



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

LICENCIATURA EN CIENCIA DE MATERIALES SUSTENTABLES

ESCUELA NACIONAL DE ESTUDIOS SUPERIORES UNIDAD MORELIA

Modelado y simulación del flujo en una
configuración de electrodo para baterías de
metal líquido

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

LICENCIADA EN CIENCIA DE MATERIALES SUSTENTABLES EN EL ÁREA
DE DESARROLLO TECNOLÓGICO

P R E S E N T A:

KARLA PAOLA ACOSTA ZAMORA

DIRECTOR:

DR. ALBERTO BELTRÁN MORALES

MORELIA, MICHOACÁN

ENERO, 2019



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
ESCUELA NACIONAL DE ESTUDIOS SUPERIORES, UNIDAD MORELIA
SECRETARÍA GENERAL
SERVICIOS ESCOLARES

MTRA. IVONNE RAMÍREZ WENCE
DIRECTORA
DIRECCIÓN GENERAL DE ADMINISTRACIÓN ESCOLAR
PRESENTE

Por medio de la presente me permito informar a usted que en la **sesión ordinaria 12** del **H. Consejo Técnico** de la Escuela Nacional de Estudios Superiores (ENES) Unidad Morelia celebrada el día **05 de diciembre del 2018**, acordó poner a su consideración el siguiente jurado para la presentación del Trabajo Profesional del alumno (a) **Karla Paola Acosta Zamora** de la Licenciatura en **Ciencias de Materiales Sustentables**, con número de cuenta **415054911**, con la tesis titulada: "Modelado y simulación del flujo de una configuración de electrodo para baterías de metal líquido", **bajo la dirección como tutor del** Dr. Alberto Beltrán Morales. El jurado queda integrado de la siguiente manera:

Presidente:	Dr. Oracio Navarro Chávez
Vocal:	Dra. Adriana Gazol Patiño
Secretario:	Dr. Alberto Beltrán Morales
Suplente 1:	Dr. José Núñez González
Suplente 2:	Dr. Ricardo Becerril Bárcenas

Sin otro particular, quedo de usted.

Atentamente
"POR MI RAZA HABLARA EL ESPIRITU"
Morelia, Michoacán a, 22 de enero del 2019.


DR. VÍCTOR HUGO ANAYA MUÑOZ
SECRETARIO GENERAL

AGRADECIMIENTOS INSTITUCIONALES

Agradezco la beca otorgada por el Programa de Apoyo a Proyectos de Investigación e Innovación Tecnológica (PAPIIT) de la UNAM, proyecto UNAM-DGAPA-PAPIIT IA 102017 *Estudio de campos magnéticos inducidos en flujos Magnetohidrodinámicos*.

Agradezco también, el apoyo del Fondo de Sustentabilidad Energética a través del proyecto SENER CONACYT 2014 246911 Clúster de Biocombustibles Sólidos para la Generación Térmica y Eléctrica por el financiamiento del software y equipo de cómputo utilizado en este trabajo.

Se agradecen las becas de Manutención UNAM recibidas en el transcurso de la licenciatura.

Se agradecen los comentarios y opiniones así como su disponibilidad para revisiones del Dr. Oracio Navarro, el Dr. José Núñez, la Dra. Adriana Gazol y el Dr. Ricardo Becerril.

Se hace un agradecimiento especial al Dr. José Núñez por su creatividad y sugerencias las cuales me ayudaron mucho a resolver el problema tratado.

Agradezco el apoyo incondicional del mi director de Tesis, el Dr. Alberto Beltrán por su alta disponibilidad para resolverme dudas, su paciencia y su trabajo.

Agradezco a todos mis profesores de la licenciatura por su apoyo en mi formación, en especial a la Dra. Yesenia Arredondo y al Dr. Joel Vargas los cuales despertaron mi interés en las ciencias, Así como a la Dra. Gazol que también contribuyó a formar mi interés científico en la última etapa.

Se agradece al departamento de servicios escolares, en específico al Lic. Alejandro Rebollar y al Lic. Agustín Martínez Morales por su orientación para realizar los trámites necesarios.

Finalmente agradezco el apoyo de mis compañeros de la licenciatura.

AGRADECIMIENTOS PERSONALES

Agradezco a mis padres por estar siempre conmigo, sus consejos, paciencia y comprensión a lo largo de mi vida.

A Dany y Fer, mis hermanas, las cuales me brindan apoyo siempre que pueden y me hacen pasarla bien.

A Guzmán por su cercanía, ayuda y comprensión en esta etapa.

A mi tío Luis por sus consejos y a toda mi familia por quererme y apoyarme siempre.

Finalmente a mi maestro Pavel.

RESUMEN

En este trabajo se estudia numéricamente el flujo generado en una configuración de electrodo para baterías de metal líquido. El electrodo de metal líquido consiste un fluido conductor confinado en una cavidad cilíndrica con paredes superior e inferior conductoras; a través de él, se hace circular corriente en presencia de un campo magnético, lo que genera una fuerza de Lorentz encargada de agitar al fluido. Particularmente, se usa un electrolito y la corriente se impone de manera axial a través de una diferencia de potencial; el campo magnético es administrado externamente mediante un imán permanente. El caso es modelado mediante el software comercial COMSOL Multiphysics[®] utilizando ecuaciones tanto de dinámica de fluidos como de campos electromagnéticos, llegando a dos formulaciones magnetohidrodinámicas (MHD). Se obtienen resultados para el campo magnético generado por imanes y la velocidad de flujo; estos son validados con experimentos. En general, se analiza el efecto en el flujo de las propiedades físicas de los fluidos así como de la intensidad de campo magnético y corriente; además, se comparan los resultados de las formulaciones MHD utilizadas.

Palabras clave: baterías de metal líquido, electrodo de metal líquido, fuerza de Lorentz, magnetohidrodinámica (MHD).

ABSTRACT

In this work, the electromagnetically driven flow in an electrode configuration for liquid metal batteries is studied from a numerical point of view. The liquid metal electrode is composed of a cylindrical cavity and two conducting electrodes on the top and bottom lids, it is filled with a conducting fluid; a direct electrical current interacts with a stationary magnetic field, generating a Lorentz force that stirs the flow. Specifically, an electrolyte is used as working fluid and a direct current is imposed in the axial direction by a potential difference between the electrodes. The stationary magnetic field is externally applied by a permanent magnet. A numerical solution is implemented using the commercial software COMSOL Multiphysics[®] combining equations of electromagnetic fields and hydrodynamics; two magnetohydrodynamic (MHD) formulations are studied. Numerical results for the magnetic field generated by the magnet and the flow velocity field are compared with experimental measurements. In general, the physical properties effect on the flow dynamic is analyzed, as well as, different values for the magnetic field and electric current magnitudes; finally, results from both MHD formulations are compared.

Keywords: Liquid metal batteries, liquid metal electrode, Lorentz force, magnetohydrodynamics (MHD).

CONTENIDO

AGRADECIMIENTOS INSTITUCIONALES	V
AGRADECIMIENTOS PERSONALES	VII
RESUMEN	IX
1 INTRODUCCIÓN	3
1.1 Introducción	3
1.2 Objetivos	5
1.2.1 Objetivo general	5
1.2.2 Objetivos particulares	5
1.3 Antecedentes	6
1.3.1 Baterías de Metal Líquido	6
1.3.2 Trabajos en magnetohidrodinámica utilizando el software COMSOL Multiphysics®	7
1.3.3 Grupo de ahorro y almacenamiento de energía de la Unidad Morelia del Instituto de investigaciones en Materiales	7
2 ECUACIONES DE LA MAGNETOHIDRODINÁMICA (MHD)	9
2.1 Ecuaciones del electromagnetismo	9
2.1.1 Ecuaciones de Maxwell y constitutivas	9
2.1.2 La ley de Ohm	10
2.1.3 La fuerza de Lorentz	10
2.1.4 Aproximaciones MHD para las ecuaciones electromagnéticas	11
2.1.5 Condiciones de frontera	12
2.1.6 Potenciales electromagnéticos	13
2.2 Ecuaciones hidrodinámicas	14
2.2.1 Condiciones de frontera	15
2.3 Formulaciones MHD	15
3 MODELADO DEL FLUJO EN UN ELECTRODO DE METAL LÍQUIDO (EML)	17
3.1 Modelo físico	17
3.1.1 Propiedades de los electrolitos	17
3.1.2 Imanes permanentes	18
3.2 Mallado de geometría	19
3.3 Algoritmos de solución	22

3.3.1	Formulación de potencial eléctrico (ϕ)	22
3.3.2	Formulación de potencial vectorial magnético (\mathbf{A})	24
4	RESULTADOS	27
4.1	Discusión	27
4.1.1	Campo magnético	27
4.1.2	Velocidad	28
4.2	Validación de resultados	30
4.2.1	Perfiles de campo magnético	30
4.2.2	Perfiles de velocidad	32
4.2.3	Energía cinética	34
4.3	Estudio paramétrico	35
4.3.1	Velocidad	35
4.3.2	Energía cinética	39
5	CONCLUSIONES Y TRABAJO FUTURO	43
5.1	Conclusiones	43
5.2	Trabajo futuro	43
A	DETERMINACIÓN EXPERIMENTAL DEL CAMPO MAGNÉTICO	45
B	DETERMINACIÓN EXPERIMENTAL DE LA VELOCIDAD	47
C	VALIDACIÓN NUMÉRICA DE LA FORMULACIÓN DE POTENCIAL ELÉCTRICO	49
	BIBLIOGRAFÍA	53

LISTA DE FIGURAS

1-1	Esquema de BML, EML y configuración de EML.	4
2-1	Las condiciones de frontera para el campo magnético \mathbf{B} muestran que la componente normal es igual para campos medios. Para el campo \mathbf{H} es posible dibujar una trayectoria stokesiana con un elemento de grosor lo suficientemente pequeño. . . .	12
3-1	Cavidad cilíndrica llena de un electrolito y electrodos de cobre por los cuales se inyecta una corriente e imán permanente.	18
3-2	Imanes de la aleación NdFeB usados en el modelo.	19
3-3	Plano para generar una geometría <i>o-grid</i> para el dominio del fluido a la izquierda. Geometría de la cavidad cilíndrica, electrodos de cobre e imán a la derecha.	20
3-4	Geometría generada en COMSOL Multiphysics [®]	20
3-5	Mallado del dominio del fluido en forma <i>o-grid</i> (a la izquierda) y mallado del cilindro en conjunto con electrodos e imán, ambas mallas son hexaédricas.	21
3-6	Mallado de todo el dominio; dentro de él la geometría cilíndrica y el bloque que representa al imán con elementos hexaédricos, el bloque grande representa un domino de aire con elementos tetraédricos.	21
3-7	Metodología empleada para resolver el flujo en la formulación de potencial eléctrico, ϕ	23
3-8	Metodología empleada para resolver el flujo en la formulación de potencial magnético.	26
4-1	Líneas de corriente del campo magnético del imán vistos en distintos planos.	27
4-2	Esquema de la fuerza de Lorentz en la cavidad cilíndrica.	28
4-3	Isocontornos, líneas de corriente y campo de velocidad (a) 5 mA y (b) 500 mA.	28
4-4	Isocontornos para la magnitud de la velocidad para los casos de 5 mA a la izquierda y 500 mA a la derecha para los 3 planos centrales de flujo.	29
4-5	Perfiles de campo magnético experimentales y formulación de potencial eléctrico para el imán cuadrado sobre el eje X, Y Z (de izquierda a derecha).	30
4-6	Perfiles de campo magnético experimentales y formulación de potencial vectorial magnético para el imán cuadrado sobre el eje X, Y Z (de izquierda a derecha). . . .	31
4-7	Perfiles de campo magnético experimentales y formulación de potencial eléctrico para el imán rectangular sobre el eje X, Y Z (de izquierda a derecha).	31
4-8	Perfiles de campo magnético experimentales y formulación de potencial vectorial magnético para el imán cuadrado sobre el eje X, Y Z (de izquierda a derecha). . . .	31

4-9	Perfiles de velocidad a lo largo del eje Y con el campo magnético del imán cuadrado y una corriente aplicada de 5 mA.	32
4-10	Perfiles de velocidad a lo largo del eje Z con el campo magnético del imán cuadrado y una corriente aplicada de 5 mA.	32
4-11	Perfiles de velocidad a lo largo del eje Y con el campo magnético del imán rectangular y una corriente aplicada de 5mA.	33
4-12	Perfiles de velocidad a lo largo del eje Z con el campo magnético del imán rectangular y una corriente aplicada de 5 mA.	33
4-13	Energía cinética promedio en el plano YZ para (a) la formulación ϕ y (b) la formulación A	34
4-14	Energía cinética promedio sobre el volumen para (a) la formulación ϕ y (b) la formulación A	34
4-15	Componente u de la velocidad a lo largo del eje X para una corriente de 10 mA con el campo magnético del imán cuadrado (izquierda) y el imán rectangular (derecha).	35
4-16	Componente u de la velocidad a lo largo del eje Y para una corriente de 10 mA con el campo magnético del imán cuadrado (izquierda) y el imán rectangular (derecha).	36
4-17	Componente u de la velocidad a lo largo del eje Z para una corriente de 10 mA con el campo magnético del imán cuadrado (izquierda) y el imán rectangular (derecha)	36
4-18	Componente u de la velocidad a lo largo del eje X para una corriente de 100 mA con el campo magnético del imán cuadrado (izquierda) y el imán rectangular (derecha).	37
4-19	Componente u de la velocidad a lo largo del eje Y para una corriente de 100 mA con el campo magnético del imán cuadrado (izquierda) y el imán rectangular (derecha).	37
4-20	Componente u de la velocidad a lo largo del eje Z para una corriente de 100 mA con el campo magnético del imán cuadrado (izquierda) y el imán rectangular (derecha)	38
4-21	Componente u de la velocidad a lo largo del eje X para una corriente de 500 mA con el campo magnético del imán cuadrado (izquierda) y el imán rectangular (derecha).	38
4-22	Componente u de la velocidad a lo largo del eje Y para una corriente de 500 mA con el campo magnético del imán cuadrado (izquierda) y el imán rectangular (derecha).	39
4-23	Componente u de la velocidad a lo largo del eje Z para una corriente de 500 mA con el campo magnético del imán cuadrado (izquierda) y el imán rectangular (derecha)	39
4-24	Energía cinética promedio en el plano YZ para la formulación de potencial eléctrico (a la izquierda) y la formulación de potencial vectorial magnético (a la derecha).	40
4-25	Isocontornos de energía cinética en el plano YZ para el imán rectangular (a)-(d) y corrientes de 5,10,100 y 500mA respectivamente; y para el imán cuadrado (e)-(h) con corrientes de 5, 10, 100 y 500 mA respectivamente.	40
4-26	Energía cinética sobre el dominio de fluido para la formulación ϕ (izquierda) y la formulación A (derecha).	41
A.1	Probeta de efecto Hall usada para medir las componentes del campo magnético del imán.	45
B.1	Bosquejo en tres dimensiones del prototipo experimental.	47

B.2	Prototipo experimental con electrodos de cobre y una cavidad llena de agua para reducir aberración óptica.	48
B.3	Montaje experimental e implementación de la técnica PIV.	48
C.1	Ducto de sección transversal cuadrada.	49
C.2	(a) Geometría de ducto y (b) mallado refinado a las fronteras.	50
C.3	Perfiles de velocidad $u(z)$ para valores de $Ha = 10, 50, 100$	52

LISTA DE TABLAS

2-1	Ecuaciones electromagnéticas en MHD.	12
3-1	Densidad, viscosidad dinámica y conductividad de los fluidos estudiados a una concentración de 8.6% relación masa/masa.	18
3-2	Medidas de imanes simulados.	19
3-3	Valores calculados para la condición de frontera para el potencial eléctrico.	24
c.1	Valores de u_0 y Ha simulados.	51

CAPÍTULO 1

INTRODUCCIÓN

1.1. Introducción

La inminente carencia de fuentes de combustible fósil así como su alta huella ecológica han propiciado el uso de fuentes de energía renovable tales como la energía eólica y solar fotovoltaica. En general, las fuentes renovables de energía se han vuelto lo suficientemente eficientes para ser rentables; sin embargo, su principal problema es la intermitencia, por lo cual, es necesario desarrollar formas de almacenamiento de energía a gran escala. Una de las propuestas más recientes para solucionar lo anterior son las baterías de metal líquido (BML) (Sadoway y col. 2008).

Las BML son atractivas para el almacenamiento de energía debido a su baja huella ecológica y su alta eficiencia (Kim y col. 2012; Kim y col. 2013). La producción de sistemas de almacenamiento a gran escala basadas en la tecnología de ion litio no es completamente viable debido a que los materiales necesarios para su fabricación son cada vez más limitados. Los sistemas de almacenamiento a gran escala requieren dos aplicaciones principales: (a) proveer energía, es decir, tener un alto tiempo de descarga, esto es útil, por ejemplo, cuando se tiene un panel fotovoltaico con el cual se produjo energía durante el día, la cual debe administrarse durante la noche; (b) alta potencia que consiste en almacenar una gran cantidad de energía en poco tiempo.

Existen varias tecnologías para abastecer los requerimientos antes mencionados para un sistema de almacenamiento a gran escala, sin embargo esto se hace por separado. Las BML pueden satisfacer estas dos necesidades al mismo tiempo, por lo que tienen un alto potencial para usarse como dispositivos de almacenamiento de energía.

Una batería de metal líquido consiste en una celda electroquímica conformada por dos electrodos de metal en estado líquido separados por una sal fundida formando un arreglo de tres capas separadas por sus inmiscibilidad y diferencias de densidad, como lo muestra la Figura 1-1. Los metales de los electrodos deben tener temperaturas de fusión menores a 1000°C y una conductividad mayor a la de la sal fundida (Kelley y Sadoway 2014).

La principal desventaja de las BML, razón por la cual aún no existen tales configuraciones de manera comercial, es su alta temperatura de operación. Otro inconveniente se debe a que el flujo de corriente en los electrodos de las BML es mucho mayor que en las baterías convencionales el cual pueden generar cortocircuitos. Así, las BML no solo se han estudiado desde un punto de vista electroquímico; recientemente también se han estudiado mediante la dinámica de fluidos (Kelley y Sadoway 2014) lo cual resulta complejo debido a distintos factores: adicionalmente a la alta temperatura de fusión de los electrodos, se tiene que las corrientes del proceso de carga-descarga de la batería generan calentamiento óhmico produciendo gradientes de temperatura; el sistema se ve regido por la fuerza de Lorentz, debido a la presencia de corrientes eléctricas y campos magnéticos; la transferencia de carga entre electrodos genera un gradiente de densidad; todo lo anterior genera distintos patrones de flujo al interior de las BML.

Otros factores que influyen en el movimiento de los fluidos dentro las BML se deben la tensión superficial del arreglo en capas de los electrodos, la cual puede generar fuerzas de deformación en la interfaz de los electrodos, por último, el movimiento de los fluidos se presta a generar campos magnéticos inducidos generando también flujos que intervienen en el funcionamiento de las BML; sin embargo, si el efecto de los campos electromagnéticos se controla pueden ayudar al buen funcionamiento de las baterías (Ashour y col. 2018).

Conocer los fenómenos anteriormente descritos en las BML es altamente complejo por lo cual se han estudiado primeramente los electrodos de estas. Tales estudios son importantes porque pueden predecir la óptima operación o fallo de las BML.

El presente trabajo se enfoca en estudiar numéricamente mediante el software comercial COMSOL Multiphysics® (COMSOL 2017) la dinámica de flujo generada por un fluido newtoniano y conductor de electricidad, confinado en una cavidad con geometría cilíndrica por la cual se hace circular una corriente eléctrica en la dirección axial y se encuentra en presencia de un campo magnético. Lo anterior es correspondiente con una configuración de un electrodo de metal líquido (EML) (como Kelley y Sadoway (2014) lo define) en un proceso de carga-descarga de una batería. La Figura 1-1 representa la relación entre la configuración de electrodo de metal líquido elegida y las BML.

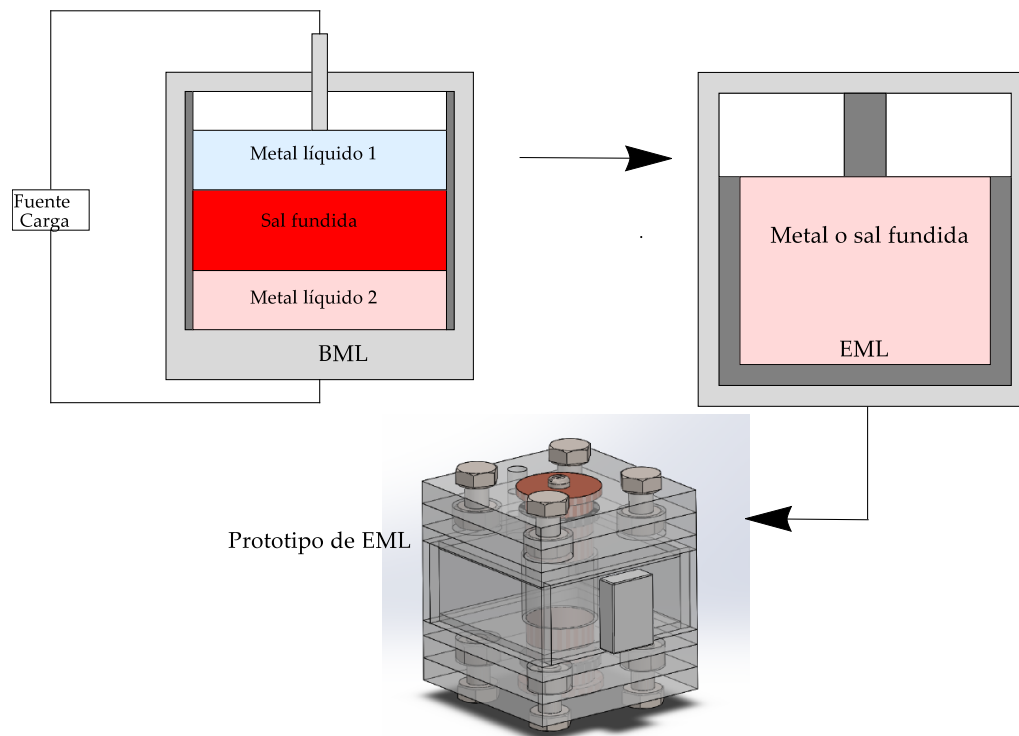


Figura 1-1.: Esquema de BML, EML y configuración de EML.

Para generar la configuración de dicho EML se utilizan como fluidos de trabajo dos soluciones electrolíticas, una compuesta por bicarbonato de sodio (NaHCO_3) y la otra hecha de cloruro de potasio (KCl). Ambos

fluidos presentan propiedades físicas distintas, por lo que se espera que el flujo generado dentro del EML cambie en función del fluido utilizado. Además, se administrarán distintos valores de corriente eléctrica y se estudiará el efecto de dos intensidades de campo magnético con distinta distribución espacial.

El hecho de variar los parámetros en la simulación se debe a que se quiere analizar el efecto de la intensidad del campo magnético, la corriente eléctrica aplicada y la conductividad eléctrica del fluido, ya que se cree que la velocidad del flujo en el EML depende estrictamente de la fuerza electromagnética que se le administre.

