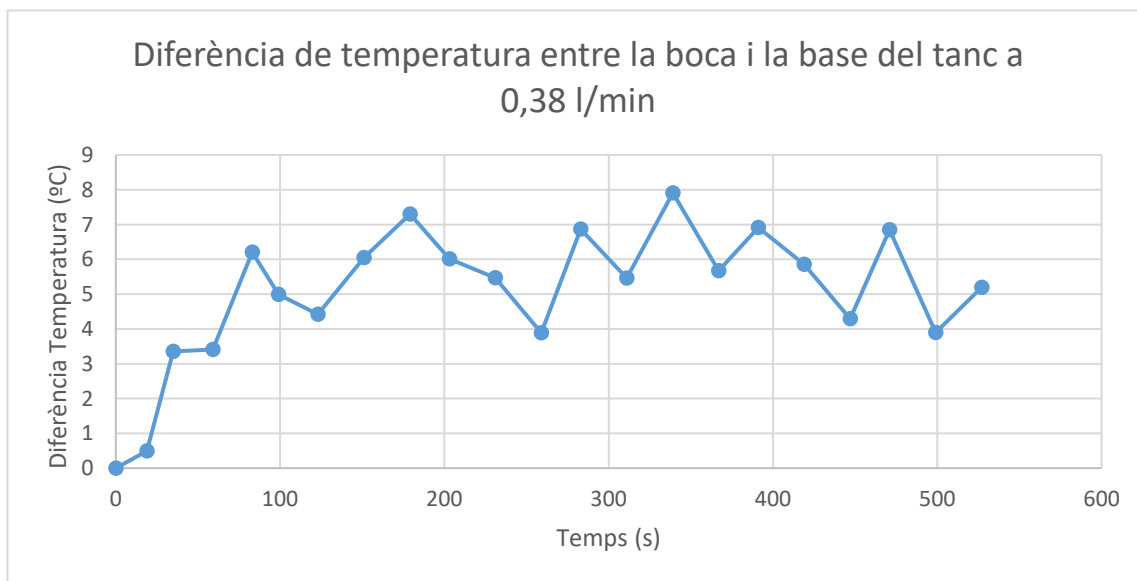


Figura 47: Gràfica de la diferència de temperatura entre l'entrada i la base a 0,38 l/min.

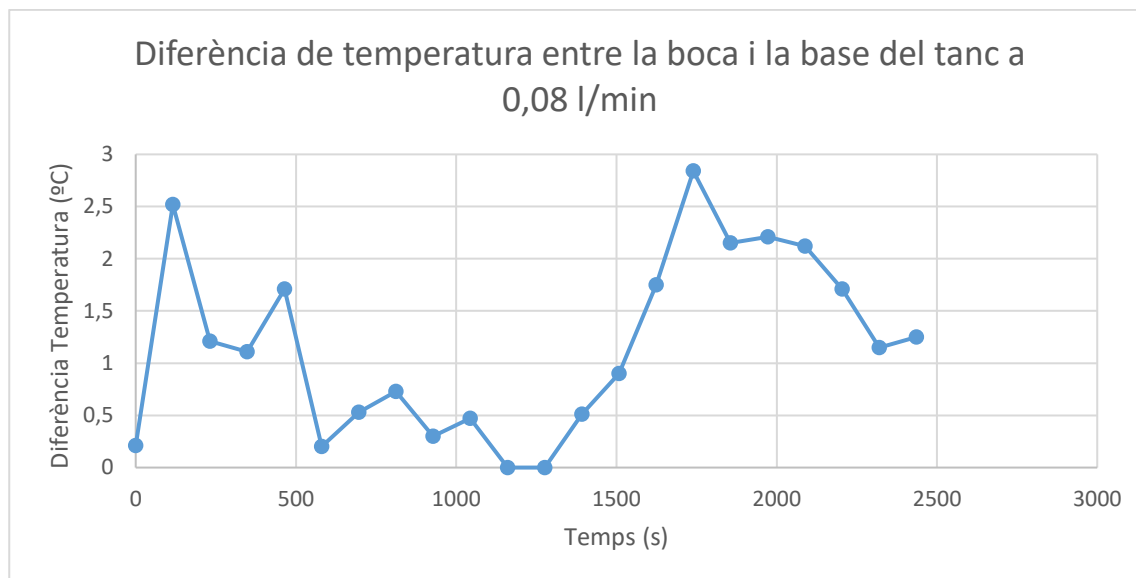


Figura 48: Gràfica de la diferència de temperatura entre l'entrada i la base a 0,08 l/min.

A més, també es pot veure a les figures 47-48 com aquestes diferències de temperatura es mouen entre els 4°C i els 8°C en el cas del major cabal i entre els 0,5°C i 3°C en el cas de menor cabal.

