

# Treball de Fi de Grau

Grau en Enginyeria en Tecnologies Industrials (GETI)

## DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN CONTROLADOR PREDICTIVO MULTIVARIABLE PARA UN ELECTROLIZADOR ALCALINO

### MEMÒRIA

1 de julio de 2022

**Autora:** Blanca Caffarena Funcia

**Director:** Carlos Ocampo-Martínez

**Convocatòria:** 06/2022



Escola Tècnica Superior  
d'Enginyeria Industrial de Barcelona





# Agradecimientos

Primero de todo me gustaría agradecer a mi pareja, por tantas charlas de motivación para que siguiese adelante con mis proyectos y tantas horas acompañándome en la biblioteca y a la hora de la comida, a pesar de no tener tiempo, para que yo continuase las interminables horas de estudio.

Segundo, quiero agradecer a los compañeros y amigos que he ido haciendo durante la carrera. Su ayuda para explicarme conceptos y sus apuntes han servido para que yo ahora esté terminando esta etapa que, aunque bonita, ha sido bastante ardua para todos y sin su apoyo, habría sido mucho más difícil.

Tercero, a mi familia por todo el apoyo que me han dado durante todos estos años de universidad, a pesar de lo difícil que han sido las épocas de exámenes y de trabajos en grupo.

Finalmente, me gustaría agradecer a mi tutor Carlos Ocampo Martínez, por su asesoramiento técnico y apoyo, ¡hasta en los fines de semana! También todos los profesionales que puntualmente hayan dado su apoyo o colaborado en este proyecto de alguna forma.



# Resumen

En este trabajo se diseña y simula un controlador predictivo basado en modelo multi-objetivo para un sistema complejo de un electrolizador alcalino. Se explica y se comenta el análisis de los datos y la información que se ha podido extraer sobre el electrolizador alcalino de alta presión con límite inferior de explosividad del  $H_2$  del 4%. Los gases de  $H_2$  y  $O_2$ , deben suministrarse a altas presiones para evitar el uso de compresores. Dado que la pureza del gas disminuye con las altas presiones, se espera aumentar la presión de funcionamiento posible evitando la contaminación con una estrategia de control adecuada.

En la búsqueda de aumentar la presión de funcionamiento de los electrolizadores alcalinos, se necesitan estrategias de control para disminuir la contaminación cruzada de los gases y, en consecuencia, aumentar la pureza del hidrógeno suministrado.

Cabe resaltar que este trabajo ha tomado como base el modelo desarrollado anteriormente por el grupo de investigación correspondiente, con lo que se inicia el diseño de los controladores predictivos teniendo como base el conocimiento del comportamiento del sistema en lazo cerrado con otros controladores diseñados e incluso implementados experimentalmente.

El diseño parte del modelo lineal a controlar ya desarrollado e incorpora el cálculo de los cambios óptimos en las variables manipuladas para lograr el resultado deseado y comprobar su precisión frente a otros controladores planteados en ese trabajo precedente.

En este sentido, la modelización y el control son cuestiones clave para mejorar el funcionamiento y el diseño. El controlador se probará en un modelo lineal de alta fidelidad del electrolizador y debe ser capaz de mantener la impureza por debajo del 1% en todos los casos, manteniendo, prácticamente en todos los escenarios, la diferencia de nivel de solución líquida entre ambos SC por debajo de 4 mm y un error de presión máximo de 0,5%.

Naturalmente, se mostrará las pruebas realizadas en el sistema real para validar el modelo, una vez más, y la estrategia de control desarrollada. Finalmente, se presentan y discuten todos los resultados obtenidos del sistema de lazo cerrado resultante basado en control predictivo con sus consecuentes conclusiones.