Para evaluar lo anterior se resuelven numéricamente las ecuaciones de conservación de masa y cantidad de movimiento acopladas mediante la fuerza de Lorentz con las ecuaciones de Maxwell lo que se conoce como magnetohidrodinámica (MHD); en particular, se estudian dos aproximaciones MHD distintas (Beltrán 2010), una de ellas eligiendo como variable electromagnética al potencial eléctrico mientras que la otra resuelve el potencial vectorial magnético.

A lo largo de este trabajo, primeramente se presentan los antecedentes de las BML así como los que respectan al uso de COMSOL Multiphysics® para resolver problemas MHD, después se habla de las ecuaciones gobernantes para los fluidos de trabajo y para campos electromagnéticos; posteriormente se explica el modelo físico de este estudio y cómo se resuelve el flujo en él. Finalmente se presentan los resultados obtenidos y las conclusiones, así como el trabajo a futuro.

1.2. Objetivos

Los objetivos de este trabajo se resumen en lo siguiente.

1.2.1. Objetivo general

Predecir numéricamente el flujo de electrolitos generado en una configuración de electrodo de metal líquido (EML) en donde se tiene una fuerza de Lorentz debida a la interacción de una corriente eléctrica y un campo magnético. En particular, resolver las ecuaciones de la magnetohidrodinámica mediante el software COMSOL Multiphysics®.

1.2.2. Objetivos particulares

1. Obtener soluciones numéricas para el campo magnético de dos imanes con distinto tamaño en relación a la cavidad del flujo.
2. Obtener soluciones numéricas para el campo de velocidad del flujo dentro del EML para electrolitos distintos.
3. Comparar los resultados numéricos con resultados experimentales reportados por el grupo de investigación en ahorro y almacenamiento de energía de la Unidad Morelia del Instituto de Investigaciones en Materiales.
4. Comparar los resultados numéricos obtenidos de dos formulaciones distintas para la variable electromagnética: potencial escalar eléctrico y potencial vectorial magnético.
5. Determinar el efecto de las propiedades físicas de los fluidos, la intensidad de corriente eléctrica y la intensidad de campo magnético en la velocidad del flujo.

1.3. Antecedentes

En esta sección se verán algunos trabajos previos a este estudio, para ello se hablará de tres vertientes principales: trabajos sobre estudio y desarrollo de las baterías de metal líquido, trabajos con el software COMSOL Multiphysics® para resolver problemas magnetohidrodinámicos y los trabajos que realiza el grupo de investigación en ahorro y almacenamiento de energía de la Unidad Morelia del Instituto de Investigaciones en Materiales de la UNAM ya que muchos de los resultados aquí mostrados están validados con resultados experimentales de este.

1.3.1. Baterías de Metal Líquido

Si bien, la tesis se enfoca principalmente en el estudio de fenómenos de transporte en un electrodo de metal líquido (EML), es necesario mencionar el avance y desarrollo histórico de las BML.

Las baterías de metal líquido son celdas electroquímicas con un arreglo en tres capas de metal-electrolito-metal, donde los componentes se encuentran fundidos; este arreglo corresponde de manera similar a las celdas de reducción de aluminio propuestas a principios del siglo XX por Hoopes (1925), tecnología muy empleada hasta ahora debido a que el aluminio obtenido de este proceso es de alta pureza. Posteriormente, en la época de la guerra fría se tuvo la idea de fabricar dispositivos para generar energía, tales como las celdas térmicamente regenerativas (Arnold y col. 1951), las cuales estaban diseñadas para transformar calor en energía eléctrica, con esto se puede concluir que las BML no son una idea completamente nueva ya que en el pasado hubo intentos por desarrollar celdas electroquímicas de metal en estado líquido para producción y almacenamiento de energía, sin embargo, estos dispositivos fueron descartados debido a sus bajas eficiencias (Kim y col. 2012). Finalmente, un grupo del MIT retomó el trabajo de las celdas térmicamente regenerativas para proponer un prototipo de BML (Sadoway y col. 2008) basadas en electrodos de magnesio-antimonio (Bradwell y col. 2012), después de este trabajo se han propuesto distintas aleaciones para obtener metales líquidos y electrolitos a bajas temperaturas de fusión (Kim y col. 2013; Ouchi y col. 2014; Wang y col. 2014; Ning y col. 2015; Spatocco y col. 2015; Ouchi y col. 2016; Xu y col. 2016; Holubowitch y col. 2016; Lichtenstein y col. 2017; Yeo y col. 2018; Li y col. 2018; Kim y col. 2012). Como ánodo se utilizan metales del grupo 1 y 2 de la tabla periódica debido a sus bajas electronegatividades y alta abundancia en la tierra y como cátodo metales y metaloides con alta electronegatividad como Zn, Cd, Hg, Al, Ga, In, Tl, Sn, Sb, Te, Pb y Bi, así como aleaciones de ellos como explica Kim y col. (2012); en los trabajos anteriores se intentan encontrar combinaciones de materiales con mejores propiedades electroquímicas para así producir distintos prototipos de BML.

El comportamiento físico de las BML se ve afectado por la dinámica de fluidos, esto fue sugerido en 2011 por Stefani y col. (2011), donde se habló de la posible presencia de la inestabilidad de Tayler¹ (Tayler 1963) que posteriormente fue demostrada experimentalmente en columnas de metal líquido (Seilmayer y col. 2012) las cuales seguían una geometría similar a la propuesta para las BML, consecuentemente se realizaron estudios numéricos más detallados sobre esta inestabilidad magnetohidrodinámica (Weber y col. 2013; Weber y col. 2014; Herreman y col. 2015).

El estudio de la inestabilidad de Tayler ha dado lugar a estudiar tanto numérica como experimentalmente otros fenómenos generados en las baterías de metal líquido como la convección térmica (Kelley y Sadoway 2014; Schumacher y col. 2015; Shen y Zikanov 2016; Beltrán 2017; Xiang y Zikanov 2017; Personnetaz

¹Inestabilidad que, suponiendo un sistema de coordenadas polares, cuando hay una corriente axial que induce un campo azimutal con la cual existe una presión magnética que incide radialmente hacia el centro; si esta presión es lo suficientemente importante, se genera inestabilidad. Más información en las referencias.

y col. 2018), y la convección térmica acoplada con flujos *electro-vortex*² se ha estudiado numéricamente por Weber y col. (2015) y Weber y col. (2018b) y experimentalmente por Ashour y col. (2018); un estudio donde se acopla la convección debido a la tensión superficial y la convección térmica en las BML fue realizado por Köllner y col. (2017). El flujo *electro-vortex* se estudia de forma numérica con una malla movable en Weber y col. (2018a). Finalmente, se han estudiado el efecto de inestabilidades interfaciales en las BML mediante distintos modelos (Zikanov 2015; Weber y col. 2017b; Weber y col. 2017a; Horstmann y col. 2018; Molokov 2018; Zikanov 2018).

1.3.2. Trabajos en magnetohidrodinámica utilizando el software COMSOL Multiphysics[®]

El software COMSOL Multiphysics[®] permite estudiar numéricamente campos electromagnéticos mediante su módulo *AC/DC* y dinámica de fluidos mediante su módulo *Fluid Dynamics*, ha sido una herramienta muy empleada para estudiar campos electromagnéticos (Butler y Zhang 2016) y fenómenos de transporte como la transferencia de calor (Brito y col. 2015) y la dinámica de fluidos (Tu y col. 2018), sin embargo, estudios magnetohidrodinámicos en este software solamente han sido reportado por Sahu y Bhattacharyay (2018) donde se validan problemas para el flujo de metales líquidos en ductos mediante un algoritmo basado en el potencial eléctrico como variable electromagnética.

1.3.3. Grupo de ahorro y almacenamiento de energía de la Unidad Morelia del Instituto de investigaciones en Materiales

El grupo de ahorro y almacenamiento de energía de la Unidad Morelia del Instituto de Investigaciones en Materiales de la UNAM ha empezado a estudiar modelos de electrodos para baterías de metal líquido en trabajos experimentales de Herrera-Ortega (2018) mediante la técnica de velocimetría por imágenes de partículas (PIV, por sus siglas en inglés) y el diseño de prototipos experimentales (Aguilasocho-Acosta 2018) para su posterior estudio mediante técnicas PIV y velocimetría de ultrasonido por efecto Doppler (UDV, por sus siglas en inglés). Este grupo también se encuentra interesado en estudiar campos magnéticos y su efecto en la generación de fuerzas de Lorentz para agitar de forma no intrusiva fluidos conductores; por lo anterior, se realizan mediciones experimentales utilizando probetas de efecto Hall (Beltrán y Carrillo-Ricci 2018).

²Se eligió dejar el término en inglés debido a que no existe una traducción completa al español y se refiere al flujo producido en fluidos conductores cuando una corriente eléctrica, al interactuar con el campo magnético que esta misma induce genera una presión magnética que mueve al fluido.

CAPÍTULO 2

ECUACIONES DE LA MAGNETOHIDRODINÁMICA (MHD)

La magnetohidrodinámica (MHD) es un área de la física encargada de estudiar la dinámica de fluidos en presencia de campos electromagnéticos generados por el movimiento de fluidos conductores como los son los electrolitos, los metales líquidos y el plasma. Los conductores en movimiento generan campos electromagnéticos, al interactuar entre ellos generan fuerzas las cuales influyen en el movimiento del fluido. Así pues, un electrodo de metal líquido por el cual circula corriente se rige a estos fenómenos.

2.1. Ecuaciones del electromagnetismo

Mediante las ecuaciones de Maxwell y las ecuaciones constitutivas, es decir, aquellas ecuaciones que dan información sobre el comportamiento de un material al exponerse a campos, es posible conocer la dinámica de campos electromagnéticos. En la MHD es posible hacer ciertas aproximaciones que simplifican las ecuaciones de Maxwell como se verá en esta sección.

2.1.1. Ecuaciones de Maxwell y constitutivas

Recordando que las ecuaciones de Maxwell tanto en su forma diferencial como integral son

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho_e, \quad \oint_S \mathbf{D} \cdot d\mathbf{S} = \int_V \rho_e dV, \quad (2-1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad \oint_S \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} = 0, \quad (2-2)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad \oint_C \mathbf{E} \cdot d\mathbf{l} = -\int_S \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \cdot d\mathbf{S}, \quad (2-3)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \quad \oint_C \mathbf{H} \cdot d\mathbf{l} = \int_S \left(\mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \right) \cdot d\mathbf{S}, \quad (2-4)$$

dónde $\rho_e [C m^{-3}]$ es la densidad de carga eléctrica por unidad de volumen; $\mathbf{E} [V m^{-1}]$ se refiere a la intensidad del campo eléctrico; $\mathbf{D} [C m^{-2}]$ es el vector de desplazamiento eléctrico; $\mathbf{H} [A m^{-1}]$ es la intensidad del campo magnético; $\mathbf{B} [T]$ es la densidad de flujo del campo magnético y por último $\mathbf{J} [A m^{-2}]$ es la densidad de corriente eléctrica.

La ecuación (2-1) es la ley de Gauss para el campo eléctrico, la ecuación (2-2) implica la no existencia de monopolos magnéticos. La ley de Faraday, ecuación (2-3), explica que la variación temporal del flujo del campo magnético induce un campo eléctrico y por último la ley de Ampère-Maxwell (2-4), establece el campo magnético generado por una corriente es proporcional a la corriente en el conductor, y a velocidades muy altas como la velocidad de propagación de ondas electromagnéticas, es posible que se generen corrientes de desplazamiento, que es la corrección de Maxwell a esta ecuación.

Además existen las relaciones constitutivas que ayudan a tener una descripción completa del comportamiento de los campos electromagnéticos en los materiales:

$$\mathbf{B} = \mu_0(\mathbf{H} + \mathbf{M}), \quad (2-5)$$

$$\mathbf{D} = \epsilon_0(\mathbf{E} + \mathbf{P}), \quad (2-6)$$

dónde \mathbf{M} [A m^{-1}] es la magnetización del material, \mathbf{P} [C m^{-2}] es el vector polarización y las constantes $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} [\text{T m A}^{-1}]$, $\epsilon_0 = 8.854 \times 10^{-12} [\text{C}^2 \text{N}^{-1} \text{m}^{-2}]$ son la permeabilidad magnética y la permitividad eléctrica en el vacío, respectivamente.

Considerando que el material es homogéneo, lineal, isotrópico y estacionario, las relaciones constitutivas se pueden reducir a

$$\mathbf{B} = \mu \mathbf{H}, \quad (2-7)$$

$$\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E}. \quad (2-8)$$

Combinando la ecuación (2-4) con la ecuación (2-1) y haciendo uso de la ecuación (2-2), es posible obtener la ecuación de continuidad para la densidad de corriente:

$$\nabla \cdot \mathbf{J} + \frac{\partial \rho_e}{\partial t} = 0. \quad (2-9)$$

2.1.2. La ley de Ohm

Una ecuación adicional es la ley de Ohm, la cual relaciona la densidad de corriente con el campo eléctrico en forma lineal:

$$\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}, \quad (2-10)$$

dónde σ [S m^{-1}] es la conductividad eléctrica.

Suponiendo que la contribución de campo eléctrico se ve afectada por una parte estacionaria y una parte inducida generada por la interacción entre la velocidad de los portadores de carga y el campo magnético aplicado, entonces la ecuación (2-10) se puede escribir como:

$$\mathbf{J} = \sigma (\mathbf{E} + \mathbf{u} \times \mathbf{B}). \quad (2-11)$$

2.1.3. La fuerza de Lorentz

La fuerza producida por los campos electromagnéticos que experimenta una partícula con carga q moviéndose a una velocidad \mathbf{u} tiene en general tres contribuciones:

$$\mathbf{F} = q (\mathbf{E}_s + \mathbf{E}_i + \mathbf{u} \times \mathbf{B}). \quad (2-12)$$

La primera contribución, la fuerza de Coulomb se debe al efecto del campo eléctrico estacionario \mathbf{E}_s ; además, como la carga se encuentra en movimiento se genera un campo eléctrico que varía en el tiempo \mathbf{E}_i y por último la fuerza generada por el campo magnético.

De acuerdo con la idea anterior, es posible definir un campo eléctrico total donde

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_s + \mathbf{E}_i, \quad (2-13)$$

entonces la ecuación (2-12) se puede escribir en términos de la contribución total del campo eléctrico

$$\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{u} \times \mathbf{B}), \quad (2-14)$$

sumando la contribución de carga sobre el volumen de un conductor se puede obtener la fuerza de Lorentz volumétrica donde $\sum q$ se convierte en una densidad de carga ρ_e y $\sum (q \mathbf{u})$ se define como la densidad de corriente \mathbf{J} , entonces la fuerza electromagnética por unidad de volumen se expresa como

$$\mathbf{F}_L = \rho_e \mathbf{E} + \mathbf{J} \times \mathbf{B}. \quad (2-15)$$

2.1.4. Aproximaciones MHD para las ecuaciones electromagnéticas

En el área de la magnetohidrodinámica, debido a las condiciones físicas de los fluidos conductores es posible simplificar las ecuaciones de los campos electromagnéticos como se describe a continuación: tomando la divergencia a la ley de Ohm, ecuación (2-11), y usando la ley de Gauss (2-1) y la ecuación de continuidad (2-9) es posible obtener:

$$\frac{\partial \rho_e}{\partial t} + \frac{\rho_e}{\tau} + \sigma \nabla \cdot (\mathbf{u} \times \mathbf{B}) = 0; \quad \text{con } \tau = \epsilon_0 / \sigma,$$

dónde τ es el tiempo de relajación el cual tiene un valor, en conductores típicos, de aproximadamente $10^{-18} s$ lo cual despreciable; considerando la expresión anterior y suponiendo que la velocidad es igual a cero (como en los sólidos), se tiene que $\frac{\partial \rho_e}{\partial t} + \frac{\rho_e}{\tau} = 0$, por lo tanto, la densidad de carga sigue un decaimiento exponencial $\rho_e = \rho_e(0) \exp(-t/\tau)$, lo cual conduce a que la densidad de carga siempre será cero en un conductor estacionario salvo en un periodo de tiempo extremadamente corto en el cual se alimenta el conductor con una diferencia de potencial.

Ahora bien, analizando el caso en que la velocidad no es cero (como en los fluidos conductores), considerando que la escala temporal del conductor es mayor al tiempo de relajación es posible despreciar la cantidad $\partial \rho_e / \partial t$, por lo cual se puede definir la ecuación

$$\rho_e = -\epsilon_0 \nabla \cdot (\mathbf{u} \times \mathbf{B}).$$

La densidad de carga, ρ_e , es demasiado pequeña para generar una fuerza eléctrica $\rho_e \mathbf{E}$, pues de la ecuación anterior se sigue que $\rho_e \sim \epsilon_0 u B / l$ además, como la ley de Ohm requiere que $\mathbf{E} \sim \mathbf{J} / \sigma$ entonces la fuerza eléctrica es

$$\rho_e \mathbf{E} \sim \left(\frac{\epsilon_0 u B}{l} \right) \left(\frac{J}{\sigma} \right) \sim \frac{u \tau}{l} J B,$$

debido a que u es una velocidad y τ tiene una escala de tiempo, la expresión $u \tau / l$ es adimensional por lo cual la fuerza eléctrica es proporcional únicamente a la densidad de corriente y al campo magnético, entonces la fuerza de Lorentz se ve reducida a

$$\mathbf{F}_L = \mathbf{J} \times \mathbf{B}, \quad (2-16)$$

lo anterior es equivalente a despreciar el término $\partial \rho_e / \partial t$ en la ecuación de conservación de carga (2-9). Por lo tanto, la ecuación de continuidad se vuelve

$$\nabla \cdot \mathbf{J} = 0, \quad (2-17)$$

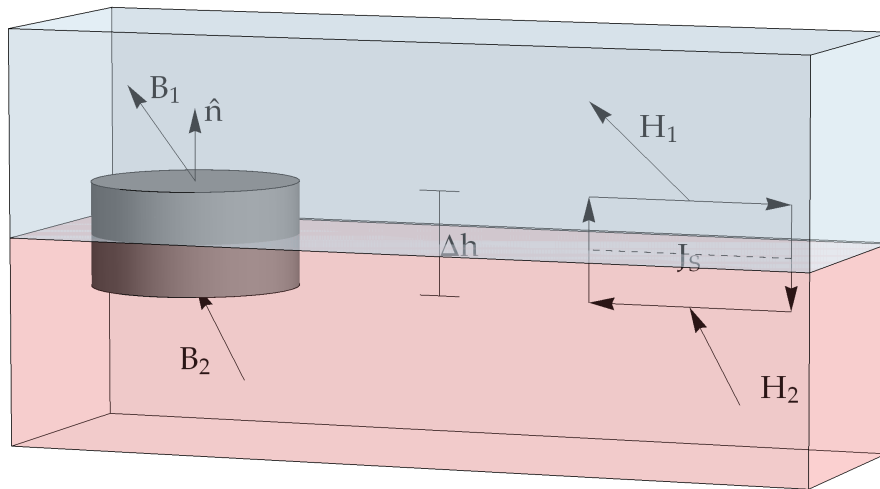


Figura 2-1.: Las condiciones de frontera para el campo magnético \mathbf{B} muestran que la componente normal es igual para campos medios. Para el campo \mathbf{H} es posible dibujar una trayectoria stokesiana con un elemento de grosor lo suficientemente pequeño.

Por último, tomando la divergencia a ecuación (2-4) se tiene que

$$\nabla \cdot \mathbf{J} = -\epsilon_0 \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \cdot \mathbf{E}) = -\frac{\partial \rho_e}{\partial t},$$

pero se acaba de ver que la cantidad $\frac{\partial \rho_e}{\partial t}$ es despreciable, entonces en el caso MHD, las corrientes de desplazamiento son prácticamente nulas, teniendo:

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J}. \quad (2-18)$$

Las ecuaciones electromagnéticas para el caso MHD se pueden resumir en la Tabla 2-1.

$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J}$	Ley de Ampère
$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$	No hay monopolos magnéticos
$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$	Ley de inducción Faraday
$\nabla \cdot \mathbf{J} = 0$	Ecuación de continuidad
$\mathbf{J} = \sigma(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$	Ley de Ohm
$\mathbf{F} = \mathbf{J} \times \mathbf{B}$	Fuerza de Lorentz

Tabla 2-1.: Ecuaciones electromagnéticas en MHD.

2.1.5. Condiciones de frontera

Las condiciones de frontera para las variables electromagnéticas pueden calcularse mediante la ley de conservación de carga y las ecuaciones de Maxwell.

Comenzando con la ecuación (2-2) en su forma integral se puede expresar mediante de un vector normal a la superficie que envuelve al campo magnético, ver Figura 2-1:

$$\oint_S \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{n}} dS = 0. \quad (2-19)$$

Considerando lo anterior sobre la interfaz de dos medios, las componentes normales del campo magnético \mathbf{B} en la interfaz están dadas como

$$(\mathbf{B}_1 - \mathbf{B}_2) \cdot \hat{\mathbf{n}} = 0. \quad (2-20)$$

Ahora para el vector desplazamiento, a partir de la ecuación (2-1) en su forma integral, se puede tratar de manera similar a la ecuación (2-20) para concluir que las componentes normales del vector desplazamiento \mathbf{D} , en la interfaz están dadas como

$$(\mathbf{D}_1 - \mathbf{D}_2) \cdot \hat{\mathbf{n}} = \rho_s, \quad (2-21)$$

dónde ρ_s es densidad de carga interfacial, la cual puede despreciarse en buenos conductores por lo cual se tiene que

$$(\mathbf{D}_1 - \mathbf{D}_2) \cdot \hat{\mathbf{n}} = 0. \quad (2-22)$$

Las condiciones de frontera para el campo magnético \mathbf{H} se deducen usando la ecuación (2-4), considerando una trayectoria alrededor de la interfaz con largo Δl y un espesor Δh , ver Figura 2-1, y aplicando la ley de Ampère es posible obtener que las componentes tangenciales del campo magnético \mathbf{H} en la interface de dos medios, son proporcionales a una densidad de corriente superficial \mathbf{J}_s

$$\mathbf{H}_{1t} - \mathbf{H}_{2t} = \mathbf{J}_s, \quad (2-23)$$

cuando la conductividad es finita y no existen corrientes superficiales es posible obtener la condición interfacial para \mathbf{H} como

$$\mathbf{H}_{1t} - \mathbf{H}_{2t} = 0. \quad (2-24)$$

Con un análisis similar es posible encontrar la condición para el campo eléctrico como

$$\mathbf{E}_{1t} = \mathbf{E}_{2t}. \quad (2-25)$$

2.1.6. Potenciales electromagnéticos

Asumiendo que la densidad del campo magnético \mathbf{B} es un campo solenoidal, es decir, la ecuación (2-2) se cumple, es posible expresar \mathbf{B} en términos de un potencial vectorial magnético definido como

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}, \quad (2-26)$$

ahora bien, sustituyendo lo anterior en la ecuación (2-3) se tiene que

$$\nabla \times \left(\mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right) = 0, \quad (2-27)$$

De lo cual se sigue que el campo eléctrico \mathbf{E} debe expresarse como el gradiente de un potencial escalar eléctrico ϕ , es decir:

$$\mathbf{E} = -\nabla \phi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}. \quad (2-28)$$

Los potenciales electromagnéticos dan la posibilidad de resolver la ecuaciones electromagnéticas.