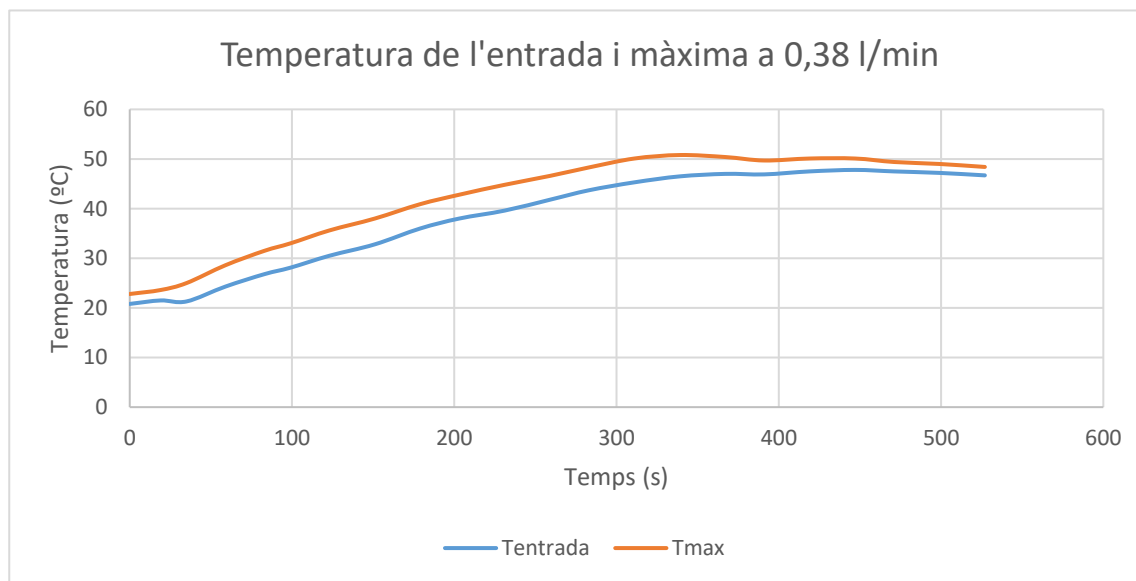


Figura 49: Gràfica de la temperatura d'entrada i la màxima en funció del temps de càrrega a 0,38 l/min.

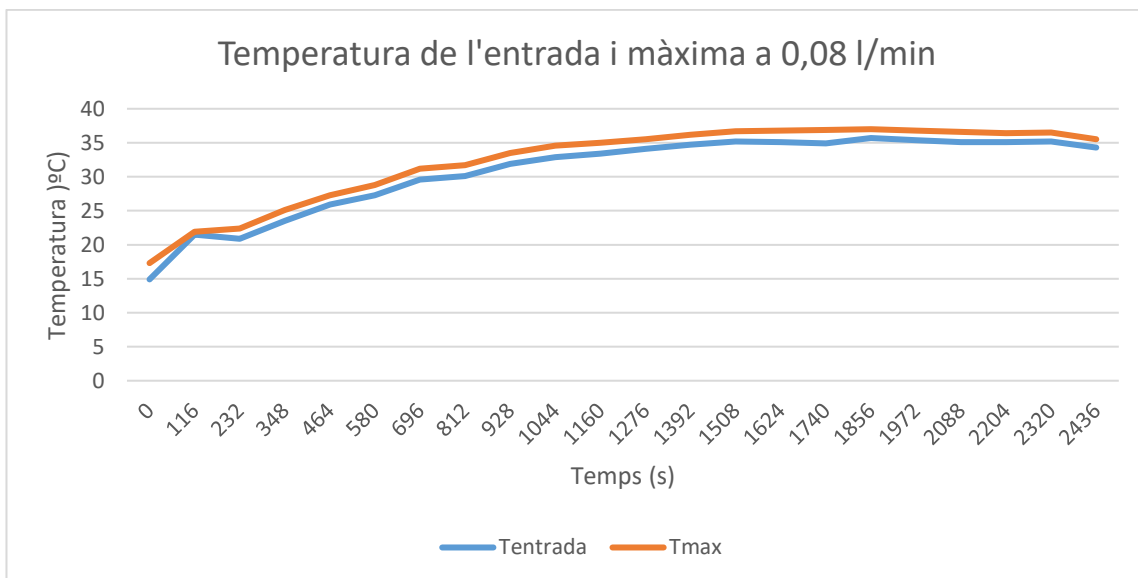


Figura 50: Gràfica de la temperatura d'entrada i la màxima en funció del temps de càrrega a 0,08 l/min.

Una altra comparació molt interessant que es pot fer és la de la diferència de temperatura entre l'entrada del tanc d'HM a l'entrada i al punt amb la temperatura més alta en cada instant de temps dels analitzats.

Seguint la tendència anterior, les diferències amb major cabal sempre són més grans que en un cabal més reduït.

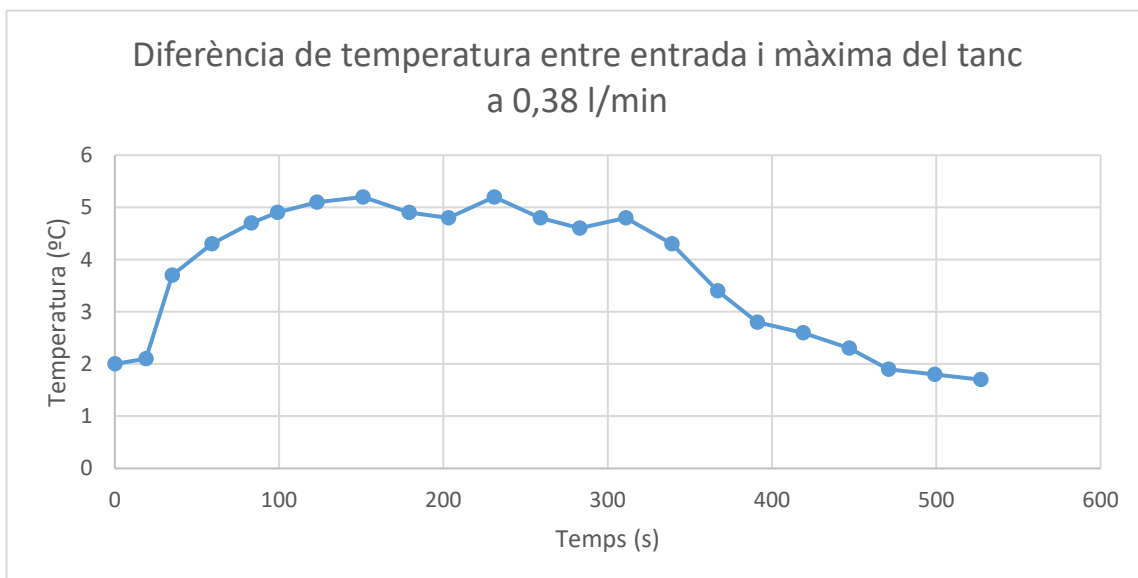
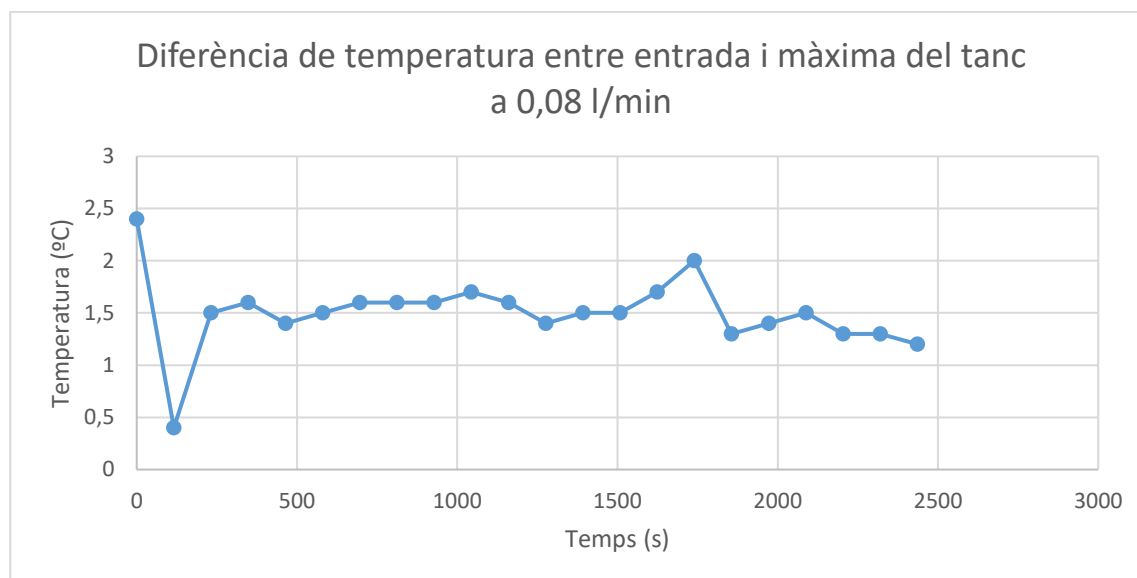