# Índice de figuras

|      |  |    |
|------|--|----|
| 1.1  | Membrana de intercambio de un electrolizador. . . . .  | 2  |
| 1.2  | Distribución de célula de voltaje. . . . .   | 3  |
| 1.3  | Cambio de célula de voltaje por la temperatura. . . . .  | 4  |
| 1.4  | Sobrepotencial de oxígeno de diferentes materiales de electrodos. . . . .  | 8  |
| 1.5  | Sobrepotencial de hidrógeno de diferentes materiales de electrodos. . . . .  | 8  |
| 1.6  | Taxonomía de la producción de hidrógeno con énfasis en el objetivo del presente trabajo. . . . .   | 10 |
| 1.7  | Diagrama de flujo del proceso del electrolizador del laboratorio de hidrógeno (EHL). Los Indicadores y Transmisores se incluyen sin lazos de control. . . . .  | 13 |
| 1.8  | Despiece del conjunto del paquete celular. . . . .   | 14 |
| 1.9  | Esquema de la célula electrolítica con las reacciones $H_2O^*$ representando la solución de KOH Y $H_2^{**}$ $O_2^{**}$ representando las salidas contaminadas. . . . .                                    | 15 |
| 1.10 | Variables medidas presentes en EHL. . . . .  | 16 |
| 1.11 | Actuadores de corriente en el EHL. . . . .   | 16 |
| 2.1  | Tabla de dimensionado de las secciones de las tuberías y accesorios. . . . .   | 20 |
| 2.2  | Diagrama de flujo con los sistemas de proceso numerados en romanos. Los intercambios de masa se identifican con números dentro de los círculos. . . . .  | 22 |
| 2.3  | Ecuaciones de equilibrio que forman la estructura básica del modelo. . . . .   | 23 |
| 2.4  | Lista de símbolos. . . . .   | 23 |
| 2.5  | Ecuaciones constitutivas o de evaluación de los parámetros estructurales. . . . .  | 24 |
| 2.6  | Lista de símbolos, variables, parámetros y constantes del modelo. . . . .  | 24 |
| 2.7  | Lista de entradas, perturbaciones y salidas . . . . .  | 26 |
| 2.8  | Explicación gráfica de los pasos dados para pasar de un modelo orientado a la simulación a un modelo orientado al control. . . . .   | 26 |
| 2.9  | Lista de estados incluidos en el modelo reducido no lineal. . . . .  | 27 |
| 2.10 | Diagrama de flujo del sistema reducido indicando las variables definidas como constante y las rechazadas. . . . .  | 28 |
| 2.11 | Comparación entre las respuestas del modelo no lineal completo y el COM reducido cuando se aplica un impulso de 10 s de duración en la corriente eléctrica cuando $P_{H_2} = 40$ bar e $I = 30$ A. . . . . | 28 |
| 2.12 | Comparación entre las respuestas del modelo no lineal completo y el COM reducido cuando se aplica un escalón constante en la corriente eléctrica cuando $P_{H_2} = 40$ bar e $I = 30$ A. . . . .           | 29 |
| 3.1  | Composición general de un MPC. . . . .   | 34 |
| 3.2  | Restricciones en la salida del proceso y en la señal de control. . . . .   | 35 |
| 3.3  | Estructura de un MPC. . . . .  | 35 |
| 4.1  | Esquema de control propuesto. . . . .  | 40 |

|     |   |    |
|-----|---|----|
| 5.1 | Simulación con $H_p = 15$ y distintas ponderaciones para una I no constante | 50 |
| 5.2 | Simulación con $H_p = 15$ y distintas ponderaciones para una I = 10 A . . . | 51 |
| 5.3 | Simulación con $H_p = 30$ e I no constante con $\tau < 30$ . . . . .        | 52 |
| 5.4 | Simulación con $H_p = 30$ e I no constante con $\tau > 30$ . . . . .        | 52 |



# Índice de tablas

|     |  |    |
|-----|--|----|
| 5.1 | Resultados de la simulación para una corriente eléctrica variable . . . . .                  | 48 |
| 5.2 | Resultados de la simulación para una corriente eléctrica de 10 A . . . . .                   | 49 |
| 5.3 | Resultados de la simulación para $H_p = 30$ y una corriente eléctrica no constante . . . . . | 53 |
| 6.1 | Análisis de costes . . . . .   | 55 |