2.2. Ecuaciones hidrodinámicas

El movimiento de cualquier fluido se ve regido por dos leyes generales que deben cumplirse siempre, la conservación de masa y de momento lineal. Recordando que de forma general estas ecuaciones son

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (2-29)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \overset{\leftrightarrow}{\sigma} + \mathbf{F}. \quad (2-30)$$

Dónde \mathbf{u} es la velocidad del fluido, ρ es la densidad, p la presión, $\overset{\leftrightarrow}{\sigma}$ es el tensor de esfuerzos viscosos y \mathbf{F} es una fuerza de cuerpo externa.

El tensor de esfuerzos $\overset{\leftrightarrow}{\sigma}$, definido para fluidos newtonianos, representa la fricción interna del fluido, es decir, describe la oposición del fluido a deformaciones, depende linealmente del gradiente de la velocidad y satisface que es invariante ante rotaciones de cuerpo rígido y es simétrico, tomando la forma:

$$\overset{\leftrightarrow}{\sigma} = \mu \left(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T - \frac{2}{3} \nabla \cdot \mathbf{u} \right) + \lambda \nabla \cdot \mathbf{u}, \quad (2-31)$$

donde μ y λ son los coeficientes de viscosidad.

Sustituyendo la ecuación (2-31) en la ecuación (2-30) se tiene

$$\begin{aligned} \rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) &= -\nabla p + \nabla \cdot \left(\mu \left((\nabla \mathbf{u}) + (\nabla \mathbf{u})^T - \frac{2}{3} \nabla \cdot \mathbf{u} \right) \right) \\ &\quad + \nabla \cdot (\lambda \nabla \cdot \mathbf{u}) + \mathbf{F}, \end{aligned} \quad (2-32)$$

suponiendo que μ y λ son constantes en el espacio, la divergencia del tensor de esfuerzos puede escribirse como

$$\nabla \cdot \overset{\leftrightarrow}{\sigma} = \mu \left(\nabla^2 \mathbf{u} + \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}) - \frac{2}{3} \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}) \right) + \lambda \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}), \quad (2-33)$$

$$= \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \left(\lambda + \frac{1}{3} \mu \right) \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}). \quad (2-34)$$

Entonces la ecuación de balance de momento (2-30) se puede escribir como

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \left(\lambda + \frac{1}{3} \mu \right) \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}) + \mathbf{F}. \quad (2-35)$$

Ahora bien, en este trabajo solo se estudian fluidos incompresibles, lo que quiere decir que la densidad del fluido no varía temporal ni espacialmente, $\rho = \rho_0$, tal suposición implica que la ecuación (2-29) y la ecuación (2-35) se simplifiquen como

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (2-36)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{F}. \quad (2-37)$$

La ecuación (2-36) es la ecuación de continuidad para el caso incompresible y en conjunto con la ecuación (2-37) o ecuación de conservación de momento lineal, se conocen comúnmente como ecuaciones de Navier-Stokes, teniendo como incógnitas la componentes de la velocidad y la presión.

2.2.1. Condiciones de frontera

Las ecuaciones (2-36) y (2-37) requieren condiciones de frontera para la velocidad, en este trabajo se utilizarán condiciones tipo Dirichlet las cuales fijan un valor constante e igual a cero de la velocidad en la pared con lo cual se tiene un no deslizamiento del fluido en la paredes. Cabe mencionar que existen distintas condiciones de frontera para las variables hidrodinámicas dependiendo del problema que se quiera resolver.

2.3. Formulaciones MHD

Para llegar a las ecuaciones MHD es necesario acoplar las ecuaciones de fluidos con las ecuaciones electromagnéticas, esto se hace a través de la fuerza de Lorentz, la ley de Ohm y la ley de Ampère dependiendo del problema, así en la ecuación (2-37) la fuerza de cuerpo aplicada sera la ecuación (2-16) deducida en la sección 2.1.2 obteniendo entonces

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{F}_L. \quad (2-38)$$

La manera en que se resuelve la densidad de corriente puede ser a través de la ley de Ohm (2-10) o de la ley de Ampère (2-4) todo depende de las condiciones del problema y de la capacidad que se tenga para resolver los casos.

Si el problema es tratado a través de la ley de Ohm, como es el caso de la formulación de potencial eléctrico que se verá en el Capítulo 3, se supone es que el campo magnético aplicado \mathbf{B}_0 domina, y el campo magnético inducido es tan pequeño que no afecta el problema. Lo anterior permite considerar al potencial eléctrico ϕ como una variable electromagnética y calcularlo a partir de la solución para la ecuación de Poisson resultante de considerar la ley de Ohm (2-10) y la conservación de carga eléctrica (2-9):

$$\nabla^2 \phi = \nabla \cdot (\mathbf{u} \times \mathbf{B}), \quad (2-39)$$

una vez que se conoce el potencial eléctrico, es posible calcular la densidad de corriente eléctrica y la fuerza de Lorentz como se describe a continuación

$$\mathbf{J} = \sigma(-\nabla \phi + \mathbf{u} \times \mathbf{B}), \quad (2-40)$$

$$\mathbf{F}_L = \mathbf{J} \times \mathbf{B}, \quad (2-41)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{F}_L. \quad (2-42)$$

Si el problema se trata mediante la ley de Ampère el algoritmo de solución se complica pero es posible calcular campos magnéticos inducidos; existen distintas maneras de hacerlo, como se hará en este trabajo es a través de una solución estacionaria para el potencial vectorial magnético calculado mediante la

combinación de la ley de Ampère, la ley de Ohm y la ecuación (2-26) como se sigue a continuación:

$$\nabla \cdot \mathbf{J} = 0, \quad (2-43)$$

$$\nabla \times \nabla \mathbf{A} = \mu_0 \mathbf{J}, \quad (2-44)$$

$$\mathbf{J} = \sigma \left(-\nabla \phi + \mathbf{u} \times \nabla \times \mathbf{A} \right), \quad (2-45)$$

$$\frac{1}{\mu_0 \sigma} \left(\nabla (\nabla \cdot \mathbf{A}) - \nabla^2 \mathbf{A} \right) = -\nabla \phi + \mathbf{u} \times \nabla \times \mathbf{A}, \quad (2-46)$$

con lo cual es posible calcular la fuerza de Lorentz a través de la solución de la ecuación (2-46) y de la ecuación (2-45) asegurando además que la ecuación (2-2) se cumple. Cabe mencionar que existen distintas formulaciones MHD (Beltrán 2010) que no se tratarán en esta tesis.

En el siguiente capítulo se mostrarán los algoritmos de solución para los casos de estudio donde se aplican las ecuaciones presentadas en esta sección.

CAPÍTULO 3

MODELADO DEL FLUJO EN UN ELECTRODO DE METAL LÍQUIDO (EML)

En este capítulo se presentará la metodología de trabajo; primeramente se describirán todos los parámetros físicos importantes dentro de este estudio, posteriormente las dos aproximaciones físicas usadas en este trabajo: el caso en el que el campo magnético inducido es despreciado mediante formulación de potencial eléctrico o formulación ϕ y el caso en que la velocidad del fluido debería de afectar al campo magnético, dónde se usará una formulación de potencial vectorial magnético o formulación **A**.

3.1. Modelo físico

El modelo de estudio consiste en una cavidad cilíndrica llena de un electrolito representando un EML, este es sometido a una corriente eléctrica directa aplicada en dirección axial y a un campo magnético generado por un imán permanente como se muestra en la Figura 3-1.

En este trabajo, los fluidos estudiados consisten en dos sales, cloruro de potasio (KCl) y bicarbonato de sodio (NaHCO_3), ambas en solución acuosa.

Se considera también corrientes de 3, 4, y 5 mA para reproducir numéricamente el experimento descrito en el Apéndice B, además el sistema es sometido al campo magnético producido por dos imanes de distintas medidas y formas.

La configuración hace que la interacción entre el campo magnético y la corriente aplicada al electrolito genere un flujo dentro de él, el cual se estudiará mediante el software COMSOL Multiphysics® (COMSOL 2017) usando los módulos de dinámica de fluidos computacional *Fluid Dynamics* y electromagnetismo *AC/DC*.

Para realizar el estudio es necesario tener las propiedades físicas de los materiales que se simularán ya que con ellos es posible resolver las ecuaciones discutidas anteriormente. A continuación se describen las características de los fluidos, los imanes y la configuración del modelo general en el software.

3.1.1. Propiedades de los electrolitos

Las propiedades físicas de los electrolitos importantes en este estudio son tres: la densidad, la viscosidad dinámica y la conductividad eléctrica, ellas se encuentran directamente en las ecuaciones usadas para resolver el problema.

Como se mencionó anteriormente, los electrolitos consisten en una solución acuosa de la sal (KCl o NaHCO_3) a una concentración de 8.6% en relación masa/masa a temperatura ambiente, para lo cual se determinaron las propiedades en función de la concentración mediante datos experimentales registrados por Lide (2009) y posteriormente haciendo ajustes lineales óptimos para la concentración deseada, obteniendo los datos mostrados en la Tabla 3-1.

La conductividad se determinó de manera experimental en trabajos previos (Herrera-Ortega 2018)

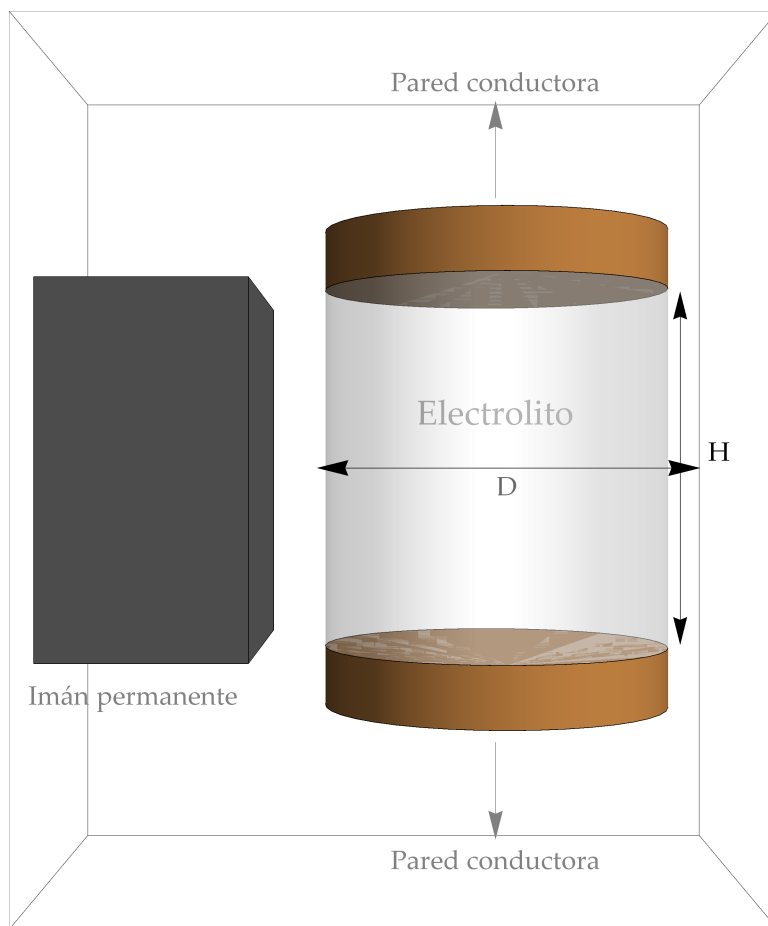


Figura 3-1.: Cavity cilíndrica llena de un electrolito y electrodos de cobre por los cuales se inyecta una corriente e imán permanente.

obteniendo datos de 12.193 S/m para el cloruro de potasio y 5.245 S/m para el bicarbonato de sodio para la concentración mencionada anteriormente.

Propiedad	KCl	$NaHCO_3$
Viscosidad [Pa s]	0.991×10^{-3}	1.262×10^{-3}
Densidad [kg/m^3]	1.055×10^3	1.059×10^3
Conductividad [S/m]	12.193	5.245

Tabla 3-1.: Densidad, viscosidad dinámica y conductividad de los fluidos estudiados a una concentración de 8.6 % relación masa/masa.

3.1.2. Imanes permanentes

Los imanes permanentes utilizados son bloques de dos diferentes tamaños como se muestra en la Figura 3-2 magnetizados en la dirección de menor grosor de manera uniforme, están fabricados de la aleación NdFeB con una magnetización de saturación aproximada de $10^5 A/m - 10^6 A/m$, (Furlani 2001). Los

imanes presentan las medidas registradas en la en la Tabla 3-2 y siguen la geometría descrita por la Figura 3-2.

Imán	$X_L \times 10^{-3} m$	$Y_L \times 10^{-3} m$	$Z_L \times 10^{-3} m$
Cuadrado	12.5	24	24
Rectangular	6	13	19

Tabla 3-2.: Medidas de imanes simulados.

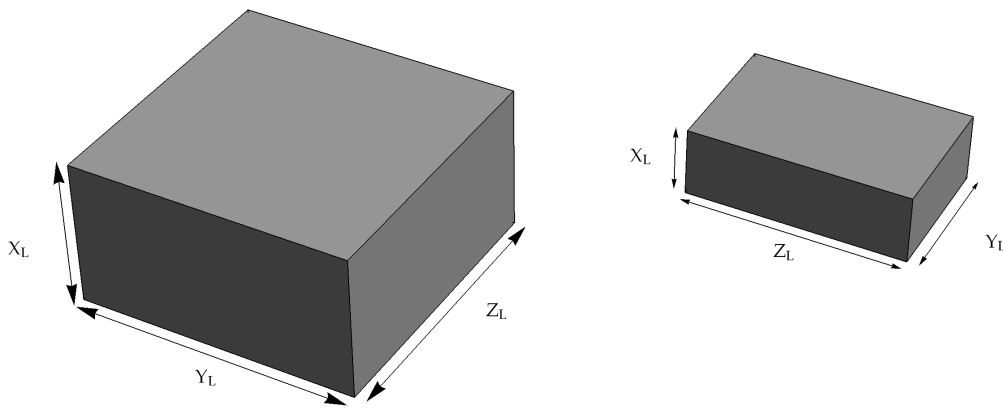


Figura 3-2.: Imanes de la aleación NdFeB usados en el modelo.

3.2. Mallado de geometría

La geometría es generada dentro del software COMSOL Multiphysics[®] (COMSOL 2017), utilizando diferentes dominios. La cavidad cilíndrica donde se encuentra el fluido se genera mediante un cilindro centrado en el origen usando, de acuerdo con la Figura 3-1, una altura $H = 19 \times 10^{-3} m$ y un diámetro $D = 17.5 \times 10^{-3} m$; dicho cilindro se divide en 5 secciones para modelar una malla hexaédrica tipo *o-grid* como se muestra en la Figura 3.3(a).

Se adicionan las secciones de los electrodos de cobre sobre y debajo de la cavidad de manera que tengan el mismo diámetro D y un espesor $H_{Cu} = 18 \times 10^{-3} m$ de acuerdo con el dispositivo experimental (ver Apéndice B), la conductividad de este material se encuentra en la librería de materiales de COMSOL Multiphysics[®], por lo que no es necesario determinarla.

El dominio del imán es generado por un bloque colocado a una distancia de $25 \times 10^{-3} m$ del origen siguiendo el prototipo mostrado en la Figura B.2.

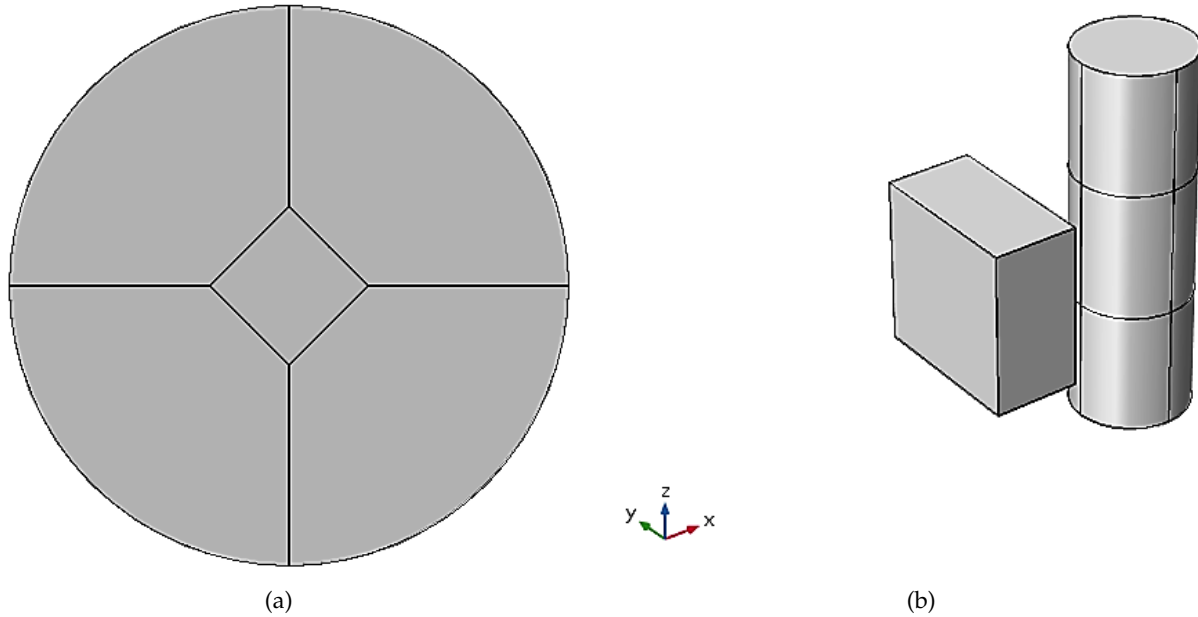


Figura 3-3.: Plano para generar una geometría *o-grid* para el dominio del fluido a la izquierda. Geometría de la cavidad cilíndrica, electrodos de cobre e imán a la derecha.

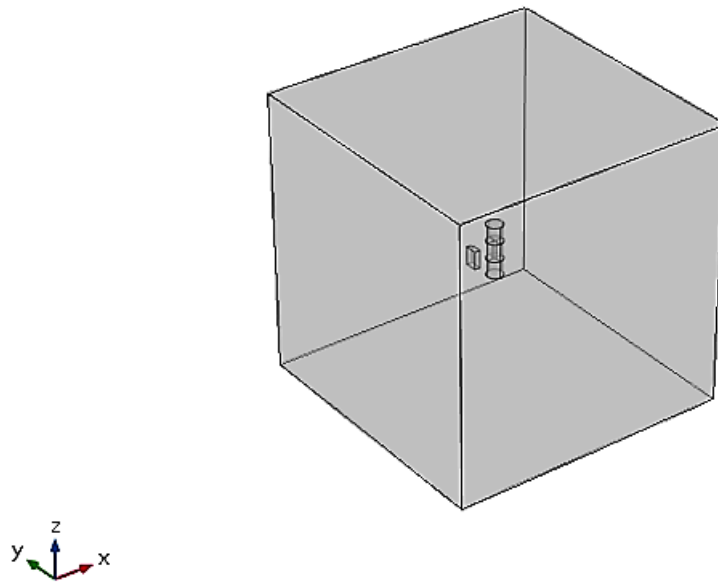


Figura 3-4.: Geometría generada en COMSOL Multiphysics®.

Finalmente se genera bloque cuadrado con 0.5 m de lado, este contiene solamente aire con lo cual es posible simular el dominio donde se encuentra definido el campo magnético, considerando que el campo magnético tiende a cero en el infinito, se escoge este dominio (lo suficientemente grande) para que el campo esté bien definido en el sistema de interés.

La geometría final del EML en conjunto con el imán se muestra en la Figura 3.3(b) y junto con el dominio de aire en la Figura 3-4.



Figura 3-5.: Mallado del dominio del fluido en forma *o-grid* (a la izquierda) y mallado del cilindro en conjunto con electrodos e imán, ambas mallas son hexaédricas.

Para el mallado se utilizan también las herramientas de COMSOL Multiphysics[®] (COMSOL 2017). Se eligió construir una malla hexaédrica en el dominio donde se encuentra el fluido debido a la simetría del problema.

El mallado del dominio de los electrodos de cobre y del imán continúan teniendo elementos hexaédricos de tal forma que pueden coincidir con elementos adyacentes del dominio del fluido en el caso de los electrodos. Los dominios mallados con hexaedros se encuentran en la Figura 3-5.

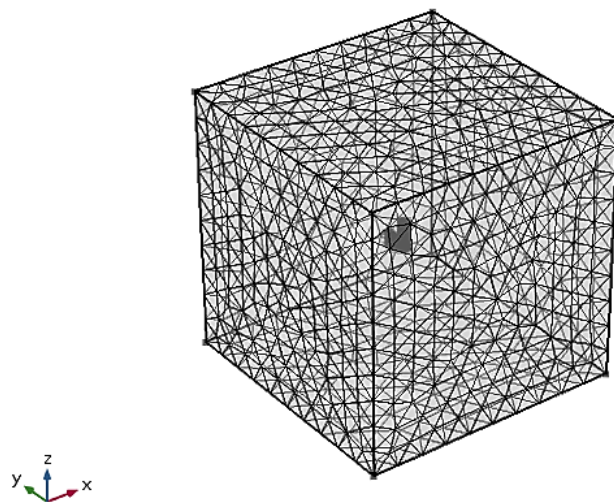


Figura 3-6.: Mallado de todo el dominio; dentro de él la geometría cilíndrica y el bloque que representa al imán con elementos hexaédricos, el bloque grande representa un dominio de aire con elementos tetraédricos.

Finalmente el dominio de aire se dividió en secciones tetraédricas con un tamaño mayor a los elementos de los otros dominios; esto con el fin de ahorrar tiempo de cómputo.

La Figura 3-6 muestra el dominio completo mallado con elementos tetraédricos en el bloque de aire y elementos hexaédricos en la geometrías interiores.

Para el caso del imán rectangular se tienen 167 100 elementos para el dominio de aire y 250 elementos para el imán mientras que para el imán cuadrado, 232 290 corresponden al dominio de aire y 1 008 al imán; en ambos casos se tienen 109 140 elementos correspondientes al dominio del fluido y 37 674 elementos para los electrodos, lo anterior suma un total de 309 680 cuando se utiliza el imán rectangular y 375 631 cuando se tiene el imán cuadrado. Además, en el estudio paramétrico se estudió una corriente de 500 mA donde se tuvo que doblar la cantidad de elementos para ambos casos obteniendo un total de 605 207 elementos para el caso del imán rectangular y 712 677 elementos para el caso imán cuadrado, donde 68 634 elementos corresponden a los electrodos, 259 284 elementos corresponden al dominio del fluido, la cantidad de elementos en los imanes se mantiene igual y el resto de secciones corresponde al dominio de aire.