Figura 51: Gràfica de la diferència entre la temperatura d'entrada i la màxima en funció del temps de càrrega a 0,38 l/min.



*Figura 52: Gràfica de la diferència entre la temperatura d'entrada i la màxima en funció del temps de càrrega a 0,08 l/min.*

Amb el cabal de 0,38 l/min, la màxima diferència és de 5,2°C i la mínima d'1,7 °C, en canvi amb el cabal de 0,08 l/min, la màxima diferència de temperatura és de 2,4°C i la mínima de 0,4°C.

Analitzades les dades anteriors, es pot veure que la tendència és que quan es té un major cabal, les temperatures són més altes, igual que la diferència de temperatures entre entrada i base del tanc com entre l'entrada, que és la temperatura mínima i la temperatura màxima, en comparació amb un cabal d'entrada d'hidrogen més petit.





## Conclusions

En primer lloc, a través d'una revisió de la literatura científica i tècnica, s'ha pogut constatar l'interès creixent en els hidrurs metàl·lics com a materials prometedors per a l'emmagatzematge d'hidrogen. S'ha observat que aquests compostos presenten propietats termodinàmiques i cinètiques favorables que els permeten emmagatzemar grans quantitats d'hidrogen a la seva estructura cristal·lina. La problemàtica que es pot notar és que aquesta és una tecnologia emergent i actualment no és una solució viable per a l'emmagatzematge d'hidrogen comercialment o a gran escala.

Un altre punt a destacar és que la discussió que s'ha pogut fer sobre la reducció del model matemàtic i els resultats corresponents és molt general i no entra en detalls, ja que els paràmetres del metall són desconeguts i per tant el model pot donar prediccions limitades. A més, al haver fet moltes suposicions per a reduir el model, la capacitat de predicció també fa que disminueixi.

Per altra banda, és interessant comentar que la tendència de la temperatura és la mateixa, tant a la simulació computacional del model matemàtic reduït com a l'experimentació que s'ha dut a terme al laboratori. Això indica que aquest model d'equacions proposat és vàlid per fer una predicció aproximada del comportament de la temperatura en la direcció axial del tanc durant una càrrega controlada.

A més, mencionar que per ampliar aquest treball, es poden seguir diferents línies. La primera seria poder trobar els paràmetres físics que tenen relació amb el metall de dins del tanc. Amb això es podria aconseguir simular l'evolució més exacta de la temperatura dins l'ampolla, d'una forma més acurada. També seria molt interessant poder treballar amb valors d'entalpia de reacció o conductivitat coneguts.

La segona seria donar lloc a la mateixa tipologia d'experiments però amb temperatures controlades, com per exemple submergint l'ampolla d'hidrurs metàl·lics a un bany tèrmic a diferents temperatures. Això ens permetria veure si s'aconsegueix assolir la pressió d'equilibri de càrrega i, si fos el cas, en quin instant de temps.

Finalment, l'última línia de recerca per seguir seria la modelització matemàtica de tot el sistema, tenint en compte les equacions de conservació de la massa, de l'energia i del moment.

## Pressupost i/o Anàlisi Econòmica

El pressupost per a la realització d'aquest treball ha estat calculat amb el salari mig d'un enginyer junior a Espanya, que és de 22.700 euros l'any, que equival a 14,29 € l'hora, considerant 1800 hores laborals en un any segons el conveni del metall de 2023. Referent als equips emprats per la part experimental, s'ha tingut en compte el preu de l'electrolitzador, l'ampolla d'hidrurs metàl·lics, els sensors de pressió i temperatura, el regulador de cabal màssic i la càmera tèrmica FLIR a més dels softwares Matlab i FLIR Thermal Studio.