# Acrónimos

AWE Electrolizador de Agua Alcalino

COM Modelo Orientado a Control

CP Paquete de Células

CS Sistema de Refrigeración

EHL Electrolizador del Laboratorio de Hidrógeno

ITAE Criterio Integral del Error Absoluto multiplicado por el Tiempo

LTI Lineal Invariante en el Tiempo

LQR Regulador Lineal Cuadrático

MPC Control Predictivo basado en Modelo

PBSM Modelo Semifísico de Base Fenomenológica

PI Bomba de Inyección

PID Proporcional-Integral-Derivativo

PT Tanque Presurizado

RP Bomba de Recirculación

SC Cámara de Separación

SOM Modelo Orientado a Simulación

QP Programación Cuadrática



# Índice general

|  |            |
|--|------------|
| <b>Agradecimientos</b>   | <b>I</b>   |
| <b>Resumen</b>   | <b>III</b> |
| <b>Lista de Figuras</b>  | <b>VI</b>  |
| <b>Lista de Tablas</b>   | <b>VII</b> |
| <b>Acrónimos</b>   | <b>IX</b>  |
| <b>1 Introducción</b>  | <b>1</b>   |
| 1.1 Motivación . . . . .   | 1          |
| 1.2 Estado del arte . . . . .  | 3          |
| 1.2.1 El principio de la electrólisis . . . . .                        | 3          |
| 1.2.2 Producción de hidrógeno mediante electrólisis alcalina . . . . . | 9          |
| 1.2.3 Perspectiva de la economía del hidrógeno . . . . .               | 10         |
| 1.2.4 Revisión de la literatura sobre modelización y control . . . . . | 10         |
| 1.2.5 Descripción del sistema . . . . .                                | 12         |
| 1.3 Objetivos . . . . .  | 16         |
| 1.4 Estructura . . . . .   | 17         |
| <b>2 Descripción del modelo</b>  | <b>19</b>  |
| 2.1 Descripción del proceso y objetivo del modelo . . . . .            | 19         |
| 2.2 Hipótesis de modelización . . . . .                                | 20         |
| 2.2.1 Definición del sistema de proceso . . . . .                      | 21         |
| 2.2.2 Estructura básica del modelo . . . . .                           | 22         |
| 2.2.3 Variables, parámetros y constantes . . . . .                     | 22         |
| 2.2.4 Ecuaciones constitutivas y de evaluación . . . . .               | 22         |
| 2.2.5 Identificación de los parámetros . . . . .                       | 23         |
| 2.2.6 Análisis de los grados de libertad . . . . .                     | 24         |
| 2.3 Solución del modelo y análisis de los resultados . . . . .         | 25         |
| 2.4 Reducción del modelo sobre una base física . . . . .               | 26         |
| <b>3 Control Predictivo basado en modelo</b>                           | <b>31</b>  |
| 3.1 Introducción al control predictivo . . . . .                       | 31         |
| 3.1.1 Estructura del control predictivo . . . . .                      | 32         |
| 3.1.2 Composición general de un control predictivo . . . . .           | 33         |
| 3.1.3 Optimización multiobjetivo . . . . .                             | 36         |
| 3.2 Implementación MPC con YALMIP . . . . .                            | 37         |
| <b>4 Diseño del controlador</b>  | <b>39</b>  |

|          |  |           |
|----------|--|-----------|
| 4.1      | Introducción . . . . .   | 39        |
| 4.1.1    | Estrategia de control . . . . .                                    | 41        |
| 4.1.2    | Objetivos de control . . . . .                                     | 42        |
| 4.1.3    | Función objetivo del control predictivo . . . . .                  | 42        |
| 4.1.4    | Problema de optimización . . . . .                                 | 43        |
| 4.1.5    | Restricciones . . . . .  | 43        |
| <b>5</b> | <b>Simulaciones y resultados</b>                                   | <b>45</b> |
| 5.1      | YALMIP: herramienta de optimización convexa . . . . .              | 45        |
| 5.2      | Indicadores clave de rendimiento y parámetros de control . . . . . | 46        |
| 5.3      | Resultados . . . . .   | 47        |
| <b>6</b> | <b>Análisis Económico</b>  | <b>55</b> |
| <b>7</b> | <b>Impacto Medioambiental</b>                                      | <b>57</b> |
| <b>8</b> | <b>Conclusiones y trabajo futuro</b>                               | <b>61</b> |
|          | <b>Bibliografía</b>  | <b>65</b> |

# Capítulo 1

## Introducción

### 1.1. Motivación

La electrólisis del agua es una tecnología prometedora para permitir el almacenamiento del excedente de electricidad producido por fuentes de energía renovables intermitentes en forma de hidrógeno. El núcleo de esta tecnología es el electrolito, y el hecho de que éste sea ácido o alcalino afecta a los mecanismos de reacción y a la pureza de los gases, y tiene una gran importancia para la estabilidad y la actividad de los electrocatalizadores.

En este trabajo se hará enfoque en la electrólisis alcalina que es una tecnología que, aunque ya esté establecida y disponible en el mercado, la operación de alta presión para compresores de distribución no se ha desarrollado completamente. Por eso, este documento partirá de un modelo que represente esta ciencia de la manera más fiable posible.

La oferta global se centra en la energía generada a partir de fuentes renovables y su posterior almacenamiento y transporte de hidrógeno para ayudar a reducir las emisiones de gases de efecto invernadero sin renunciar a las comodidades modernas. En la actualidad, este gas se utiliza en la industria química, y su producción se basa en combustibles fósiles. La introducción de este resultante energético requiere el desarrollo de métodos respetuosos con el medio ambiente para su obtención. Se parte de un modelo semifísico de base fenomenológica de un electrolizador alcalino auto presurizado, el cual se fundamenta en el balance de masa y energía, y representa el comportamiento dinámico de la electrólisis para producir hidrógeno y oxígeno.

Por otro lado, había una falta de modelos dinámicos y literatura relacionada con las estrategias de control. Consecuentemente, el objetivo de este trabajo será contribuir principalmente al control de electrolizadores alcalinos de alta presión para optimizar la integridad del gas producido. En él, el modelo permite la predicción de variables operativas, como los cambios de presión y nivel de líquido en la Cámara de Separación (SC, siglas en inglés) de gases debido a los posibles cambios eléctricos.