3.3. Algoritmos de solución

Como se mencionó anteriormente, Comsol Multiphysics® es una herramienta computacional dedicada a la solución numérica de ecuaciones diferenciales; utiliza el método de elementos finitos para discretizar el dominio en el cual es posible utilizar elementos tanto triangulares como cuadrados. Los esquemas de aproximación utilizados dependen del tipo de problema que se resuelva y, automáticamente, si se trata de una ecuación tipo Poisson se eligen elementos de segundo orden, mientras que si se trata de una ecuación de transporte los elementos del dominio son lineales. Para el esquema temporal el programa consta de un método adaptivo el cual puede pasar de ser Euler-implícito a Euler-explícito dependiendo de las condiciones que se den al problema a resolver y la estabilidad de la solución. Los métodos de desacople son variantes del método de Newton-Raphson, los cuales son análogos a los métodos iterativos que usa COMSOL Multiphysics® para aproximar problemas no lineales, donde se le puede dar un enfoque aislado o un enfoque acoplado cuyas adecuaciones, al agregar una multifísica ¹, el programa es capaz de hacer automáticamente. Finalmente para resolver el sistema de ecuaciones lineales es posible elegir entre métodos directos o iterativos; para el caso de métodos directos se utiliza el método MUMPS (por sus siglas en inglés, MULTifrontal Massively Parallel Sparse direct Solver), finalmente para métodos iterativos, el software usa variantes del método de gradientes conjugados.

En esta sección se explican los sistemas de ecuaciones usados para resolver las ecuaciones mostradas en el Capítulo 2, en este trabajo se analizan dos formulaciones MHD las cuales se espera que tengan resultados similares ya que la conductividad de los electrolitos es relativamente pequeña para generar campos magnéticos inducidos.

3.3.1. Formulación de potencial eléctrico (ϕ)

En esta formulación se supone que el campo magnético es únicamente el campo aplicado y la corriente inducida se calcula utilizando la ley de Ohm. El sistema está semi-desacoplado ya que se resuelve de manera independiente el campo magnético del imán y la corriente eléctrica en el dominio cilíndrico. Lo anterior se realiza usando el módulo de AC/DC de COMSOL para resolver una ecuación de Poisson usada

¹Término que utiliza Multiphysics® para referirse a modelos de sistemas de ecuaciones con distintos fenómenos físicos acoplados.

para obtener el campo magnético del imán y otra para obtener el potencial eléctrico, esto da la capacidad de calcular el campo magnético y la densidad de corriente eléctrica; tales resultados se usan para definir la fuerza de Lorentz en las ecuaciones de dinámica de fluidos. La metodología empleada se sigue en la Figura 3-7.

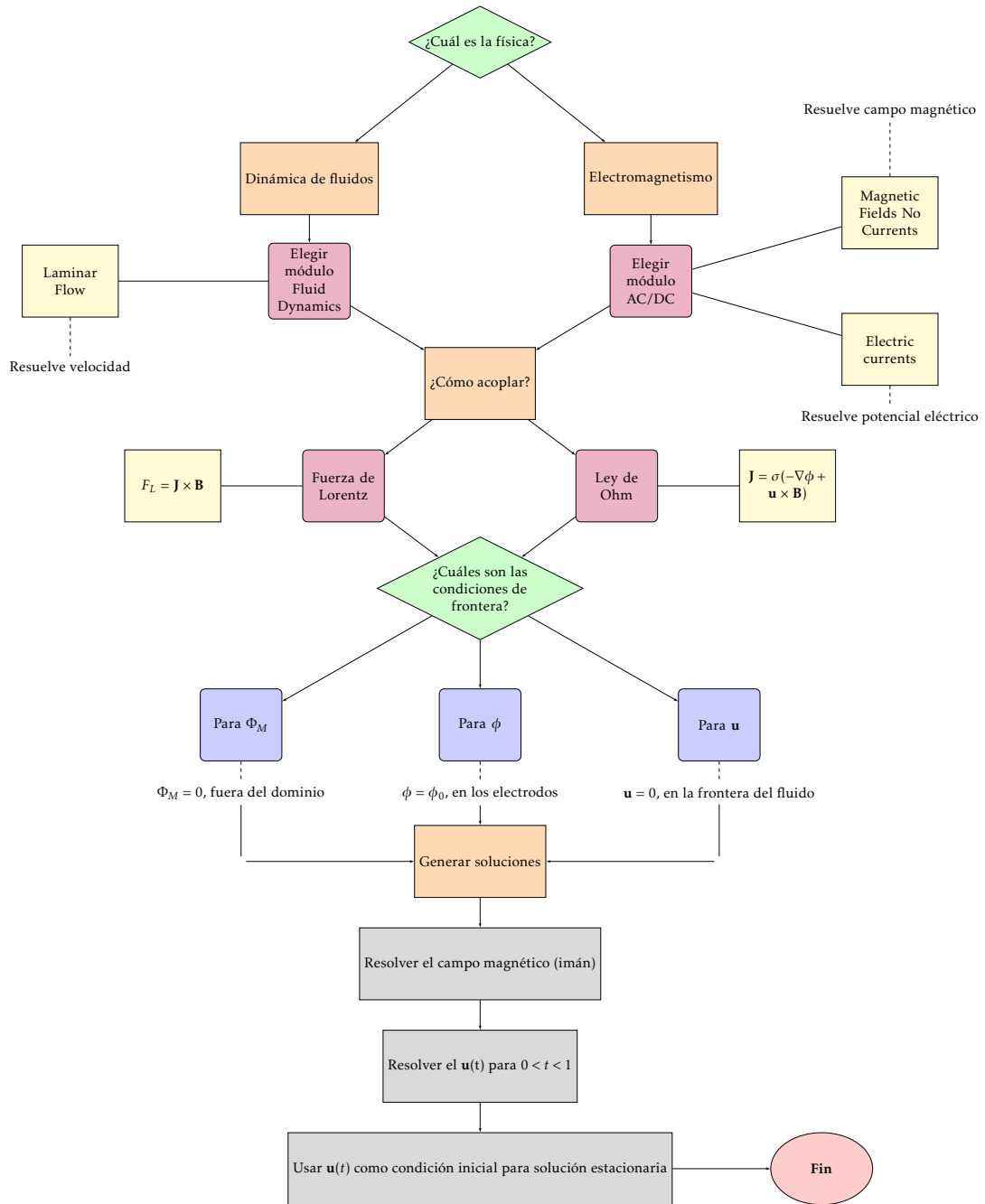


Figura 3-7.: Metodología empleada para resolver el flujo en la formulación de potencial eléctrico, ϕ .

Seguendo lo anterior se pueden enlistar las ecuaciones que se resolverán de la siguiente manera:

$$\nabla \cdot \mathbf{H} = 0 \implies \text{Caso magnetostático,} \quad (3-1)$$

$$\implies \mathbf{H} = -\nabla \Phi_M; \quad \mathbf{H} \text{ se expresa como el gradiente de un potencial,} \quad (3-2)$$

$$\mathbf{B} = \mu_0(-\nabla \Phi_M + \mathbf{M}_s); \quad \mathbf{M}_s \text{ es la magnetización de saturación,} \quad (3-3)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (3-4)$$

$$\implies \nabla^2 \Phi_M = \nabla \cdot \mathbf{M}_s, \quad (3-5)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{J} = 0, \quad (3-6)$$

$$\mathbf{J} = \sigma(-\nabla \phi + \mathbf{u} \times \mathbf{B}), \quad (3-7)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (3-8)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{J} \times \mathbf{B}. \quad (3-9)$$

Las condiciones de frontera del problema están dadas como,

$$\mathbf{u} = 0 \text{ en } \partial\Omega_F; \quad (3-10)$$

$$\Phi_M = 0 \text{ en } \partial\Omega_A; \quad (3-11)$$

$$\phi = \begin{cases} 0 \text{ en el electrodo superior,} \\ \phi_0 \text{ en el electrodo inferior,} \end{cases} \quad (3-12)$$

donde Ω_F se refiere al dominio del fluido y Ω_A es el dominio de aire; ϕ_0 se calculó a través de la relación $V = IR$ donde V es el voltaje aplicado, I es intensidad de corriente eléctrica fijada a 3,4 y 5 mA para simular el experimento y 1,10,100 y 500 mA para realizar un estudio paramétrico y R es la resistencia en la celda del fluido calculada como $R = H/(\sigma A)$ con $A = \pi (D/2)^2$; los valores para ϕ_0 se muestran en la Tabla 3-3. Lo anterior se utiliza para simular a aplicación de de una densidad de corriente eléctrica en dirección axial. Este algoritmo además es validado a través de la solución analítica (Müller y Bühler 2001)

$I [A] \times 10^{-3}$	$\phi_0 [V] (KCl)$	$\phi_0 [V] (NaHCO_3)$
1	0.647×10^{-2}	1.546×10^{-2}
3	1.943×10^{-2}	4.638×10^{-2}
4	2.591×10^{-2}	6.184×10^{-2}
5	3.239×10^{-2}	7.730×10^{-2}
10	6.478×10^{-2}	15.460×10^{-2}
100	64.785×10^{-2}	154.606×10^{-2}
500	323.926×10^{-2}	773.029×10^{-2}

Tabla 3-3.: Valores calculados para la condición de frontera para el potencial eléctrico.

del problema de Hartmann siguiendo una metodología similar a la reportada por Sahu y Bhattacharyay (2018), los resultados se pueden ver en el Apéndice C.

3.3.2. Formulación de potencial vectorial magnético (A)

En esta formulación se resuelve el problema mediante el módulo de COMSOL Multiphysics® AC/DC con la interfaz de *Magnetic Fields and Electric Currents* con esto es posible resolver a la par el potencial eléctrico

y el potencial vectorial magnético, suponiendo que las variables electromagnéticas son estacionarias, además se acopla al módulo de *Fluid Dynamics* para resolver el campo de velocidad agregando la fuerza de Lorentz.

En este método se resuelve primeramente el potencial vectorial magnético \mathbf{A} para obtener las variables electromagnéticas de tal modo que es posible encontrar variaciones espaciales en el campo magnético.

Las ecuaciones empleadas en esta metodología son las siguientes:

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J}, \quad (3-13)$$

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}, \quad (3-14)$$

$$\mathbf{B} = \mu_0(\mathbf{H} + \mathbf{M}_s); \quad (3-15)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (3-16)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{J} = 0, \quad (3-17)$$

$$\mathbf{J} = \sigma(\mathbf{E} + \mathbf{u} \times \mathbf{B}), \quad (3-18)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (3-19)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{J} \times \mathbf{B}. \quad (3-20)$$

Las condiciones de frontera e iniciales de están dadas como

$$\mathbf{H} = 0 \text{ en } \partial\Omega_A; \quad (3-21)$$

$$\phi(0) = \begin{cases} 0 \text{ en el electrodo superior,} \\ \phi_0 \text{ en el electrodo inferior,} \end{cases} \quad (3-22)$$

$$\mathbf{u}(x, y, z, t = 0) = 0, \quad (3-23)$$

$$\mathbf{u} = 0 \text{ en } \partial\Omega_F. \quad (3-24)$$

Siguiendo que ϕ_0 está dado con los valores dados en la Tabla 3-3.

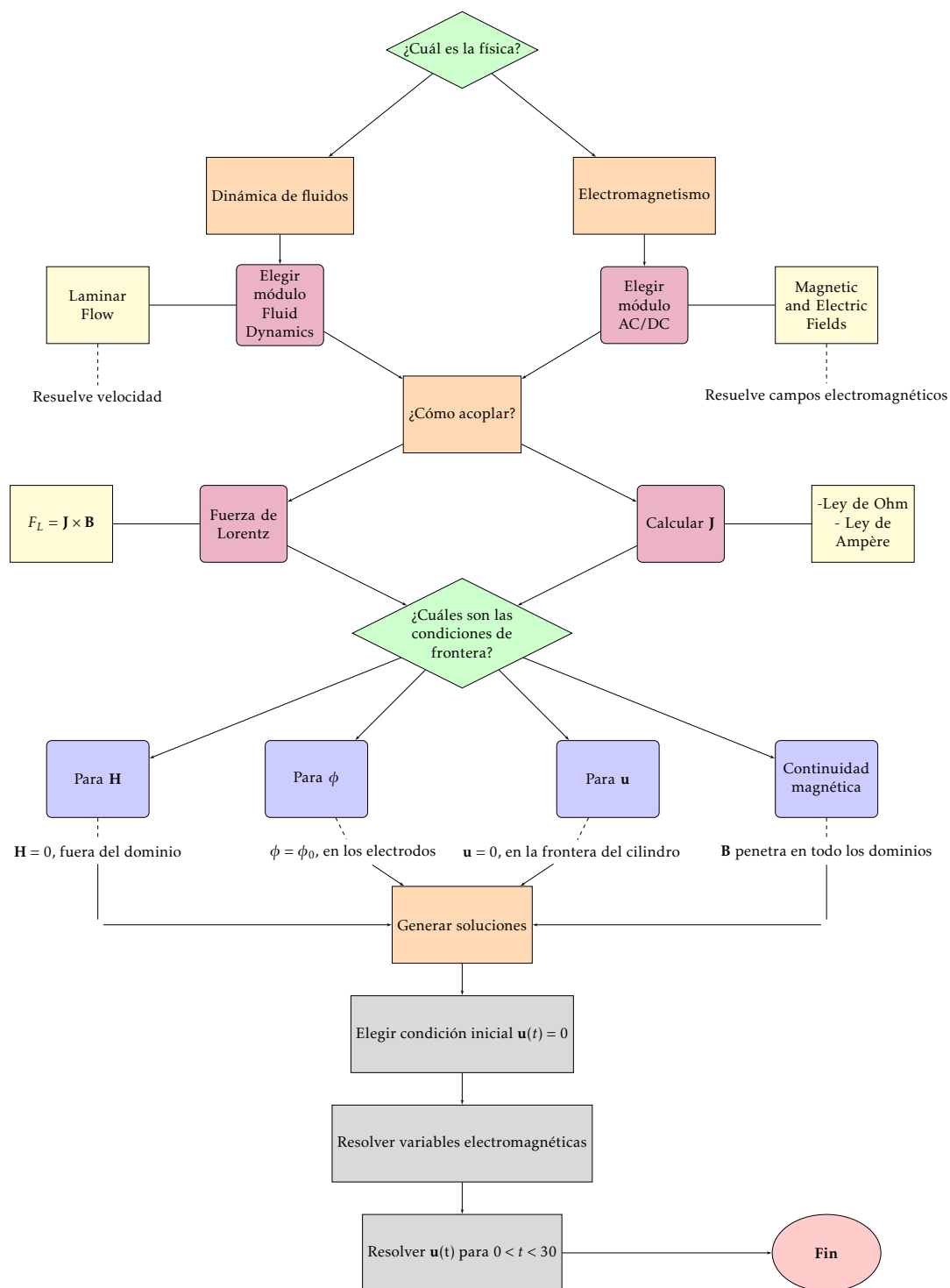


Figura 3-8.: Metodología empleada para resolver el flujo en la formulación de potencial magnético.

CAPÍTULO 4

RESULTADOS

4.1. Discusión

Los resultados de este estudio se centran en analizar el campo magnético y la velocidad obtenida debido a que son las variables físicas reportadas en trabajos experimentales del grupo de trabajo (ver Apéndices A y B).

4.1.1. Campo magnético

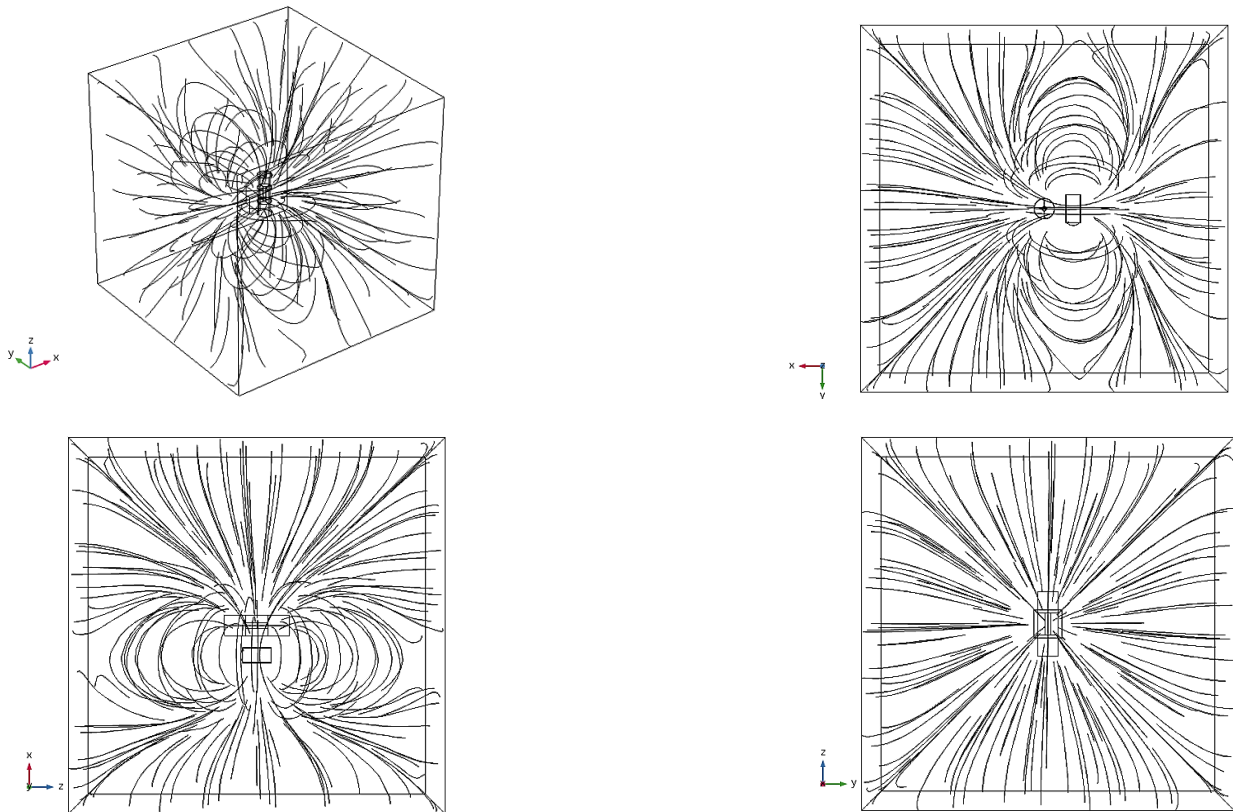


Figura 4-1.: Líneas de corriente del campo magnético del imán vistos en distintos planos.

El campo magnético, impuesto externamente mediante el uso de imanes permanentes, es calculado mediante dos algoritmos distintos, en ambos casos es posible visualizar las soluciones esperadas representadas en las líneas de campo que salen del polo positivo del imán y entran del polo negativo con la estructura de un dipolo en tres dimensiones como se muestra en la Figura 4-1, además es posible apreciar que las condiciones de frontera para el dominio del campo magnético son de tipo Dirchlet lo que dice que fuera

del dominio de solución, el campo magnético es nulo.

4.1.2. Velocidad

En cuanto a la velocidad, el movimiento del fluido se ve producido por la acción de la fuerza de Lorentz, tal fuerza depende de la intensidad de corriente eléctrica, definida por una diferencia de potencial en la dirección axial y el campo magnético del imán que contiene una componente preferencial en la dirección X debido a cómo se magnetiza el material; entonces, la fuerza de Lorentz se encuentra en la dirección azimutal de la cavidad cilíndrica; esquemáticamente esto se puede ver la Figura 4-2. Ahora bien, partiendo

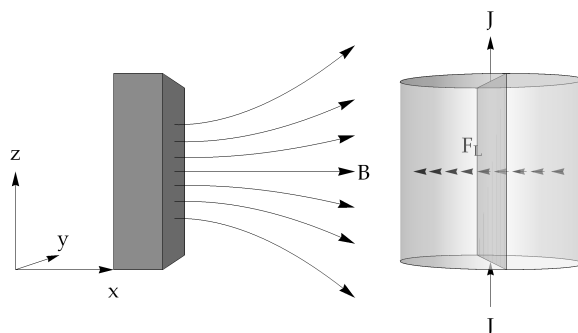


Figura 4-2.: Esquema de la fuerza de Lorentz en la cavidad cilíndrica.

de un estado estacionario, el fluido se mueve en dirección de la fuerza de Lorentz aplicada ocasionando un flujo de agitación como lo muestra la Figura 4-3; la intensidad de agitación depende de la corriente cantidad de corriente inyectada.



Figura 4-3.: Isocontornos, líneas de corriente y campo de velocidad (a) 5 mA y (b) 500 mA.

La fuerza de Lorentz se encuentra localizada, debido a que la intensidad del campo magnético aumenta con la cercanía al imán se puede ver en la Figura 4.4(e) que se genera una especie de lóbulo en la región más cercana este y con una magnitud de la velocidad mayor.

La Figura 4-4 muestra que al aumentar la corriente aplicada, se alcanzan velocidades mayores muy cerca de la pared y el flujo tiende a ser más homogéneo azimutalmente formándose una región de baja velocidad

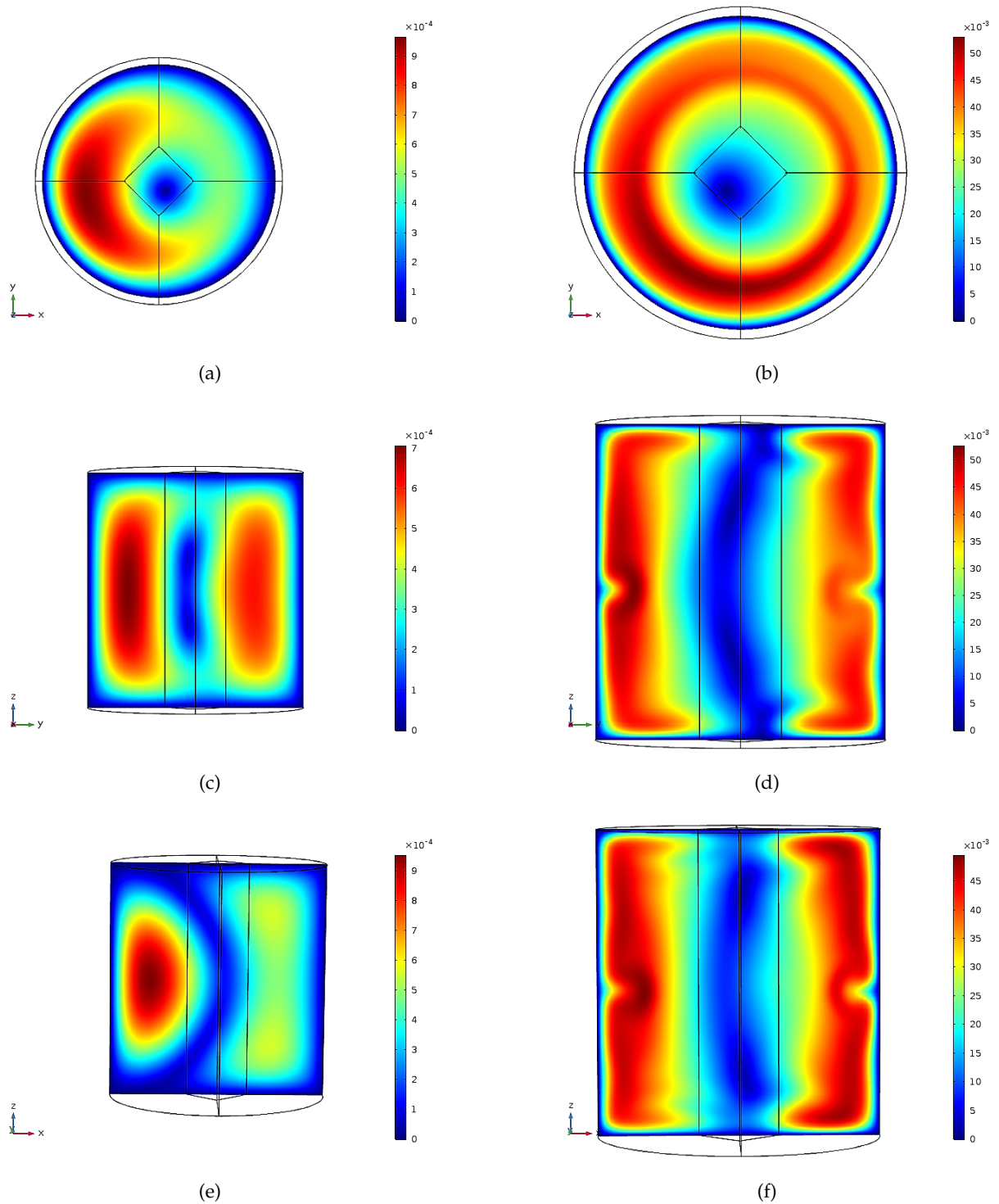


Figura 4-4.: Isocontornos para la magnitud de la velocidad para los casos de 5 mA a la izquierda y 500 mA a la derecha para los 3 planos centrales de flujo.

al centro de la cavidad, situación similar a la reportada para el flujo de Hartmann (ver Apéndice C) cuando aumenta la corriente eléctrica y donde hay gradientes de velocidad cerca de las paredes que confinan al fluido.