Recursos Humans			
	Hores	Cost unitari (€/h)	Cost (€)
Recerca i modelització	540	14,29	7.760,60
Laboratori	20	14,29	289,80
Tractament d'imatge	40	14,29	579,60
Total			8.574

Software i Hardware			
	Unitats	Cost unitari (€/h)	Cost (€)
Electrolitzador	1	7000	7.000
Ampolla hidrurs metàl·lics	1	1200	1.200
Sensor de pressió	1	150	150
Sensor de temperatura	1	40	40
Regulador de cabal màssic	1	1200	1.200
Càmera tèrmica FLIR	1	688,49	688,49
Matlab	1	860	860

Flir Thermal Studio	1	219	219
Total			11.357,49

Resum	
	Cost (€)
Recursos Humans	8.574
Software i Hardware	11.357,49
Total	19.931,49

## Bibliografia

- [1] ABDIN, Zainul, et al. Hydrogen as an energy vector. *Renewable and sustainable energy reviews*, 2020, 120: 109620.
- [2] AMEZ ARENILLAS, Isabel, et al. Hydrogen as an energy vector: present and future. In: *Sustaining Tomorrow via Innovative Engineering*. 2021. p. 83-129.
- [3] MANDAL, Tapas K.; GREGORY, Duncan H. Hydrogen: a future energy vector for sustainable development. *Proceedings of the institution of mechanical engineers, part C: journal of mechanical engineering science*, 2010, 224.3: 539-558.
- [4] HURTADO, José Ignacio Linares; SORIA, Beatriz Yolanda Moratilla. *El hidrógeno y la energía*. Asociación Nacional de Ingenieros del ICAI, 2007.
- [5] PORTO MATO, Pedro. Descarbonización del sector del transporte en España con el hidrógeno verde. 2021.
- [6] COPA ORTEGA, Daniel José. Economía del hidrógeno hasta 2030. 2020.
- [7] HOLLADAY, Jamie D., et al. An overview of hydrogen production technologies. *Catalysis today*, 2009, 139.4: 244-260.
- [8] FERRACES AZCUNAGA, Alejandro; LÓPEZ GESTOSO, Óscar. Planta de producción de hidrógeno por reformado de gas natural. 2016.
- [9] VERMEERSCH ARMIJO, Javier Ignacio. Diseño y construcción de una celda demostrativa para la producción de hidrógeno a partir de la electrólisis del agua. 2018.
- [10] ARTEAGA-PÉREZ, Luis Ernesto, et al. Gasificación de biomasa para la producción sostenible de energía. Revisión de las tecnologías y barreras para su aplicación. *Afinidad*, 2015, 72.570.
- [11] MOTA TOLEDO, Noelia, et al. Producción de hidrógeno renovable mediante fotólisis de agua con luz solar. 2011.
- [12] VALERO, J. M., et al. Producción biológica de hidrógeno a partir de residuos. *Ingeniería química*, 2004, 414: 188-192.
- [13] CAYÓN, A., et al. Comportamiento de dos familias de aceros microaleados en condiciones de Fisuración Inducida por Hidrógeno. In: *Anales de Mecánica de la Fractura*. 2001. p. 97-106.
- [14] JUAREZ HERNANDEZ, Samuel, et al. Estado del arte y análisis de las principales aplicaciones energéticas del hidrógeno. Repositorio digital de acceso abierto de la Universidad Autónoma del Estado de Quintana Roo. 2020.

- [15] Tuvsud.com [en línia], [sense-data]. [consulta: 11 març 2023]. Disponible a: <https://www.tuvsud.com/es-es/temas/hidrogeno/cadena-valor-hidrogeno/aplicaciones-hidrogeno>.
- [16] GT Usos H2. Ptehpc.org [en línia], [sense data]. [consulta: 11 març 2023]. Disponible a: [http://www.ptehpc.org/index.php?option=com\\_content&view=article&id=168&Itemid=57](http://www.ptehpc.org/index.php?option=com_content&view=article&id=168&Itemid=57).
- [17] GALLEGO, E.N., [sense data]. Obtención y aplicaciones del hidrógeno. Fenercom.com [en línia]. [consulta: 11 març 2023]. Disponible a: <https://www.fenercom.com/wp-content/uploads/2019/10/2018-01-17-Obtencion-y-aplicaciones-del-hidrogeno-CENTRO-NACIONAL-DEL-HIDROGENO-fenercom.pdf>.
- [18] ASENSIO, Paloma. Hidrógeno y pila de combustible. Obtenido de <http://www.fenercom.com/pdf/publicaciones/cuadernos-energias-renovables-paratodos-hidrogeno-y-pila-de-combustible>, 2007.
- [19] ¿Se puede producir hidrógeno, transportarlo y usarlo de manera segura?. AOP [en línia], 2021. [consulta: 08 març 2023]. Disponible a: <https://www.aop.es/blog/2021/03/23/se-puede-producir-hidrogeno-transportarlo-y-usarlo-de-manera-segura/>.
- [20] FÀBREGA RAMOS, Marc. Hidrógeno: Aplicación en motores de combustión interna. 2009.
- [21] SANTIAGO, O., 2017. Almacenamiento de hidrógeno comprimido: tipos de tanques. Apilados [en línia]. [consulta: 10 març 2023]. Disponible a: <https://apilados.com/blog/almacenamiento-hidrogeno-comprimido-tipos-tanques/>.
- [22] LLORENTE, F.B., 2020. El transporte de hidrógeno empleando portadores líquidos. Felipe Benjumea Llorente [en línia]. [consulta: 10 març 2023]. Disponible a: <https://felipebenjumeallorete.com/el-transporte-de-hidrogeno-empleando-portadores-liquidos>.
- [23] NIAZ, Saba; MANZOOR, Taniya; PANDITH, Altaf Hussain. Hydrogen storage: Materials, methods and perspectives. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2015, 50: 457-469.
- [24] BELLON MONSALVE, Daniela. Almacenamiento de hidrógeno mediante hidruros metálicos: Síntesis y caracterización. Repositorio Universidad de Santander. 2017.
- [25] UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE HIDALGO, [sin fecha]. Los ácidos carboxílicos. Edu.mx [en línia]. [consulta: 20 març 2023]. Disponible a: <https://www.uaeh.edu.mx/scige/boletin/prepa3/n8/m9.html>.
- [26] YE, Xinhao, et al. Spontaneous high-yield production of hydrogen from cellulosic materials and water catalyzed by enzyme cocktails. *ChemSusChem: Chemistry & Sustainability Energy & Materials*, 2009, 2.2: 149-152.

- [27] TEICHMANN, Daniel, et al. A future energy supply based on Liquid Organic Hydrogen Carriers (LOHC). *Energy & Environmental Science*, 2011, 4.8: 2767-2773.
- [28] MEDINA, MI Irma Rosa Martín; GUTIÉRREZ, MI Gabriela Rivadeneyra; CAUICH, Cesar Alberto Cab. Mecanismos de almacenamiento de hidrógeno en materiales nanoestructurados para aplicaciones en vehículos de transporte. *Ingeniería*, 2019, 23.3: 15-27.
- [29] INTRODUCCIÓ, 3. 2. 1., [sense data]. 3.2 Almacenamiento del hidrógeno. *Biblus.us.es* [en línia]. [consulta: 20 març 2023]. Disponible a: <https://biblus.us.es/bibing/proyectos/abreproy/3823/fichero/3.2+Almacenamiento+del+Hidr%C3%B3geno.pdf>.
- [30] ZÜTTEL, Andreas; BORGSCHULTE, Andreas; SCHLAPBACH, Louis. *Hydrogen as a future energy carrier*. 2008.
- [31] SASTRI, M. V. C.; VISWANATHAN, B. *Metal hydrides: fundamentals and applications*. Narosa Publishing House. Narosa Publishing House 1998.
- [32] VEZIROGLU, T. Nejat, et al. (ed.). *Hydrogen Materials Science and Chemistry of Carbon Nanomaterials: Proceedings of the NATO Advanced Research Workshop on Hydrogen Materials Science and Chemistry of Carbon Nanomaterials*, Sudak, Crimea, Ukraine, September 14-20, 2003. Springer Science & Business Media, 2006.
- [33] BUSQUÉ, Raquel, et al. Effect of metal hydride properties in hydrogen absorption through 2D-axisymmetric modeling and experimental testing in storage canisters. *international journal of hydrogen energy*, 2017, 42.30: 19114-19125.
- [34] BUSQUÉ, Raquel, et al. Mathematical modeling, numerical simulation and experimental comparison of the desorption process in a metal hydride hydrogen storage system. *international journal of hydrogen energy*, 2018, 43.35: 16929-16940.
- [35] CHAISE, Albin, et al. A simple criterion for estimating the effect of pressure gradients during hydrogen absorption in a hydride reactor. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2009, 52.19-20: 4564-4572.
- [36] CHAISE, Albin, et al. Experimental and numerical study of a magnesium hydride tank. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2010, 35.12: 6311-6322.
- [37] GUTA, Lemi; SUNDAR, S. Navier-Stokes-Brinkman system for interaction of viscous waves with a submerged porous structure. *Tamkang journal of mathematics*, 2010, 41.3: 217-243.
- [38] Chaise, Rango, Marty, Fruchart. Experimental and numerical study of a magnesium hydride tank. *Int J Hydrogen Energy* 2010, 35, 6311-22.

- [39] Bhourri, Burger, Numerical investigation of H<sub>2</sub> absorption in an adiabatic high temperature metal hydride reactor based on thermochemical heat storage: MGH<sub>2</sub> and MG(OH)<sub>2</sub> as reference materials. Int J Hydrogen Energy 2017, 16632-16644.
- [40] MYERS, Tim G.; FONT, Francesc; HENNESSY, Matt G. Mathematical modelling of carbon capture in a packed column by adsorption. Applied Energy, 2020, 278: 115565.



## Annex A: Esquema neumàtic de la instal·lació

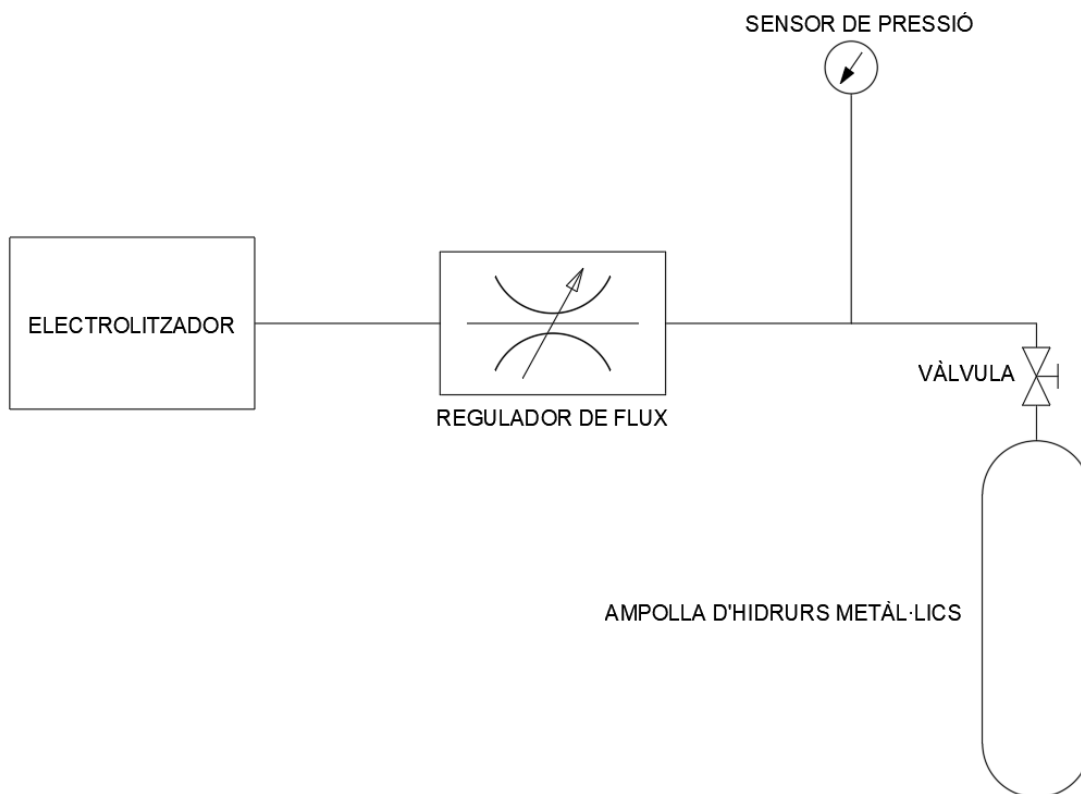


Figura A.1. Esquema de flux de la instal·lació per a la càrrega del tanc d'hidrurs metàl·lics. Elaboració pròpia.