4.2. Validación de resultados

Los soluciones numéricas tanto en la formulación ϕ como en la formulación **A** han sido validadas mediante la comparación con resultados experimentales obtenidos en trabajos previos (Herrera-Ortega 2018; Aguilasocho-Acosta 2018; Beltrán y Carrillo-Ricci 2018) a través de los cuales es posible comparar tanto el campo magnético como el campo de velocidad a nivel perfiles a lo largo de los ejes de simetría de la cavidad.

Posteriormente se calcula la energía cinética del sistema en el dominio del fluido como un parámetro global del sistema.

4.2.1. Perfiles de campo magnético

Los perfiles de campo magnético son extraídos de la solución numérica a lo largo de los ejes de simetría del cilindro y son comparados con mediciones experimentales reportadas por Herrera-Ortega (2018) y descritas en el Apéndice A.

Los perfiles se obtuvieron tomando como referencia el centro de la cavidad donde el campo magnético es, para imán cuadrado $B_{0C} = 42 \times 10^{-3} T$ y para el imán rectangular $B_{0R} = 14 \times 10^{-3} T$.

En general, la intensidad del campo magnético baja conforme uno se aleja de la dirección principal, X , de este. Se aprecia además, que la componente principal del campo magnético, B_x , tiene una forma tipo parabólica en las direcciones Y y Z , mientras que la componente B_y en la dirección Y así como la componente B_z en la dirección Z tienen una forma antisimétrica. Comparando con resultados experimentales, los perfiles de campo magnético se reproducen efectivamente tanto en forma como magnitud como se muestra de la Figura 4-5 a la Figura 4-8¹.

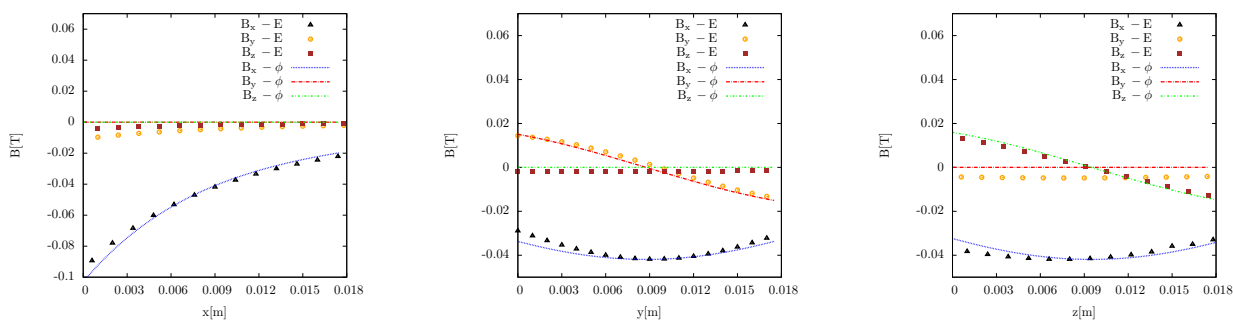


Figura 4-5.: Perfiles de campo magnético experimentales y formulación de potencial eléctrico para el imán cuadrado sobre el eje X , Y Z (de izquierda a derecha).

¹En todas las figuras se sigue la notación E para resultados experimentales, ϕ para resultados numéricos de la formulación de potencial eléctrico y **A** para resultados numéricos de la formulación de potencial vectorial magnético.

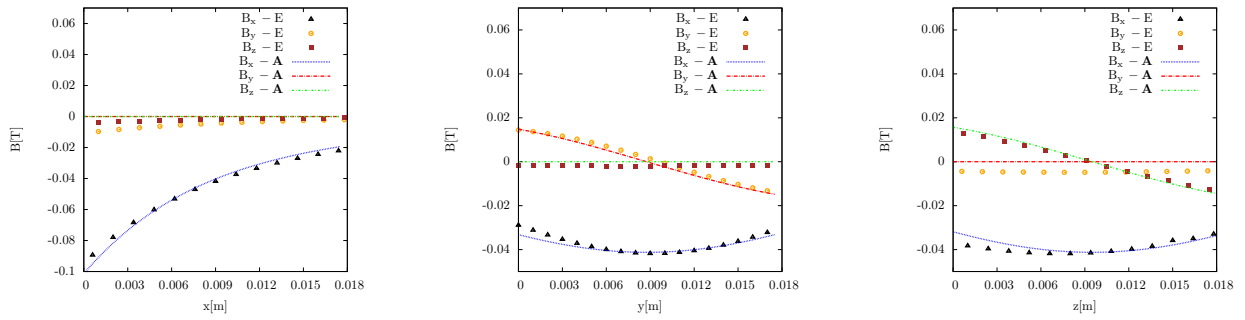


Figura 4-6.: Perfiles de campo magnético experimentales y formulación de potencial vectorial magnético para el imán cuadrado sobre el eje X, Y Z (de izquierda a derecha).

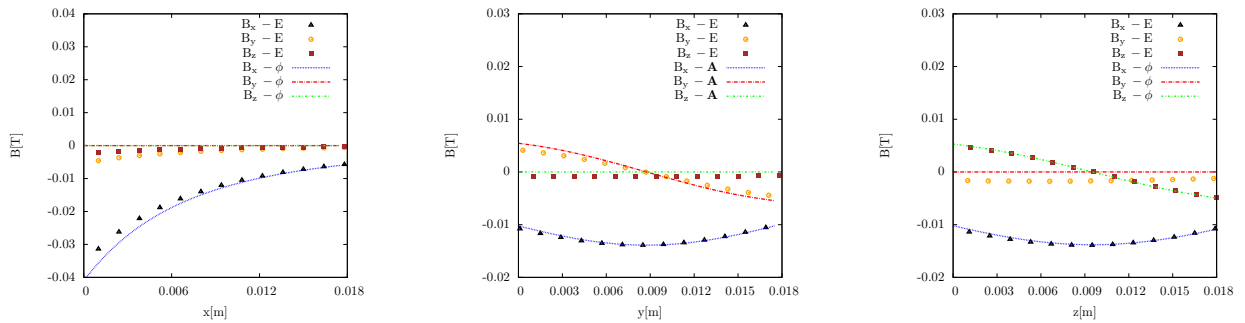


Figura 4-7.: Perfiles de campo magnético experimentales y formulación de potencial eléctrico para el imán rectangular sobre el eje X, Y Z (de izquierda a derecha).

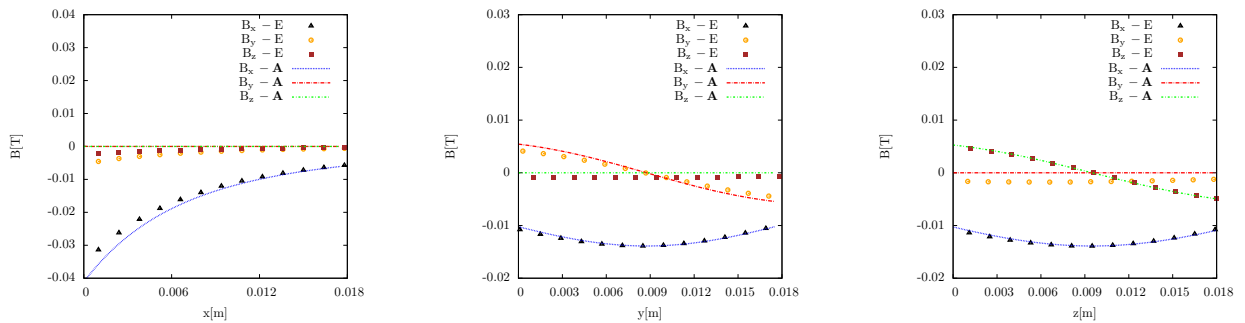


Figura 4-8.: Perfiles de campo magnético experimentales y formulación de potencial vectorial magnético para el imán cuadrado sobre el eje X, Y Z (de izquierda a derecha).

La magnitud del campo magnético del imán rectangular es menor ya que tiene un menor tamaño y por lo tanto menor resolución espacial en comparación con el imán cuadrado. Se nota además, que los imanes se encuentran orientados del lado negativo ya que el valor máximo de la intensidad del campo magnético es negativo.

4.2.2. Perfiles de velocidad

Para validar los resultados numéricos de la velocidad con trabajos experimentales previos se realizaron cortes de la velocidad a lo largo de los ejes Y y Z del sistema de referencia debido a que, como se menciona en el Apéndice B la configuración experimental solo permite realizar mediciones en el plano paralelo a la superficie principal del imán. Lo anterior conlleva a obtener los perfiles de las componentes v y w de la velocidad a lo largo de los ejes Y y Z para ambos fluidos.

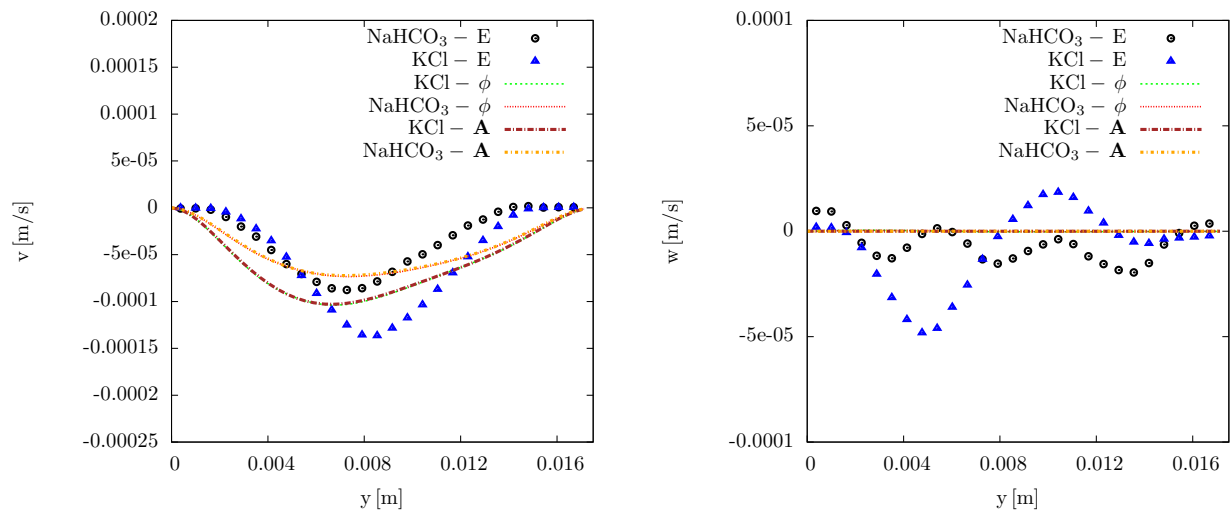


Figura 4-9.: Perfiles de velocidad a lo largo del eje Y con el campo magnético del imán cuadrado y una corriente aplicada de 5 mA.

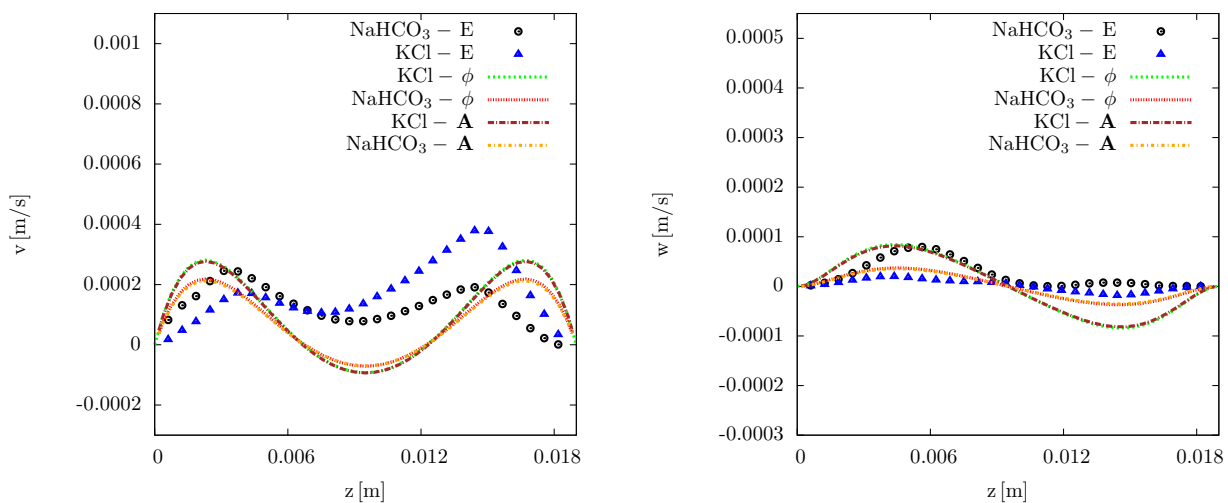


Figura 4-10.: Perfiles de velocidad a lo largo del eje Z con el campo magnético del imán cuadrado y una corriente aplicada de 5 mA.

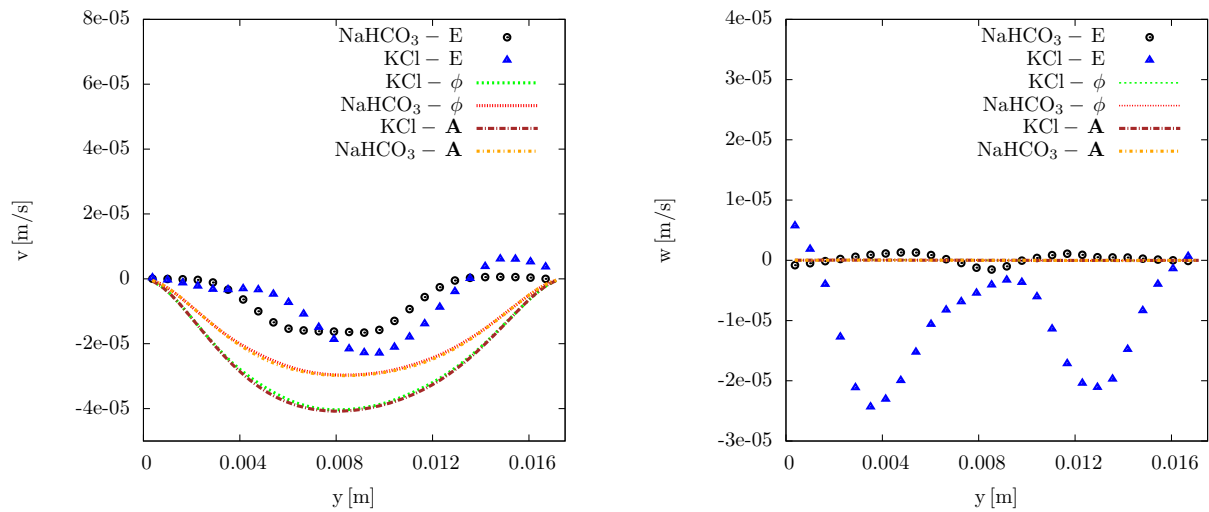


Figura 4-11.: Perfiles de velocidad a lo largo del eje Y con el campo magnético del imán rectangular y una corriente aplicada de 5mA.

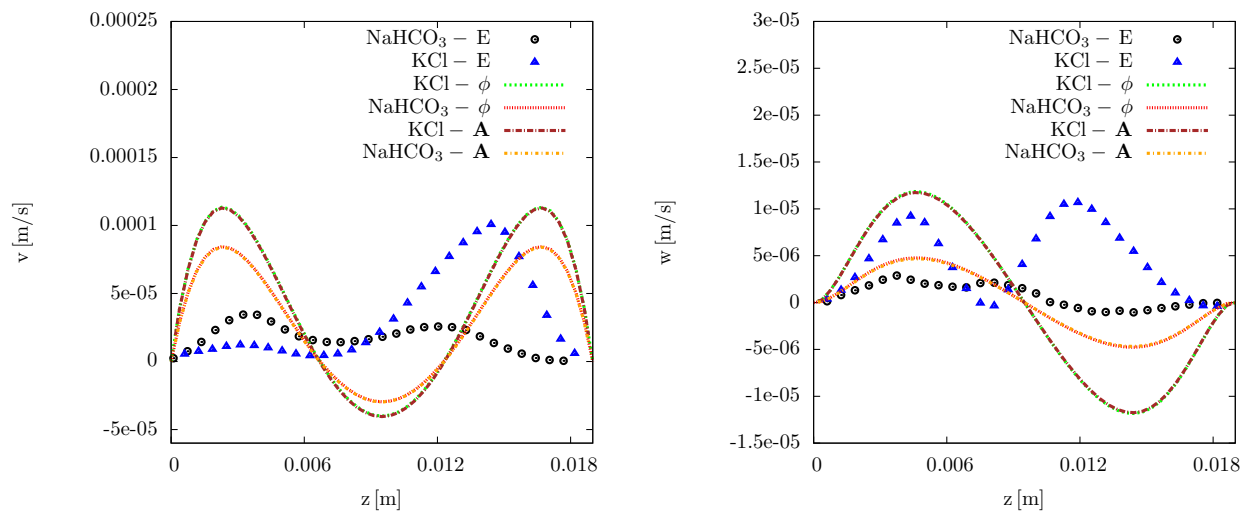


Figura 4-12.: Perfiles de velocidad a lo largo del eje Z con el campo magnético del imán rectangular y una corriente aplicada de 5 mA.

Las Figuras 4-9 a 4-12 muestran que los perfiles de velocidad en general reproducen la forma y magnitud de los resultados experimentales, además se quiere resaltar en todos los casos los perfiles de la componente v de la velocidad a lo largo del eje Z donde se observa un perfil en forma de M, el cual es característico del flujo generado por campos magnéticos no uniformes como lo reportado por Beltrán (2010). Adicionalmente es en esta dirección del plano donde las componentes de la velocidad tienen mayor magnitud.

4.2.3. Energía cinética

Se calculó la energía cinética promedio sobre el plano XY como $K_{EP} = \frac{1}{n} (v^2 + w^2)$, (con n igual al número de nodos) para obtener una analogía con resultados experimentales.

Se calculó también la energía cinética $K_{EV} = \frac{1}{n} (u^2 + v^2 + w^2)$ sobre todo el dominio del fluido para encontrar una relación cualitativa de la energía con la conductividad del fluido, la corriente aplicada y la intensidad del campo magnético aplicado.

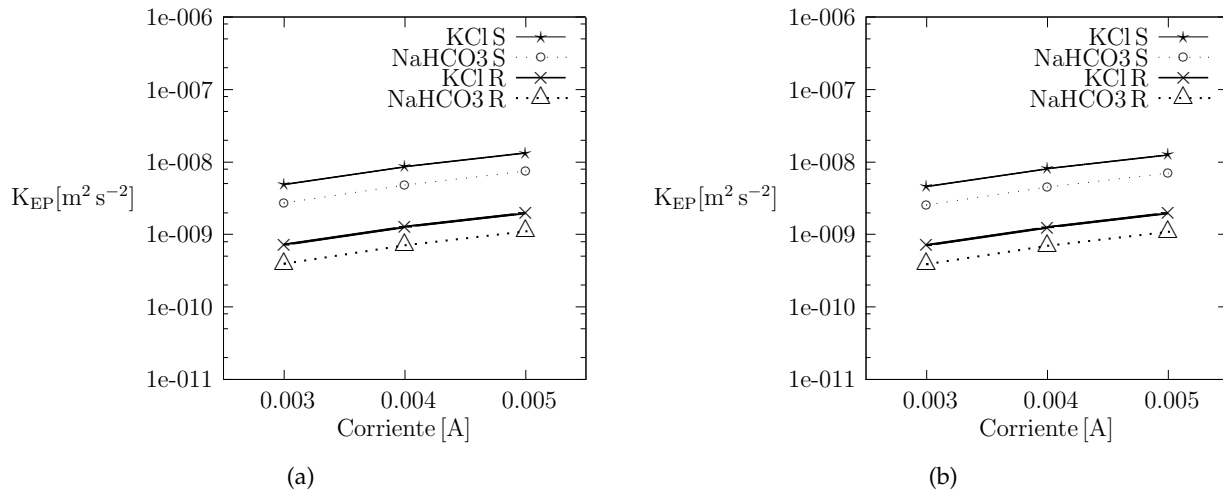


Figura 4-13.: Energía cinética promedio en el plano YZ para **(a)** la formulación ϕ y **(b)** la formulación **A**.

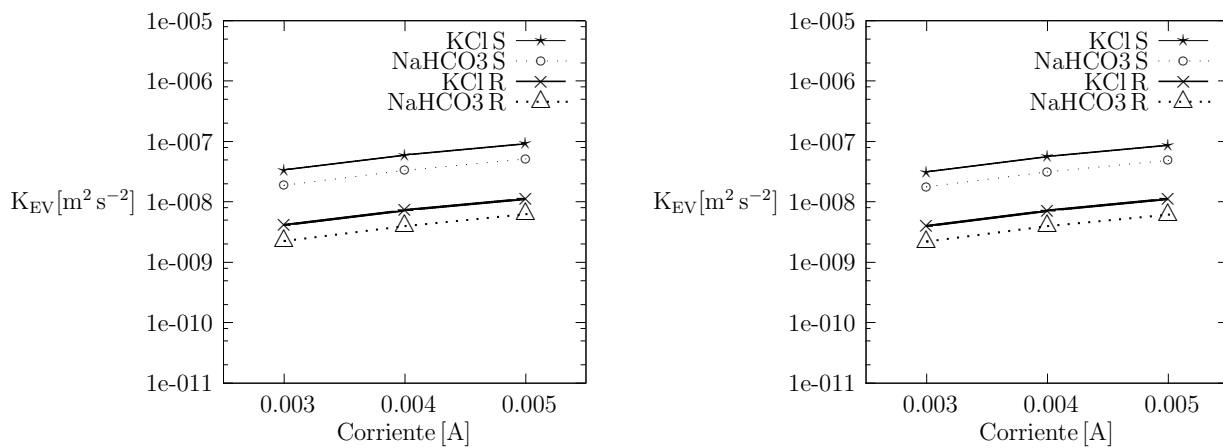


Figura 4-14.: Energía cinética promedio sobre el volumen para **(a)** la formulación ϕ y **(b)** la formulación **A**.