## Annex B: Codi de Matlab pel tractament de les imatges

```

1  clc;
2  close all;
3  clear;
4  workspace;
5  format long g;
6  format compact;
7  fontSize = 15;
8
9  %=====
10 baseFileName = '2436.png';
11
12 folder = pwd;
13 fullFileName = fullfile(folder, baseFileName);
14 if ~isfile(fullFileName)
15     warningMessage = sprintf('Default image %s not found.\nPlease select one.', fullFileName);
16     uiwait(warndlg(warningMessage));
17
18     defaultFileName = fullfile(folder, '*.');
19     [baseFileName, folder] = uinputfile(defaultFileName, 'Specify a file');
20     if baseFileName == 0
21         return;
22     end
23     fullFileName = fullfile(folder, baseFileName);
24     return;
25 end
26 fprintf('Transforming image "%s" to a thermal image.\n', fullFileName);
27
28 %=====
29 hFig = figure;
30 originalRGBImage = imread(fullFileName);
31 [rows, columns, numberOfColorChannels] = size(originalRGBImage);
32 imshow(originalRGBImage, []);
33 hFig.WindowState = 'maximized';
34 axis on;
35 caption = sprintf('Original Pseudocolor Image, %s', baseFileName);
36 title(caption, 'FontSize', fontSize, 'Interpreter', 'None');
37 xlabel('Column', 'FontSize', fontSize, 'Interpreter', 'None');
38 ylabel('Row', 'FontSize', fontSize, 'Interpreter', 'None');
39 drawnow;
40
41 grayImage = min(originalRGBImage, [], 3);
42
43 %=====
44 roiPosition = GetRectangularROI('Drag a box out over the portion of the image you want to analyze.');
```

```

55     end
56
57     rectanglePosition = [imageCol1, imageRow1, imageCol2 - imageCol1, imageRow2 - imageRow1];
58     hold on;
59     rectangle('Position', rectanglePosition, 'EdgeColor', 'r', 'LineWidth', 2);
60     rgbImage = originalRGBImage(imageRow1 : imageRow2, imageCol1 : imageCol2, :);
61     roiPosition = GetRectangularROI('Drag a box out over the color bar only.');
```

```

62     colorBarRow1 = round(roiPosition(2));
63     colorBarRow2 = round(colorBarRow1 + roiPosition(4));
64     colorBarCol1 = round(roiPosition(1));
65     colorBarCol2 = round(colorBarCol1 + roiPosition(3));
66
67     if imageRow2 > rows || imageCol2 > columns
68         colorBarRow1 = min(colorBarRow1, rows);
69         colorBarRow2 = min(colorBarRow2, rows);
70         colorBarCol1 = min(colorBarCol1, columns);
71         colorBarCol2 = min(colorBarCol2, columns);
72     end
73
74     colorBarImage = originalRGBImage(colorBarRow1 : colorBarRow2, colorBarCol1 : colorBarCol2, :);
75     [cbr, cbg, cbb] = imsplit(colorBarImage);
76     blackMask = (cbr == 0) & (cbg == 0) & (cbb == 0);
77     allBlackRows = all(blackMask, 2);
78     allBlackColumns = all(blackMask, 1);
79     colorBarImage(:, allBlackColumns, :) = [];
80     colorBarImage(allBlackRows, :, :) = [];
81
82     %=====
83     if size(cbr, 1) > size(cbr, 2)
84
85         meanR = mean(cbr, 2);
86         meanG = mean(cbg, 2);
87         meanB = mean(cbb, 2);
88         end1String = 'top';
89         end2String = 'bottom';
90     else
91         meanR = mean(cbr, 1);
92         meanG = mean(cbg, 1);
93         meanB = mean(cbb, 1);
94         end1String = 'right';
95         end2String = 'left';
96     end
97     storedColorMap = [meanR(:), meanG(:), meanB(:)] / 255;
98     storedColorMap = flipud(storedColorMap);
99
100    %=====
101    highTemp = 31.1;
102    lowTemp = 20.1;
103
104    %=====
105    defaultValue = {sprintf('%1f', highTemp), sprintf('%1f', lowTemp)};
106    titleBar = 'Enter temperature range';
107    promptString1 = sprintf('Enter the temperature at the %s of the colorbar : ', end1String);
108    promptString2 = sprintf('Enter the temperature at the %s of the colorbar : ', end2String);
109    userPrompt = {promptString1, promptString2};
110    caUserInput = inputdlg(userPrompt, titleBar, 1, defaultValue);
111