Las Figuras 4-13 y 4-14 muestran que la energía cinética aumenta al aumentar la corriente aplicada. Además, es posible determinar que si la conductividad del fluido es mayor la energía cinética tanto en el plano YZ como en el volumen del fluido también aumenta. Por último se compara la energía cinética para

ambos imanes y se aprecia que ésta también aumenta conforme la intensidad del campo magnético es mayor.

4.3. Estudio paramétrico

Se realizó un estudio paramétrico donde se analiza el efecto de aumentar la corriente aplicada tanto en la formulación de potencial eléctrico como la formulación de potencial vectorial magnético.

Para este caso se eligió mostrar perfiles para las componentes principales de la velocidad a lo largo de cada eje. En el caso del eje X la componente más significativa es la u , para el eje Y es la componente importante es la u y para el eje Z la v . Además se analiza también analizar lo que ocurre con la energía cinética tanto en el plano observable experimentalmente (ver Apéndice B) como en todo el dominio del fluido.

4.3.1. Velocidad

Se muestran los perfiles de la componente u de la velocidad a lo largo del eje X , la componente u a lo largo del eje Y y la componente v a lo largo del eje Z debido a que estas presentan una mayor magnitud en sus respectivas direcciones, se hicieron simulaciones para corrientes de 10, 100 y 500 mA, para ambos electrolitos y ambos imanes.

En las Figuras 4-15 a 4-17 se observan los perfiles de velocidad para corriente de 10 mA donde los perfiles de velocidad son comparan muy bien para ambas formulaciones MHD, ambos imanes y ambas sales, lo anterior indica que los efectos inducidos son aún despreciables y por lo tanto los patrones de flujo son muy similares para cada caso.

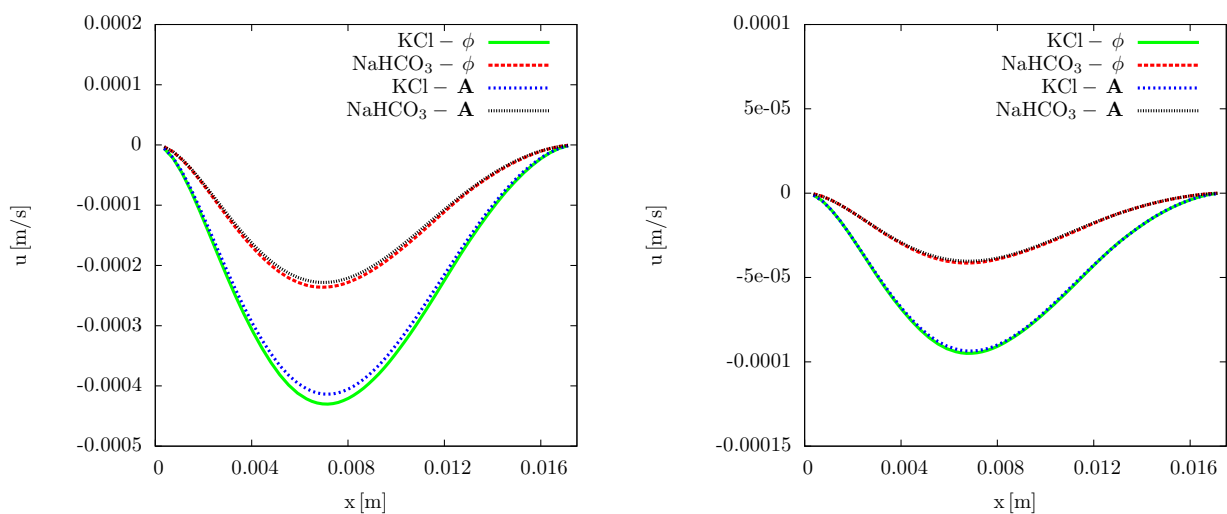


Figura 4-15.: Componente u de la velocidad a lo largo del eje X para una corriente de 10 mA con el campo magnético del imán cuadrado (izquierda) y el imán rectangular (derecha).

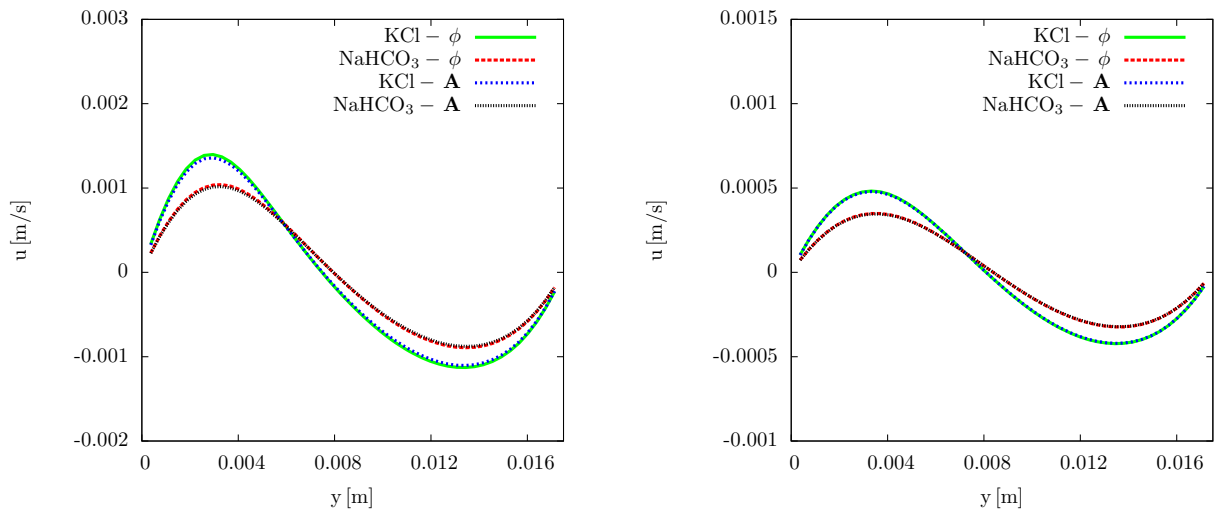


Figura 4-16.: Componente u de la velocidad a lo largo del eje Y para una corriente de 10 mA con el campo magnético del imán cuadrado (izquierda) y el imán rectangular (derecha).

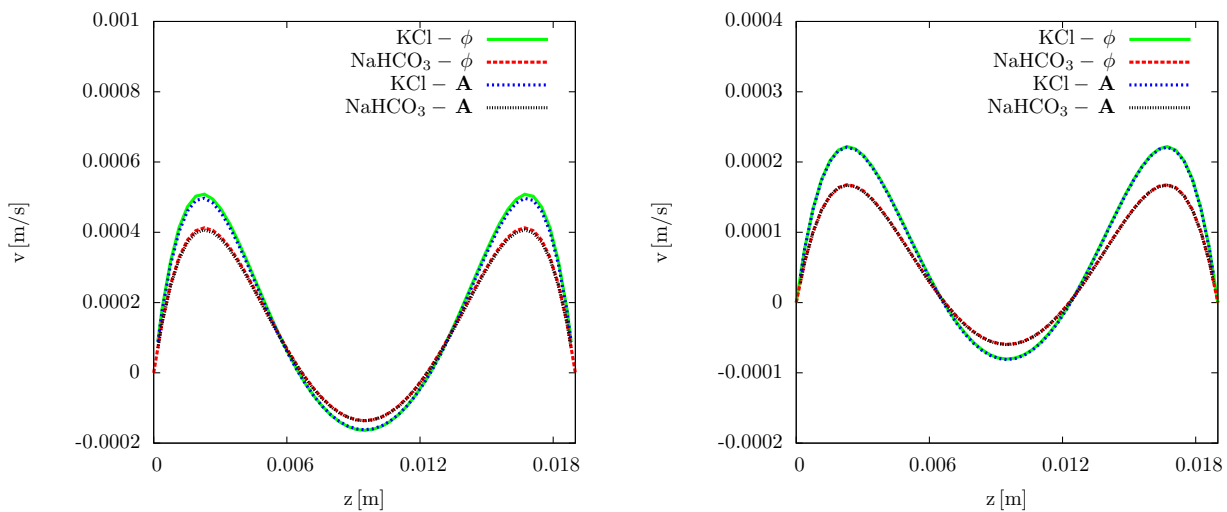


Figura 4-17.: Componente v de la velocidad a lo largo del eje Z para una corriente de 10 mA con el campo magnético del imán cuadrado (izquierda) y el imán rectangular (derecha)

Las Figuras 4-18 a 4-20 se encuentran graficados los perfiles de velocidad para 100 mA. En ambos casos se nota que la velocidad para ambas sales y ambos imanes coinciden muy bien usando la formulación ϕ y **A**. Interesantemente, en la Figura 4-18 se empalma completamente la magnitud de la componente u de la velocidad respecto a ambas sales, en el caso del imán cuadrado, sin embargo para el imán rectangular se alcanza una velocidad ligeramente mayor utilizando KCl y la formulación de potencial eléctrico.

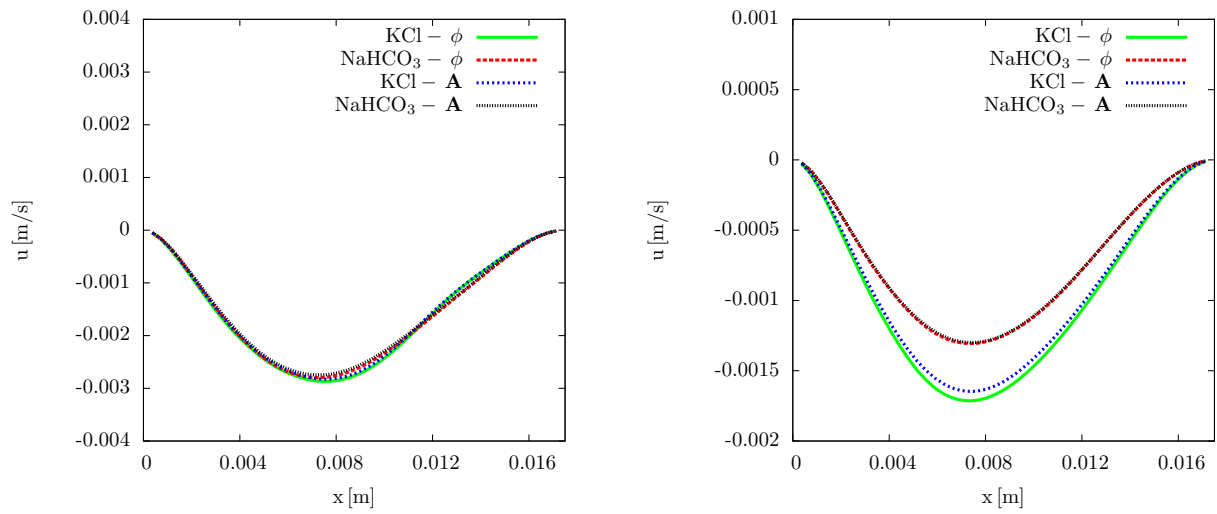


Figura 4-18.: Componente u de la velocidad a lo largo del eje X para una corriente de 100 mA con el campo magnético del imán cuadrado (izquierda) y el imán rectangular (derecha).

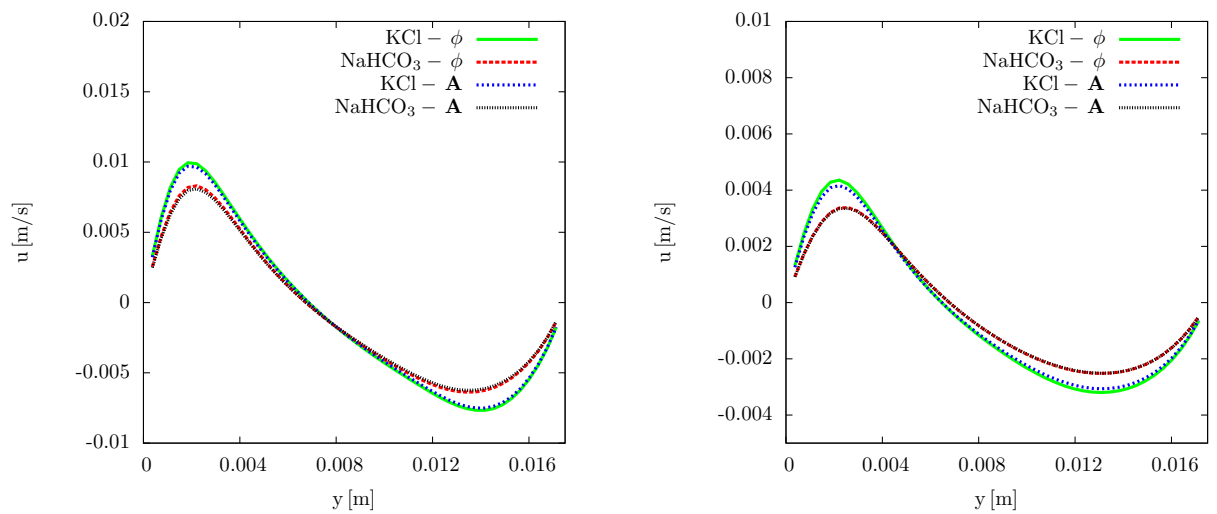


Figura 4-19.: Componente u de la velocidad a lo largo del eje Y para una corriente de 100 mA con el campo magnético del imán cuadrado (izquierda) y el imán rectangular (derecha).

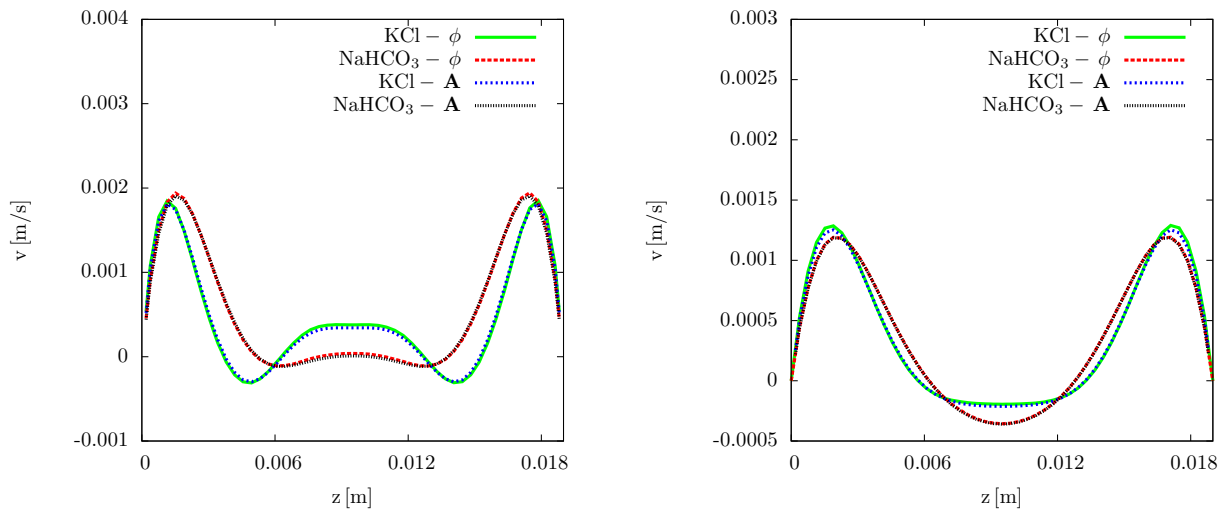


Figura 4-20.: Componente u de la velocidad a lo largo del eje Z para una corriente de 100 mA con el campo magnético del imán cuadrado (izquierda) y el imán rectangular (derecha)

En las Figuras 4-21 a 4-23 la forma y magnitud de las componentes de la velocidad en el caso del imán cuadrado para la solución de KCl para una corriente de 500 mA crecen y difieren de manera considerable formando una capa límite en la frontera donde el gradiente de velocidad es alto. Lo anterior no sucede para el imán rectangular.

La intensidad del campo magnético y las propiedades físicas del fluido influyen en la manera en que el flujo se comporta, pudiendo encontrar efectos inducidos con la formulación de potencial vectorial magnético únicamente en el caso en que la conductividad es mayor (KCl) y la intensidad de campo magnético también lo es.

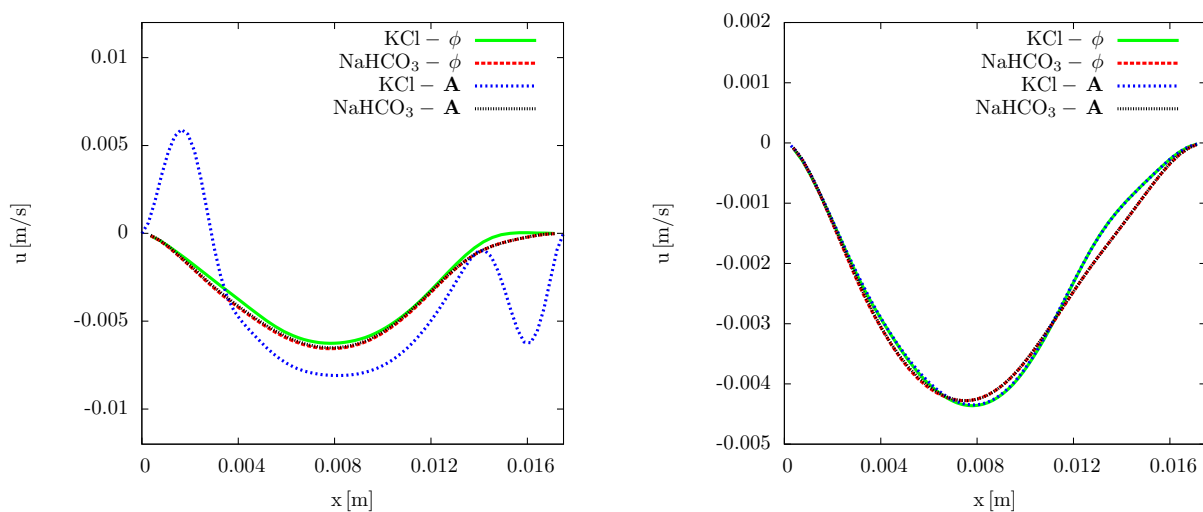


Figura 4-21.: Componente u de la velocidad a lo largo del eje X para una corriente de 500 mA con el campo magnético del imán cuadrado (izquierda) y el imán rectangular (derecha).

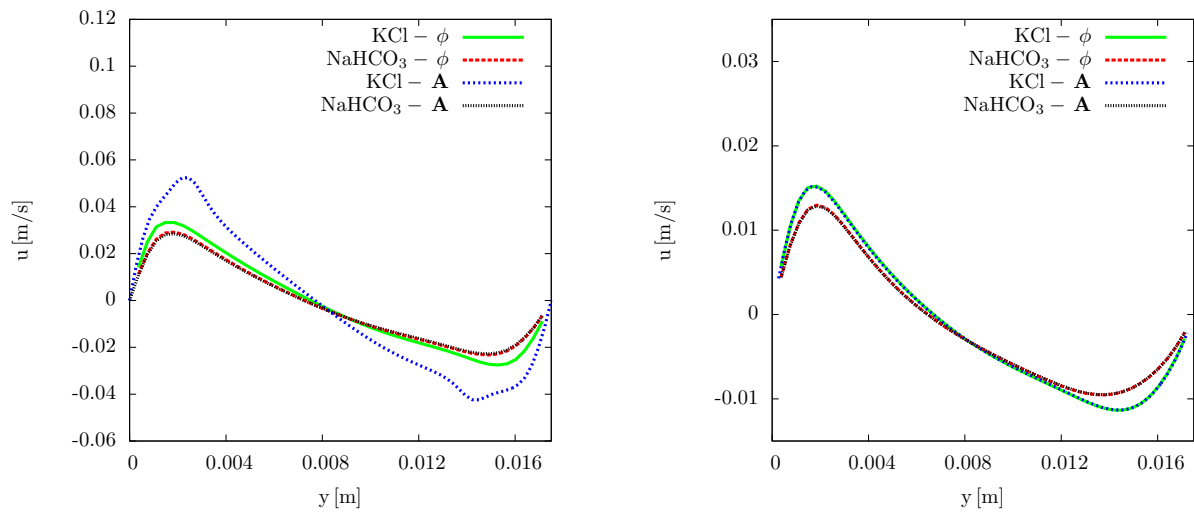


Figura 4-22.: Componente u de la velocidad a lo largo del eje Y para una corriente de 500 mA con el campo magnético del imán cuadrado (izquierda) y el imán rectangular (derecha).

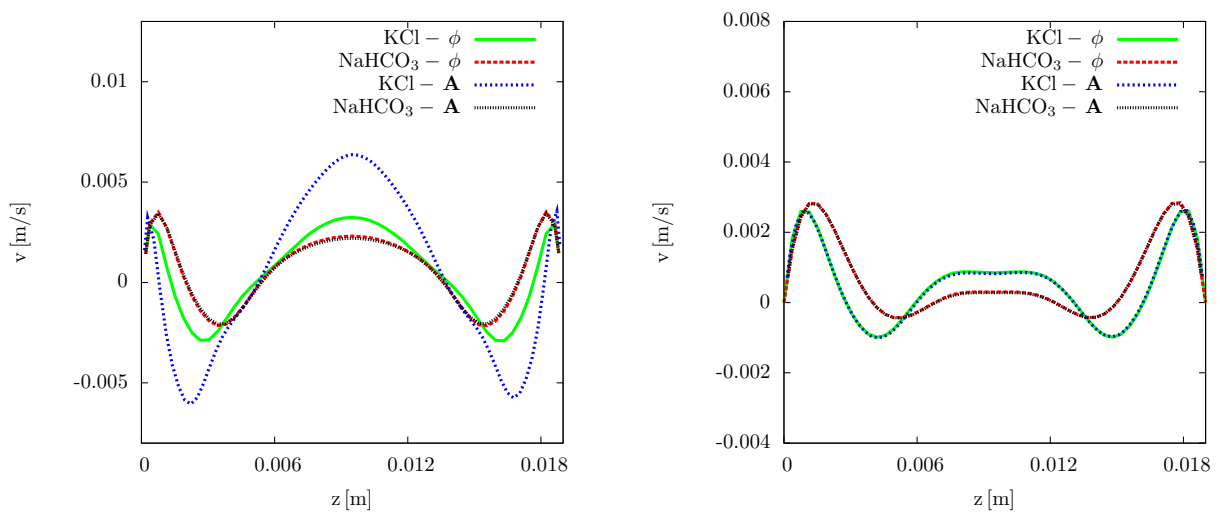


Figura 4-23.: Componente v de la velocidad a lo largo del eje Z para una corriente de 500 mA con el campo magnético del imán cuadrado (izquierda) y el imán rectangular (derecha)

En general, el hecho de aumentar la corriente genera un aumento considerable en la magnitud de la velocidad como se aprecia en los isocontornos mostrados en la Figura 4-4.

4.3.2. Energía cinética

La energía cinética se calculó nuevamente como en la sección 4.2.3 para el barrido paramétrico tanto en el plano XY como en el dominio del fluido con ambas formulaciones.

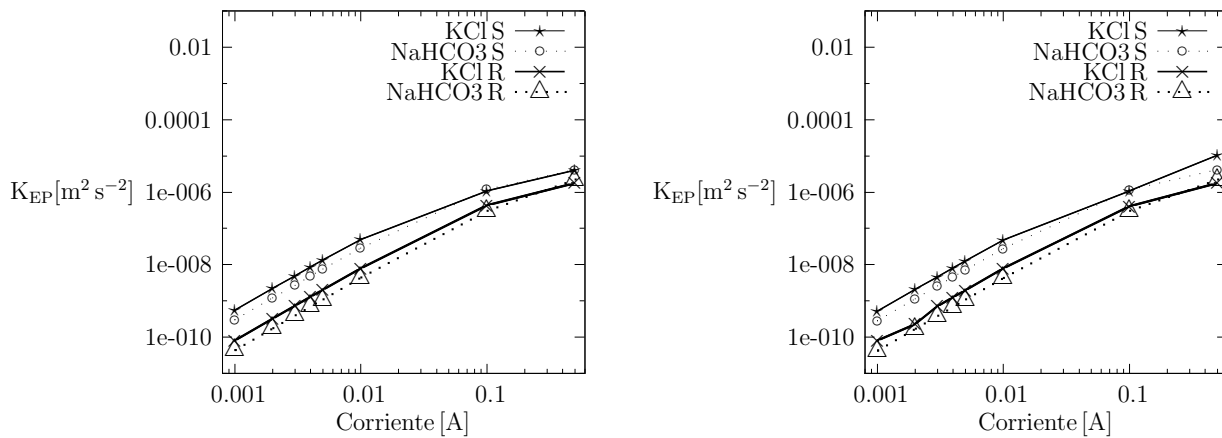


Figura 4-24.: Energía cinética promedio en el plano YZ para la formulación de potencial eléctrico (a la izquierda) y la formulación de potencial vectorial magnético (a la derecha).

Para el plano se nota en la Figura 4-24 que mientras se aumenta la corriente aplicada, la influencia de las conductividades eléctricas es relativamente menor teniendo valores de energía cinética cada vez más similares para ambas sales.

También, de acuerdo con la Figura 4-25 la energía cinética en el plano paralelo al imán comienza a ser más localizada conforme aumenta la corriente y el campo magnético, teniendo una magnitud mayor cerca de las fronteras del dominio. Eso concuerda con los resultados de velocidad anteriormente mostrados y genera una similitud con el problema de Hartmann (ver Apéndice C), donde mientras el número de Hartmann (Ha) es mayor, el gradiente de velocidad cerca de la frontera del dominio es mayor.

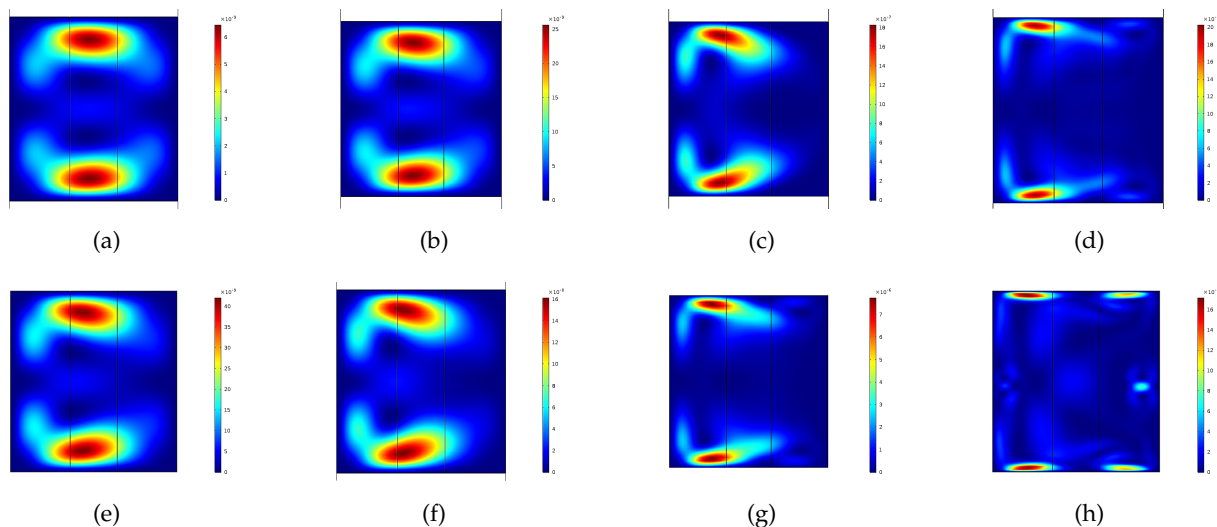


Figura 4-25.: Isocontornos de energía cinética en el plano YZ para el imán rectangular (a)-(d) y corrientes de 5,10,100 y 500mA respectivamente; y para el imán cuadrado (e)-(h) con corrientes de 5, 10, 100 y 500 mA respectivamente.

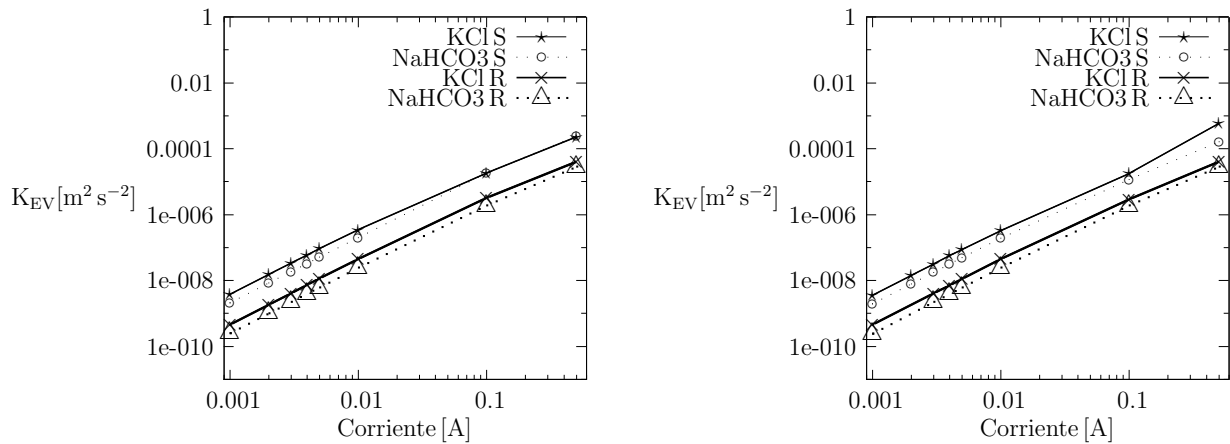


Figura 4-26.: Energía cinética sobre el dominio de fluido para la formulación ϕ (izquierda) y la formulación **A** (derecha).

Finalmente, la energía cinética en el volumen donde el fluido se encuentra confinado es completamente creciente conforme aumenta la corriente aplicada, además como se muestra en la Figura 4-26, la energía cinética no se estaciona sino que crece con una magnitud mayor y una pendiente más pronunciada, e incluso en la formulación de potencial vectorial magnético se nota un crecimiento mayor en una corriente de 500 mA, lo que indica que el estudio en el plano está sesgado debido a que el flujo es altamente tridimensional. Lo anterior lleva a concluir que si se quiere analizar experimentalmente un flujo en un modelo similar al estudiado en este trabajo, es necesario implementar herramientas que permitan visualizar las tres dimensiones del movimiento del fluido, de lo contrario el análisis no será completo.

CAPÍTULO 5

CONCLUSIONES Y TRABAJO FUTURO

5.1. Conclusiones

En este trabajo se analizó de forma numérica el flujo generado electromagnéticamente en una cavidad cilíndrica semejante a la geometría de un electrodo de metal líquido.

Uno de los principales objetivos de este trabajo fue reproducir resultados experimentales previos (Herrera-Ortega 2018) donde se obtienen perfiles tanto para la velocidad como para el campo magnético. En ambos casos los perfiles son bien reproducidos mediante las dos formulaciones MHD planteadas; sin embargo, es importante mencionar que experimentalmente la cantidad de datos obtenidos es insuficiente para determinar los patrones de flujo del sistema el cual es completamente visualizado a través de los resultados numéricos. Se hace notar que el plano visualizado muestra mejor los efectos de campos electromagnéticos en el movimiento del fluido dentro de la cavidad, pero es el plano menos significativo hablando de la magnitud de la velocidad. También mediante la comparación de los perfiles de velocidad es importante mencionar que la técnica experimental PIV encuentra las condiciones de frontera impuestas en el modelo matemático del problema.

Respecto a los patrones de flujo es importante recalcar que la velocidad se ve afectada por tres factores principales: la intensidad de campo magnético, la corriente eléctrica aplicada y las propiedades físicas de los fluidos modelados.

También se puede concluir que conforme la fuerza de Lorentz aplicada crece, el patrón de flujo tiende a volverse más uniforme sobre toda la cavidad, ya que a menor corriente es posible visualizar regiones de alta velocidad cercanas a la superficie del imán mientras que a corrientes altas este efecto se pierde.

Con este estudio se pudo observar que bajo el régimen de conductividades y corrientes aplicadas bajas, realizar cálculos numéricos utilizando una formulación de potencial eléctrico genera prácticamente los mismos resultados que utilizar una formulación de potencial vectorial magnético; ya que los algoritmos de solución están implementados en el software comercial COMSOL Multiphysics® es importante mencionar lo poderosa que es esta herramienta computacional con la cual no se han hecho muchos estudios MHD y mucho menos enfocados directamente las baterías de metal líquido por lo que este trabajo es una primera aproximación con vistas a estudiar detalladamente estos dispositivos a través de este software comercial.

5.2. Trabajo futuro

Se planea seguir estudiando configuraciones de similares a electrodos de baterías de metal líquido hechas con una geometría cuadrada debido a que el modelo de BML evolucionó a esta geometría; por otra parte para analizar mejor los efectos de campos inducidos se planea trabajar con aleaciones de metal líquido a temperatura ambiente además de campos magnéticos generados por imanes de mayor tamaño e intensidades de corriente eléctrica del orden de Amperes.

Un estudio previo de la Unidad Morelia del Instituto de Investigaciones en materiales (Aguilasocho-Acosta

2018) trata de fabricar un prototipo para una configuración de EML con forma cúbica por lo que se ha comenzado generar la geometría y mallado para modelar este sistema. Además el plan es cambiar los fluidos de trabajo utilizando ya sea la aleación eutéctica de metal en estado líquido a temperatura ambiente GaInSn o un caso con dos capas metal líquido-electrolito.

El hecho de realizar estudios numéricos antes de realizar estudios experimentales da la posibilidad de determinar qué zonas en el experimento pueden obtener mayor información sobre el patrón de flujo generado en el sistema.

APÉNDICE A

DETERMINACIÓN EXPERIMENTAL DEL CAMPO MAGNÉTICO

Los perfiles campo magnético son obtenidos usando probeta de efecto Hall ZOA3-3208-10, la cual contiene una sonda capaz de medir el la densidad de flujo de campo magnético que cruza la superficie que ocupa la sonda, como se ve el la Figura A.1. La probeta de efecto Hall es conectada a un Gauss/Teslámetro modelo F.W. Bell 8030 el cual contiene canales para las tres componentes del campo magnético.

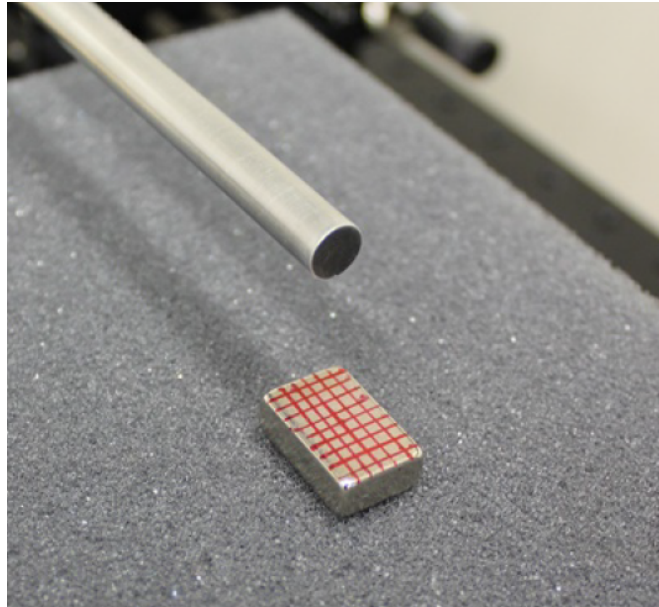


Figura A.1.: Probeta de efecto Hall usada para medir las componentes del campo magnético del imán.

Se midieron las tres componentes del campo magnético B_x, B_y, B_z , cada una a lo largo de las tres direcciones X, Y, Z haciendo un corte en el plano YZ a 25 mm de la superficie del imán, distancia donde se encuentra experimentalmente el centro de la cavidad cilíndrica. En el Capítulo 4 se muestran perfiles de campo magnético obtenidos de mediciones experimentales por este método por Herrera-Ortega (2018).

APÉNDICE B

DETERMINACIÓN EXPERIMENTAL DE LA VELOCIDAD

Se utiliza la técnica de velocimetría por imágenes de partículas (PIV, por sus siglas en inglés) para obtener campos de velocidad en un prototipo experimental que se asemeja a un electrodo de metal líquido (EML).

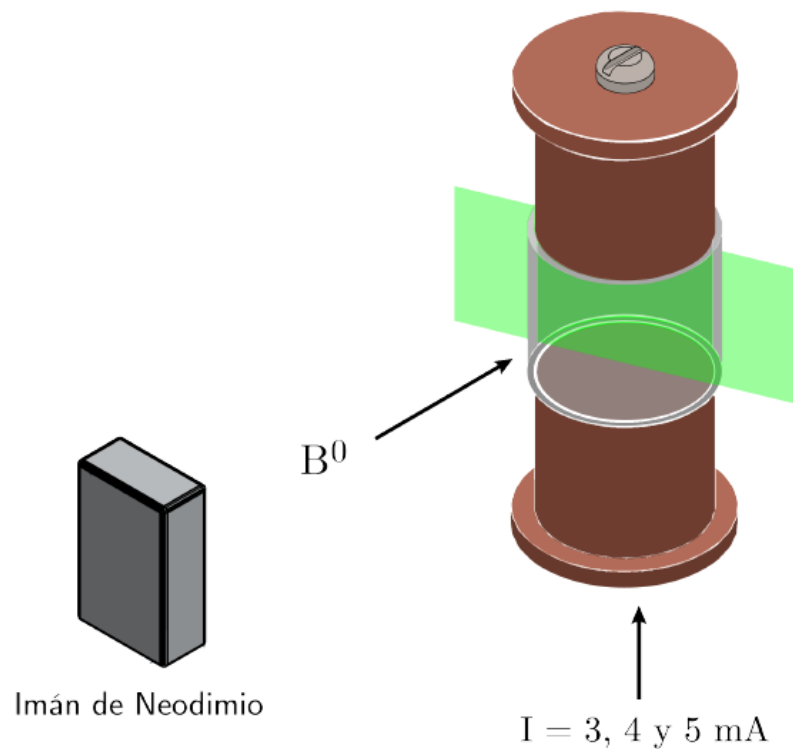


Figura B.1.: Bosquejo en tres dimensiones del prototipo experimental.

Se diseñó y manufacturó un prototipo experimental que simula un EML para el cual se realizaron pruebas PIV en el plano paralelo a la superficie del imán, como se muestra en la Figura B.1. Dicho prototipo está conformado por una cavidad cilíndrica fabricada en vidrio con dos electrodos de cobre como en la Figura B.2 los cuales dan la capacidad de administrar una corriente eléctrica; además se le impone el campo magnético de un imán permanente hecho de la aleación NdFeB. El prototipo experimental es montado en una mesa óptica en la cual se encuentra un láser y una cámara con las cuales es posible realizar el estudio PIV. Como se muestra en la Figura B.3. Las imágenes tomadas son procesadas mediante el software Dynamic Studio versión 5.1 de la marca Dantec Dynamics.

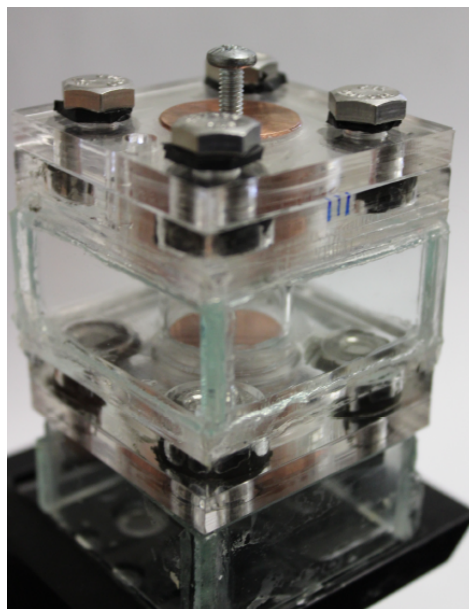


Figura B.2.: Prototipo experimental con electrodos de cobre y una cavidad llena de agua para reducir aberración óptica.

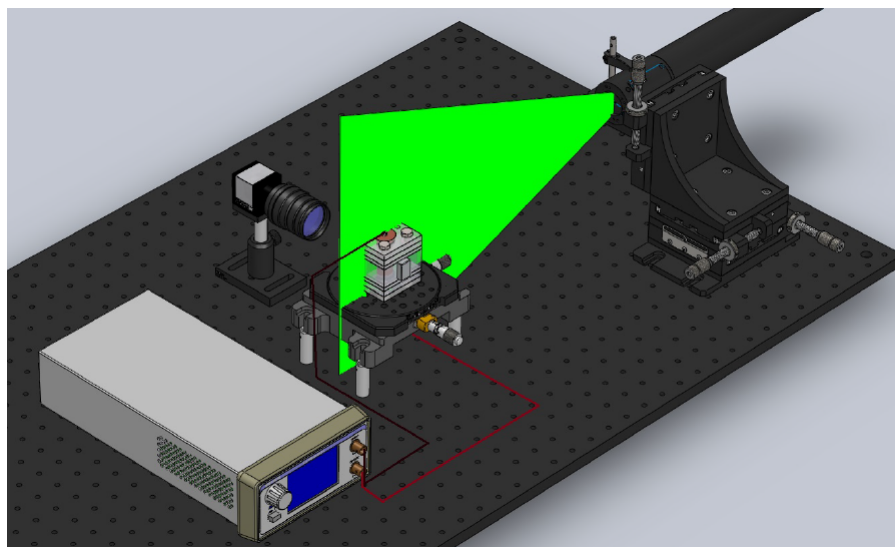


Figura B.3.: Montaje experimental e implementación de la técnica PIV.

Una vez procesadas las imágenes de las partículas se obtuvieron campos de velocidad sobre el plano paralelo a la superficie del imán de los cuales es posible extraer perfiles de velocidad a lo largo de los ejes de simetría del plano visualizado.

APÉNDICE C

VALIDACIÓN NUMÉRICA DE LA FORMULACIÓN DE POTENCIAL ELÉCTRICO

El problema resuelto por Hartmann (1937) es uno de los pocos problemas MHD con soluciones analíticas, la implementación numérica en COMSOL Multiphysics® se valida a través de este problema.

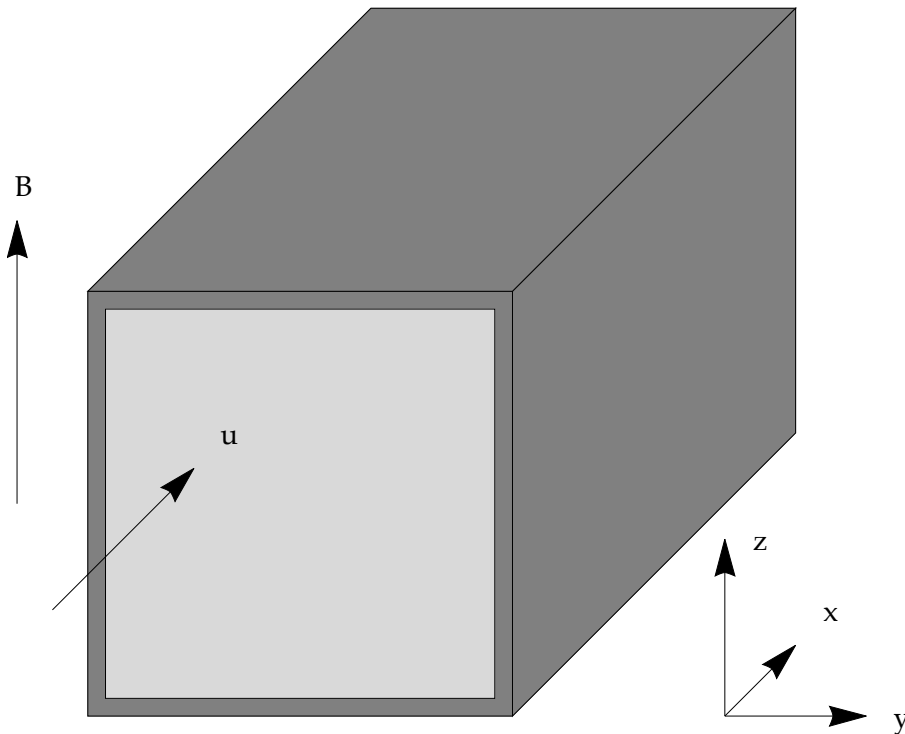


Figura c.1.: Ducto de sección transversal cuadrada.

El flujo de Hartmann consiste en considerar un ducto como en la Figura c.1 con sección transversal cuadrada expuesto a un campo magnético uniforme la dirección z y en el cual se encuentra un flujo completamente desarrollado de metal líquido. Para resolver el problema es necesario considerar las ecuaciones (2-36) y (2-38) en su forma adimensional; considerando $\mathbf{u} = \mathbf{u}^* u_0$, $p = p^* \rho u_0^2$, $t = t^* L / u_0$, y $\nabla = \nabla^* (1/L)$, siendo u_0 la velocidad característica del sistema, L la longitud característica y \mathbf{u}^* , p^* , t^* , ∇^* la velocidad, presión, tiempo y derivadas espaciales en forma adimensional y tomando además $\mathbf{B} = \mathbf{B}^* B_0$ y $\mathbf{J} = \mathbf{J}^* \sigma u_0 B_0$ con B_0 el campo magnético característico y \mathbf{B}^* , \mathbf{J}^* el campo magnético y la densidad de corriente eléctrica adimensionales.

La ecuación (2-36) no se ve alterada, sin embargo sustituyendo la expresiones anteriores la ecuación 2-38

queda como:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla p + \frac{\mu}{u_0 L \varrho} \nabla^2 \mathbf{u} + \frac{\sigma L B_0^2}{\varrho u_0} \mathbf{J} \times \mathbf{B}, \quad (\text{C.1})$$

donde se ha omitido *.