```

```

111
112 if isempty(caUserInput),return,end
113 highTemp = str2double(caUserInput{1});
114 lowTemp = str2double(caUserInput{2});
115
116 if isnan(highTemp)
117     highTemp = str2double(defaultValue{1});
118     message = sprintf('I said it had to be a number.\nTry replacing the use.\nI will use %.2f and continue.', highTemp);
119     uiwait(warndlg(message));
120 end
121
122 if isnan(lowTemp)
123
124     lowTemp = str2double(defaultValue{2});
125     message = sprintf('I said it had to be a number.\nTry replacing the use.\nI will use %.2f and continue.', lowTemp);
126     uiwait(warndlg(message));
127 end
128
129 subplot(2, 3, 1);
130 imshow(originalRGBImage, []);
131 hFig.WindowState = 'maximized';
132 axis on;
133 caption = sprintf('Original Pseudocolor Image, %s', baseFileName);
134 title(caption, 'FontSize', fontSize, 'Interpreter', 'None');
135 xlabel('Column', 'FontSize', fontSize, 'Interpreter', 'None');
136 ylabel('Row', 'FontSize', fontSize, 'Interpreter', 'None');
137 drawnow;
138
139 rectanglePositionColorBar = [colorBarCol1, colorBarRow1, colorBarCol2 - colorBarCol1, colorBarRow2 - colorBarRow1];
140 hold on;
141 rectangle('Position', rectanglePosition, 'EdgeColor', 'r', 'LineWidth', 2);
142 rectangle('Position', rectanglePositionColorBar, 'EdgeColor', 'r', 'LineWidth', 2);
143
144 %=====
145 subplot(2, 3, 2);
146 imshow(rgbImage, []);
147 axis on;
148 caption = sprintf('Cropped Pseudocolor Image');
149 title(caption, 'FontSize', fontSize, 'Interpreter', 'None');
150 xlabel('Column', 'FontSize', fontSize, 'Interpreter', 'None');
151 ylabel('Row', 'FontSize', fontSize, 'Interpreter', 'None');
152 drawnow;
153 hp = impixelinfo();
154
155 subplot(2, 3, 3);
156 imshow(colorBarImage, []);
157 axis on;
158 impixelinfo;
159 caption = sprintf('Cropped Colorbar Image');
160 title(caption, 'FontSize', fontSize, 'Interpreter', 'None');
161 xlabel('Column', 'FontSize', fontSize, 'Interpreter', 'None');
162 ylabel('Row', 'FontSize', fontSize, 'Interpreter', 'None');
163 drawnow;
164
165 g = gcf;
166 g.WindowState = 'maximized';
167

```

```

167
168 g.Name = 'Demo by ImageAnalyst';
169 g.NumberTitle = 'Off';
170
171 %=====
172 indexedImage = rgb2ind(rgbImage, storedColorMap);
173 subplot(2, 3, 4);
174 imshow(indexedImage, []);
175 impixelinfo;
176 axis on;
177 caption = sprintf('Indexed Image (Gray Scale Thermal Image)');
178 title(caption, 'FontSize', fontSize, 'Interpreter', 'None');
179 xlabel('Column', 'FontSize', fontSize, 'Interpreter', 'None');
180 ylabel('Row', 'FontSize', fontSize, 'Interpreter', 'None');
181 drawnow;
182
183 %=====
184 thermalImage = lowTemp + (highTemp - lowTemp) * mat2gray(indexedImage);
185
186 subplot(2, 3, 5);
187 imshow(thermalImage, []);
188 axis on;
189 colorbar;
190 title('Floating Point Thermal (Temperature) Image', 'FontSize', fontSize, 'Interpreter', 'None');
191 xlabel('Column', 'FontSize', fontSize, 'Interpreter', 'None');
192 ylabel('Row', 'FontSize', fontSize, 'Interpreter', 'None');
193
194 hp = impixelinfo();
195 hp.Units = 'normalized';
196 hp.Position = [0.45, 0.03, 0.25, 0.02];
197
198 %=====
199 subplot(2, 3, 6);
200 histogram(thermalImage, 'Normalization', 'probability');
201 axis on;
202 grid on;
203 caption = sprintf('Histogram of Temperatures in Thermal Image');
204 title(caption, 'FontSize', fontSize, 'Interpreter', 'None');
205 xlabel('Temperature [Degrees]', 'FontSize', fontSize, 'Interpreter', 'None');
206 ylabel('Frequency [Pixel Count]', 'FontSize', fontSize, 'Interpreter', 'None');
207
208 maxTemperature = max(thermalImage(:));
209 fprintf('The maximum temperature in the image is %.2f\n', maxTemperature);
210 fprintf('Done! Thanks Image Analyst!\n');

```

Figura B.1

## Annex C: Codi de Matlab per a la solució del model matemàtic reduït

Amb aquest script, *Figura C.1*, es resol el model, tant pel cabal de 0,38 l/min com pel de 0,08 l/min. Per fer el canvi de cabal, s'ha de canviar el valor  $V_{dotn} = 0.38$ ; per  $V_{dotn} = 0.08$ .

```

3 clear all
4 close all
5
6 %%% physical parametres and experimental conditions
7 lamm = 9.5 ; %%% conductivitat tèrmica efectiva del medi
8 cpm = 500 ; %%% calor específic del medi metall (sòlid)
9 cpg = 14000 ; %%% calor específic del medi hidrogen (gas)
10 rhom = 6000 ; %%% densitat efectiva del metall/hidrur metàl·lic
11 eps = 0.44 ; %%% porositat
12 R = 8.314 ; %%% constant dels gasos
13 wt = 0.0594 ; %%% fracció de massa d'hidrogen en hidrur metàl·lic
14 M = 2.016e-3 ; %%% massa molar hidrogen
15 DH = 1000 ; %%% entalpia de reacció
16 pref = 0.1e5 ; %%% això és la p0 - pressió inicial
17 Tref = 22 + 273.15 ; %%% això és la T0 - temperatura inicial
18 k0 = 1e-3 ; %%% velocitat de reacció - constant cinètica
19 h = 5 ; %%% coeficient transferència calor (convecció)
20 height = 8.8e-2 ; %%% height of bottle
21 r = 1.1e-2 ; %%% bottle radius
22
23 %%% Calculated parameters
24 rhog0 = pref/((R/M)*Tref) ; %%% càlcul densitat inicial
25 alpham = lamm/((cpm*rhom*(1-eps)+eps*rhog0*cpg)) ; %%% alpha_T
26
27
28 %%% from bc at inlet
29 rhoH2ntp = 0.08375 ; %%% densitat hidrogen en condicions "normals"
30 Vdotn = 0.38 ; %%% cabal de volum "normal" (0.08 o 0.38)
31 Vdot = Vdotn*0.001/60 ; %%% cabal de volum "normal" transformat a m^3/s
32 mdot = rhoH2ntp*Vdot ; %%% cabal de massa obtingut del cabal "normal" de volum
33 A = pi*(r^2) ; %%% secció transversal del tanc
34 UD = mdot/A ; %%% flux de massa (kg/m^3*s)
35 u0 = mdot/(A*rhog0) ; %%% velocitat inicial de l'hidrogen a l'entrada del tanc
36 %%%
37
38 %%% obtained scales
39 tau = 1/k0 ; %%% escala de temps
40 L1 = tau*eps*cpg*UD/((cpm*rhom*(1-eps)+eps*rhog0*cpg)) ; %%% longitud característica convecció
41 L2 = sqrt(tau*alpham) ; %%% longitud característica difusió
42 DT = (DH/M)*wt/cpm ; %%% escala de temperatura
43 Lscale = L2 ; %%% escala de longitud = sqrt(tau*alpha_T)
44 delta1 = L1/L2 ; %%% parametre adimensional
45 delta2 = DT/Tref ; %%% parametre adimensional
46 delta3 = tau^2*h/(r*(cpm*rhom*(1-eps)+eps*rhog0*cpg)) ; %%% parametre adimensional
47 Biinv = lamm/(Lscale*h) ; %%% nombre invers de Biot
48 Lnon = height/Lscale ; %%% dimensionless domain size
49
50 [x,T,t,z] = numerics_ambient_reduced(Biinv,delta1,delta2,delta3,k0,Lnon) ;
51
52 %%% descomentar aquesta part per veure evolució dinàmica de T i alpha
53 %%% es veura l'evolució de les variable T i alpha adimensionalitzades
54 % figure(1)
55 % for n=1:length(t)
56 % plot(z,x(n,:),z,T(n,:))
57 % ylim([0 1])
58 % pause(0.0000001)

```

```

59 % end
60
61 figure(2)
62 plot(z*Lscale,(Tref+DT*T(1:1000:10000,:))-273)
63 ylabel('Temperatura (°C)')
64 xlabel('z (m)')
65
66 figure(3)
67 plot(z*Lscale,x(1:1000:10000,:))
68 ylabel('Fracció Transformada - \alpha')
69 xlabel('z (m)')
70
71 %time=t(10000)*tau/60
72 %timeend =t(end)*tau/60
73
74 temps_corbes = t(1:1000:10000)*tau/60; %%% en minuts
75
76 figure(4)
77 plot(t*tau/60,(Tref+DT*T(:,25))-273)
78 ylabel('T(t,x=L/2) (°C)')
79 xlabel('t (min)')
80
81 figure(5)
82 plot(t*tau/60,x(:,25))
83 ylabel('\alpha(t,x=L/2)')
84 xlabel('t (min)')
85
86 %%% descomentar la fila que calgui per guardar resultats per 0.08 o 0.38
87 %save('results_0_08.mat','x','T','t','z','tau','DT','Lscale','Tref')
88 %save('results_0_38.mat','x','T','t','z','tau','DT','Lscale','Tref')

```

Figura C.1

Si es vol executar el cas en que k és constant, s’ha de comentar la línia Option 2 i descomentar la línia Option 1 de la Figura C.2. Seguidament s’executa l’script de la Figura C.1.

```

2 function [x,T,t,z] = numerics_ambient_reduced(Biinv,delta1,delta2,delta3,k0,Lnon)
3
4 Nz = 50 ;
5 zini = 0 ;
6 zend = Lnon ;
7 Dz = (zend-zini)/Nz ;
8 z = [zini:Dz:zend] ;
9
10 tini = 0 ;
11 tend = 10 ;
12
13 %%% Dt chosen to satisfy stability conditions %%%%%%%%%%%
14 Dt = (1/4)*Dz*Dz ;
15 %%%%%%%%%%%
16
17 t = [tini:Dt:tend] ;
18
19 x = zeros(length(t),length(z)) ;
20 T = zeros(length(t),length(z)) ;
21 x0 = zeros(size(z)) ; x1 = zeros(size(z)) ;
22 T0 = zeros(size(z)) ; T1 = zeros(size(z)) ;
23
24 %%%%%%%%%%% initial conditions %%%%%%%%%%%
25 x0 = 0.01*ones(size(x0)) ; %%% something small
26 %%%%%%%%%%%
27
28 k = zeros(size(z)) ;
29 dxdt = zeros(size(z)) ;
30
31 for n=2:length(t)
32     for i=2:Nz
33
34         %%% preliminary calculations
35         k(i) = k0 ;
36         %dxdt(i) = (k(i)/k0).*(1-x0(i)) ; %%% Option 1
37         dxdt(i) = ((1+(2*z(i)/Lnon))/2)*(k(i)/k0).*(1-x0(i)) ; %%% Option 2
38
39         %%% find unknowns
40         x1(i) = x0(i) + Dt*dxdt(i) ;
41         T1(i) = T0(i) + (Dt/(Dz*Dz))*(T0(i+1)-2*T0(i)+T0(i-1)) ...
42             - Dt*delta3*T0(i) + Dt*dxdt(i) ...
43             + Dt*((delta1*(1+delta2*T0(i))/Lnon)-...
44                 delta1*delta2*((Lnon-z(i))/Lnon)*((T0(i+1)-T0(i-1))/(2*Dz))) ;

```

```

45     end
46     %%%% bc for T
47     T1(1) = (1/(3+(2*Dz/Biinv)))*(4*T1(2)-T1(3)) ;
48     T1(end) = (1/(3+(2*Dz/Biinv)))*(4*T1(end-1)-T1(end-2)) ;
49
50     %%%% bc for x
51     k(1) = k0 ;
52     %dxdt(1) = (k(1)./k0).*(1-x0(1)) ; %%% Option 1
53     dxdt(1) = ((1+(2*z(1)/Lnon))/2)*(k(1)./k0).*(1-x0(1)) ; %%% Option 2
54     x1(1) = x0(1) + Dt*dxdt(1) ;
55
56     k(end) = k0 ;
57     %dxdt(end) = (k(end)./k0).*(1-x0(end)) ; %%% Option 1
58     dxdt(end) = ((1+(2*z(end)/Lnon))/2)*(k(end)./k0).*(1-x0(end)) ; %%% Option 2
59     x1(end) = x0(end) + Dt*dxdt(end) ;
60
61     %%%% UPDATE VARIABLES
62     x0 = x1 ; T0 = T1 ;
63
64     %%%% SAVE SOLUTIONS
65     x(n,:) = x1 ; T(n,:) = T1 ;
66 end

```

Figura C.2