De la ecuación anterior se define el número de Reynolds, $Re \equiv \frac{\varrho L u_0}{\mu}$, y $\frac{Ha^2}{Re} = \frac{\sigma L B_0^2}{\varrho u_0}$ siendo $Ha^2 \equiv \frac{\sigma L^2 B_0^2}{\mu}$ el cuadrado del número de Hartmann.

A partir de la ecuación anterior, Müller y Bühler (2001) presentan una solución analítica para la componente u de la velocidad como función de la coordenada z dada por:

$$u(z) = \hat{u} \left(1 - \frac{\cosh(Ha z)}{\cosh(Ha)} \right), \quad (\text{C.2})$$

$$\text{con } \hat{u} = \frac{1}{Ha} \frac{c + 1}{c Ha + \tanh Ha'}, \quad (\text{C.3})$$

la constante c es elegida como $c = 0$ dado que que las paredes del ducto se consideran aislantes.

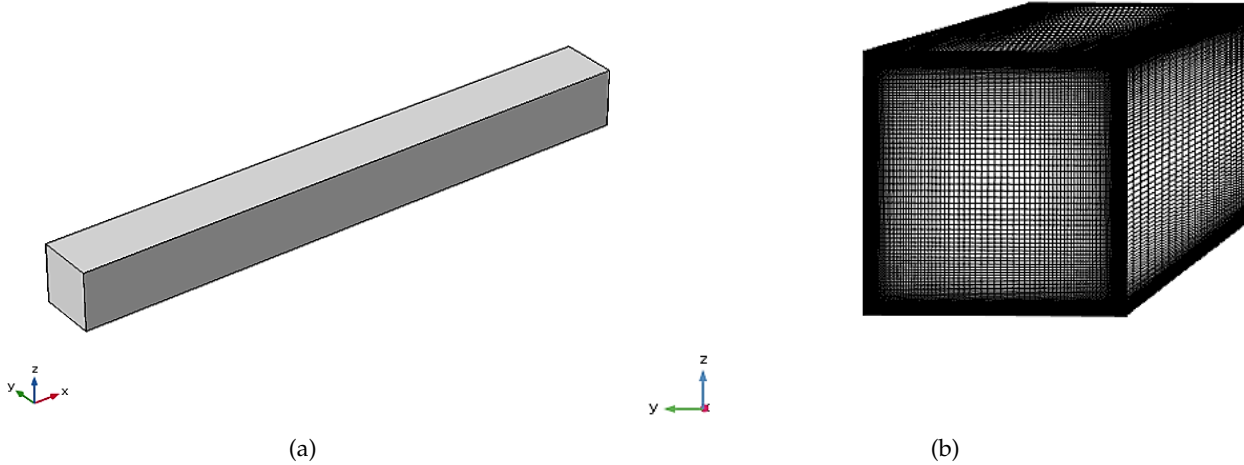


Figura C.2.: (a) Geometría de ducto y (b) mallado refinado a las fronteras.

Con objeto de la validar el software y modelo de potencial eléctrico se resuelve el flujo de Hartmann anteriormente planteado. La solución numérica se hace a partir de un sistema de ecuaciones dado por:

$$\mathbf{B} = \hat{\mathbf{e}}_z, \quad (\text{C.4})$$

$$\nabla \times \mathbf{J} = 0; \quad (\text{C.5})$$

$$\mathbf{J} = \sigma (-\nabla \phi + \mathbf{u} \times \mathbf{B}), \quad (\text{C.6})$$

$$\nabla \times \mathbf{u} = 0; \quad (\text{C.7})$$

$$(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla p + \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{u} + \frac{Ha^2}{Re} \mathbf{J} \times \mathbf{B}; \quad (\text{C.8})$$

Tales ecuaciones se resuelven en una geometría simplificada de un ducto con sección transversal cuadrada de dos unidades de lado y 20 de longitud, se hizo un mallado con elementos hexaédricos refinados hacia

las fronteras del sistema como se ve en la Figura C.2.

Las condiciones de frontera para las distintas variables están dadas como:

$$\mathbf{u}_p = 0; \quad (\text{C.9})$$

$$\mathbf{u}_e = u_0 \hat{\mathbf{e}}_x; \quad (\text{C.10})$$

$$p_s = 0; \quad (\text{C.11})$$

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{J}_p = 0; \quad (\text{C.12})$$

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{J}_s = 0; \quad (\text{C.13})$$

$$\phi_e = 0 \quad (\text{C.14})$$

donde \mathbf{u}_p se refiere a las velocidad en las paredes del ducto, \mathbf{u}_e es la velocidad a la entrada, p_s es la presión a la salida; \mathbf{J}_p y \mathbf{J}_s son las densidades de corriente en las paredes y en la salida respectivamente y ϕ_e es un potencial fijo en la entrada.

u_0	Ha
0.068	10
0.0175	50
0.0094	100

Tabla C.1.: Valores de u_0 y Ha simulados.

Para comparar los resultados obtenidos con los reportados por Müller y Bühler (2001), se fija el parámetro $Re = 1$, la velocidad de referencia u_0 se ajusta para obtener una escala igual a la dada por graficar la ecuación (C.2) y Ha se varía como se muestra en la Tabla C.1.

Con tales valores es posible obtener perfiles de velocidad de la componente u de la velocidad en dependencia de la coordenada z para así comparar con la ecuación (C.2) como se muestra en la Figura C.3¹. Como es de notarse la solución numérica de este problema se ajusta muy bien con los resultados analíticos, por otra parte es posible continuar escalando el problema a valores Ha mayores siempre y cuando el refinamiento de la malla a las orillas sea el suficiente.

¹Las líneas continuas representan la solución analítica se etiquetan con una T, las líneas punteadas corresponden a la solución numérica, con etiqueta N.

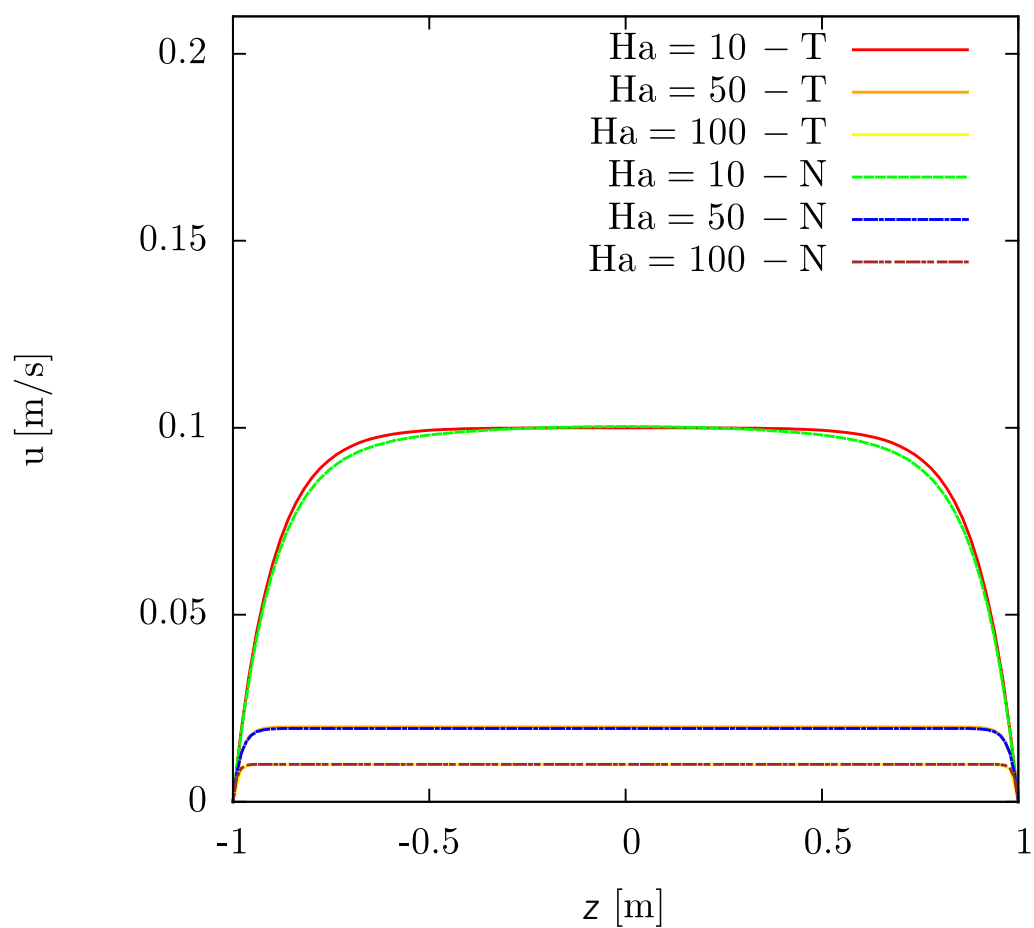


Figura c.3.: Perfiles de velocidad $u(z)$ para valores de $Ha = 10, 50, 100$.

BIBLIOGRAFÍA

- Aguilasocho-Acosta, G. (2018). *Diseño y pruebas de contenedores para el estudio de baterías de metal líquido*. Instituto Tecnológico de Morelia. Morelia.
- Arnold, R. B., Arthur, L. & Corporation, C. (1951). Regenerative Battery.
- Ashour, R., Kelley, D., Salas, A., Starace, M., Weber, N. & Weier, T. (2018). Competing forces in liquid metal electrodes and batteries. *Journal of Power Sources*.
- Beltrán, A. (2010). *Dinámica de Flujos en Obstáculos Magnéticos* (Tesis Doctoral, Universidad Nacional Autónoma de México).
- Beltrán, A. (2017). MHD natural convection flow in a liquid metal electrode. *Applied Thermal Engineering*, 114, 1203-1212. doi:[10.1016/j.applthermaleng.2016.09.006](https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2016.09.006)
- Beltrán, A. & Carrillo-Ricci, S. (2018). ¿Cómo es el campo magnético de un imán? *Boletín de la UNAM Campus Morelia*, 71(1-3).
- Bradwell, D. J., Kim, H., Sirk, A. H. & Sadoway, D. R. (2012). Magnesium – Antimony Liquid Metal Battery for Stationary Energy Storage. *Journal of the American Chemical Society*, 1-4. doi:[10.1021/ja209759s](https://doi.org/10.1021/ja209759s)
- Brito, R., Carvalho, S. & Silva, S. L. E. (2015). Experimental investigation of thermal aspects in a cutting tool using comsol and inverse problem. *Applied Thermal Engineering*, 86, 60-68. doi:<https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2015.03.083>
- Butler, S. & Zhang, Z. (2016). Forward modeling of geophysical electromagnetic methods using Comsol. *Computers Geosciences*, 87, 1-10. doi:<https://doi.org/10.1016/j.cageo.2015.11.004>
- COMSOL. (2017). COMSOL Multiphysics®. COMSOL. Recuperado desde www.comsol.com
- Furlani, E. P. (2001). *Permanent magnet and electromechanical devices*. Academic Press.
- Hartmann, J. (1937). Hg-DYNAMICS I: Theory of the Laminar Conductive Liquid in a Homogeneous Magnetic Field. *Det Kgl. Danske Videnskabernes Selskab. Matematisk-fysiske Meddelelser*, 15(6), 1-28.
- Herreman, W., Nore, C., Cappanera, L. & Guermond, J.-L. (2015). Tayler instability in liquid metal columns and liquid metal batteries. *Journal of Fluid Mechanics*, 771(2015), 79-114. doi:[10.1017/jfm.2015.159](https://doi.org/10.1017/jfm.2015.159)
- Herrera-Ortega, M. (2018). *Flujo generado electromagnéticamente en una cavidad cilíndrica: estudio experimental* (Tesis de licenciatura, Instituto Tecnológico de Morelia).
- Holubowitch, N. E., Manek, S. E., Landon, J., Lippert, C. A., Odom, S. A. & Liu, K. (2016). Molten Zinc Alloys for Lower Temperature, Lower Cost Liquid Metal Batteries. *Advanced Materials Technologies*, 1(3), 1600035. doi:[10.1002/admt.201600035](https://doi.org/10.1002/admt.201600035)
- Hoopes, W. (1925). Electrolytically-Refined Aluminum and Articles Made Therefrom.
- Horstmann, G. M., Weber, N. & Weier, T. (2018). Coupling and stability of interfacial waves in liquid metal batteries. *Journal of Fluid Mechanics*, 845, 1-35. doi:[10.1017/jfm.2018.223](https://doi.org/10.1017/jfm.2018.223). arXiv: [1708.02159](https://arxiv.org/abs/1708.02159)
- Kelley, D. H. & Sadoway, D. R. (2014). Mixing in a liquid metal electrode. *Physics of Fluids*, 26(5). doi:[10.1063/1.4875815](https://doi.org/10.1063/1.4875815)

- Kim, H., Boysen, D. A., Newhouse, J. M., Spatocco, B. L., Chung, B., Burke, P. J., ... Sadoway, D. R. (2012). Liquid Metal Batteries : Past , Present , and Future. *Chemical Reviews*.
- Kim, H., Boysen, D. A., Ouchi, T. & Sadoway, D. R. (2013). Calcium-bismuth electrodes for large-scale energy storage (liquid metal batteries). *Journal of Power Sources*, 241, 239-248. doi:[10.1016/j.jpowsour.2013.04.052](https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2013.04.052)
- Köllner, T., Boeck, T. & Schumacher, J. (2017). Thermal Rayleigh-Marangoni convection in a three-layer liquid-metal-battery model. *Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, 053114(November 2016), 1-23. doi:[10.1103/PhysRevE.95.053114](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.95.053114). arXiv: [1704.05825](https://arxiv.org/abs/1704.05825)
- Li, H., Wang, K., Zhou, H., Guo, X., Cheng, S. & Jiang, K. (2018). Tellurium-tin based electrodes enabling liquid metal batteries for high specific energy storage applications. *Energy Storage Materials*, 14, 267-271. doi:[10.1016/j.ensm.2018.04.017](https://doi.org/10.1016/j.ensm.2018.04.017)
- Lichtenstein, T., Gesualdi, J., Nigl, T. P., Yu, C. T. & Kim, H. (2017). Thermodynamic Properties of Barium-Antimony Alloys Determined by Emf Measurements. *Electrochimica Acta*, 251, 203-211. doi:[10.1016/j.electacta.2017.07.113](https://doi.org/10.1016/j.electacta.2017.07.113)
- Lide, D. R. (2009). *CRC Handbook of Chemistry and Physics*. doi:[10.1021/ja906434c](https://doi.org/10.1021/ja906434c). arXiv: [0202038](https://arxiv.org/abs/0202038) [quant-ph]
- Molokov, S. (2018). The nature of interfacial instabilities in liquid metal batteries in a vertical magnetic field. *Epl*, 121(4). doi:[10.1209/0295-5075/121/44001](https://doi.org/10.1209/0295-5075/121/44001)
- Müller, U. & Bühler, L. (2001). Magnetofluidynamics in Channels and Containers. En *Magnetofluidynamics in Channels and Containers* (Cap. 4, pp. 1-463). Springer-Verlag Berlin Heidelberg GmbH. doi:[10.1007/978-3-662-06431-3](https://doi.org/10.1007/978-3-662-06431-3)
- Ning, X., Phadke, S., Chung, B., Yin, H., Burke, P. & Sadoway, D. R. (2015). Self-healing Li-Bi liquid metal battery for grid-scale energy storage. *Journal of Power Sources*, 275, 370-376. doi:[10.1016/j.jpowsour.2014.10.173](https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2014.10.173)
- Ouchi, T., Kim, H., Ning, X. & Sadoway, D. R. (2014). Calcium-Antimony Alloys as Electrodes for Liquid Metal Batteries. *Journal of the Electrochemical Society*. doi:[10.1149/2.0801412jes](https://doi.org/10.1149/2.0801412jes)
- Ouchi, T., Kim, H., Spatocco, B. L. & Sadoway, D. R. (2016). Calcium-based multi-element chemistry for grid-scale electrochemical energy storage. *Nature Communications*, 7, 1-5. doi:[10.1038/ncomms10999](https://doi.org/10.1038/ncomms10999)
- Personnetaz, P., Beckstein, P., Landgraf, S., Köllner, T., Nimtz, M., Weber, N. & Weier, T. (2018). Thermally driven convection in Li|Bi liquid metal batteries. *Journal of Power Sources*, 401(May), 362-374. doi:[10.1016/j.jpowsour.2018.08.069](https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2018.08.069). arXiv: [1805.11521](https://arxiv.org/abs/1805.11521)
- Sadoway, D. R., Ceder, G. & Bradwell, D. J. (2008). High-amperage energy storage device and method.
- Sahu, S. & Bhattacharyay, R. (2018). Validation of COMSOL code for analyzing liquid metal magnetohydrodynamic flow. *Fusion Engineering and Design*, 127(January), 151-159. doi:[10.1016/j.fusengdes.2018.01.009](https://doi.org/10.1016/j.fusengdes.2018.01.009)
- Schumacher, J., Götzfried, P. & Scheel, J. D. (2015). Enhanced enstrophy generation for turbulent convection in low-Prandtl-number fluids. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 112(31), 9530-9535. doi:[10.1073/pnas.1505111112](https://doi.org/10.1073/pnas.1505111112)
- Seilmayer, M., Stefani, F., Gundrum, T., Weier, T., Gerbeth, G., Gellert, M. & Rüdiger, G. (2012). Experimental evidence for a transient Tayler instability in a cylindrical liquid-metal column. *Physical Review Letters*, 108(24), 1-4. doi:[10.1103/PhysRevLett.108.244501](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.108.244501). arXiv: [1112.2103](https://arxiv.org/abs/1112.2103)

- Shen, Y. & Zikanov, O. (2016). Thermal convection in a liquid metal battery. *Theoretical and Computational Fluid Dynamics*, 30(4), 275-294. doi:[10.1007/s00162-015-0378-1](https://doi.org/10.1007/s00162-015-0378-1). arXiv: [1507.08315](https://arxiv.org/abs/1507.08315)
- Spatocco, B. L., Ouchi, T., Lambotte, G., Burke, P. J. & Sadoway, D. R. (2015). Low-Temperature Molten Salt Electrolytes for Membrane-Free Sodium Metal Batteries. *Journal of The Electrochemical Society*, 162(14), A2729-A2736. doi:[10.1149/2.0441514jes](https://doi.org/10.1149/2.0441514jes)
- Stefani, F., Weier, T., Gundrum, T. & Gerbeth, G. (2011). How to circumvent the size limitation of liquid metal batteries due to the Tayler instability. *Energy Conversion and Management*, 52(8-9), 2982-2986. doi:[10.1016/j.enconman.2011.03.003](https://doi.org/10.1016/j.enconman.2011.03.003). arXiv: [1005.5046](https://arxiv.org/abs/1005.5046)
- Taylor, R. (1963). The adiabatic stability of stars containing magnetic fields.-I. Toroidal Fields. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 161(1), 365-380. doi:<https://doi.org/10.1093/mnras/161.4.365>
- Tu, J., Yeoh, G.-H. & Liu, C. (2018). Chapter 2 - CFD Solution Procedure: A Beginning. En J. Tu, G.-H. Yeoh & C. Liu (Eds.), *Computational Fluid Dynamics (Third Edition)* (Third Edition, pp. 33-63). Butterworth-Heinemann. doi:<https://doi.org/10.1016/B978-0-08-101127-0.00002-7>
- Wang, K., Jiang, K., Chung, B., Ouchi, T., Burke, P. J., Boysen, D. A., ... Sadoway, D. R. (2014). Lithium-antimony-lead liquid metal battery for grid-level energy storage. *Nature*, 514(7522), 348-350. doi:[10.1038/nature13700](https://doi.org/10.1038/nature13700)
- Weber, N., Beckstein, P., Galindo, V., Herreman, W., Nore, C., Stefani, F. & Weier, T. (2017a). Metal pad roll instability in liquid metal batteries. *Magnetohydrodynamics*, 53(1), 3-13. arXiv: [1612.03656](https://arxiv.org/abs/1612.03656)
- Weber, N., Beckstein, P., Galindo, V., Starace, M. & Weier, T. (2018a). Electro-vortex flow simulation using coupled meshes. *Computers and Fluids*.
- Weber, N., Galindo, V., Priede, J., Stefani, F. & Weier, T. (2015). The influence of current collectors on Tayler instability and electro-vortex flows in liquid metal batteries. *Physics of Fluids*, 27(1). doi:[10.1063/1.4905325](https://doi.org/10.1063/1.4905325). arXiv: [1409.3735](https://arxiv.org/abs/1409.3735)
- Weber, N., Nitz, M., Personnettaz, P., Salas, A. & Weier, T. (2018b). Electromagnetically driven convection suitable for mass transfer enhancement in liquid metal batteries. *Applied Thermal Engineering*.
- Weber, N., Beckstein, P., Herreman, W., Horstmann, G. M., Nore, C., Stefani, F. & Weier, T. (2017b). Sloshing instability and electrolyte layer rupture in liquid metal batteries. *Physics of Fluids*, 29(5). doi:[10.1063/1.4982900](https://doi.org/10.1063/1.4982900). arXiv: [1612.03683](https://arxiv.org/abs/1612.03683)
- Weber, N., Galindo, V., Stefani, F. & Weier, T. (2014). Current-driven flow instabilities in large-scale liquid metal batteries, and how to tame them. *Journal of Power Sources*, 265, 166-173. doi:[10.1016/j.jpowsour.2014.03.055](https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2014.03.055). arXiv: [1311.7306](https://arxiv.org/abs/1311.7306)
- Weber, N., Galindo, V., Stefani, F., Weier, T. & Wondrak, T. (2013). Numerical simulation of the Tayler instability in liquid metals. *New Journal of Physics*, 15. doi:[10.1088/1367-2630/15/4/043034](https://doi.org/10.1088/1367-2630/15/4/043034). arXiv: [arXiv:1212.3187v1](https://arxiv.org/abs/1212.3187v1)
- Xiang, L. & Zikanov, O. (2017). Subcritical convection in an internally heated layer. *Physical Review Fluids*. doi:[10.1017/S0022112070002082](https://doi.org/10.1017/S0022112070002082). arXiv: [1701.06618](https://arxiv.org/abs/1701.06618)
- Xu, J., Kjos, O. S., Osen, K. S., Martinez, A. M., Kongstein, O. E. & Haarberg, G. M. (2016). Na-Zn liquid metal battery. *Journal of Power Sources*, 332, 274-280. doi:[10.1016/j.jpowsour.2016.09.125](https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2016.09.125)

- Yeo, J.-S., Lee, J.-H. & Yoo, E.-J. (2018). Electrochemical properties of environment-friendly lithium-tin liquid metal battery. *Electrochimica Acta*. doi:[10.1016/j.electacta.2018.09.072](https://doi.org/10.1016/j.electacta.2018.09.072)
- Zikanov, O. (2015). Metal pad instabilities in liquid metal batteries. *Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, 92(6), 1-8. doi:[10.1103 / PhysRevE.92.063021](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.92.063021). arXiv: [1508.04474](https://arxiv.org/abs/1508.04474)
- Zikanov, O. (2018). Shallow water modeling of rolling pad instability in liquid metal batteries. *Theoretical and Computational Fluid Dynamics*, 32(3), 325-347. doi:[10.1007/s00162-018-0456-2](https://doi.org/10.1007/s00162-018-0456-2). arXiv: [1706.08589](https://arxiv.org/abs/1706.08589)