Los parámetros del modelo se han seleccionado en función de las mediciones empíricas de los modelos que se habían desarrollado antes de este trabajo y los procedimientos de identificación apropiados. Los resultados de dicha simulación replican la respuesta dinámica actual de la configuración experimental del electrolizador autopresurizado. Este modelo se puede utilizar para mejorar el control de la productividad del gas en dichos ensamblajes, como plataforma de simulación validada y como fuente de modelos de or-

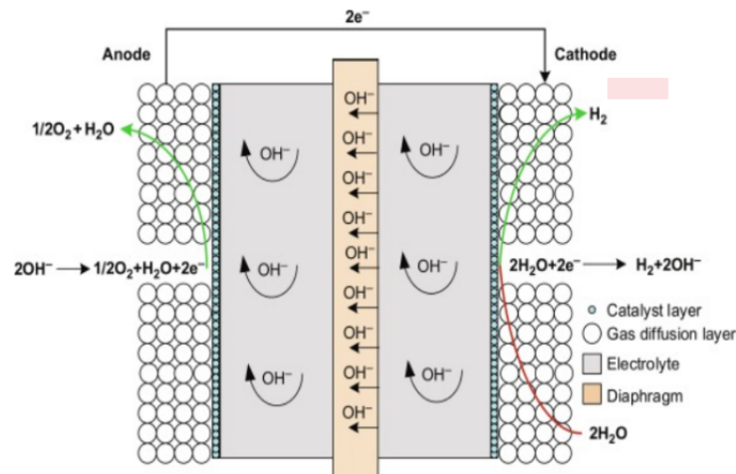


Figura 1.1: Membrana de intercambio de un electrolizador. Tomado de Dincer and AlZahrani (2018).

den reducido para el diseño de control basado en modelos.

A continuación, este trabajo propondrá una estrategia de control para atenuar la contaminación cruzada de  $\text{H}_2$  y  $\text{O}_2$  en electrolizadores alcalinos de alta presión, y así mejorar la pureza del suministro de gas. Esta estrategia está basada en un Control Predictivo basado en Modelo (MPC, siglas en inglés) para reducir la difusión de gas a través de la membrana 1.1. El controlador determina la apertura de las dos válvulas de salida en función de la presión del tanque de hidrógeno y la diferencia de nivel de líquido entre las dos cámaras de separación y, además, monitoriza las entradas de corriente eléctrica y presión del tanque de hidrógeno que se tomarán como perturbaciones en el control.

Por tanto, se diseñará un controlador con múltiples entradas y salidas. Para llevarlo a cabo, se hará uso del modelo de alta fidelidad creado por (David, 2021) para obtener un modelo orientado al control, y se evaluará el controlador propuesto en simulaciones utilizando como planta un modelo lineal de alta fidelidad sobre un rango de operación, que deberá resultar un valor menor al 1 % de impurezas en el gas.

El propósito de este trabajo será investigar un método eficiente para controlar la producción limpia de hidrógeno. Dado que con anterioridad a este trabajo se ha adquirido experiencia con el desarrollo de modelos físicos que permitan tener un conocimiento profundo de los procesos que ocurren en la electrólisis alcalina a alta presión, este trabajo buscará invertir ese conocimiento en el desarrollo de controladores predictivos en un sistema complejo.

De esta forma, como se verá en el Capítulo 3, se aportará información a un vacío en el estado del arte: implementar una estrategia de control multiobjetivo basada en el modelo obtenido y realizar comparaciones con otras ya comprobadas.



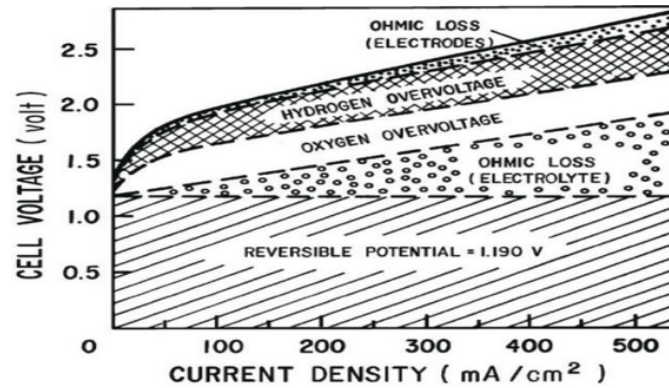
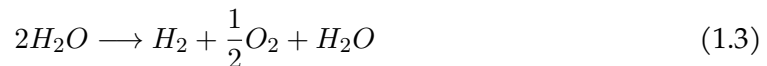
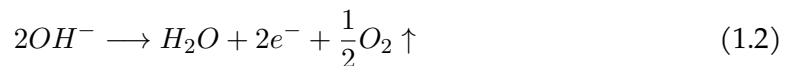
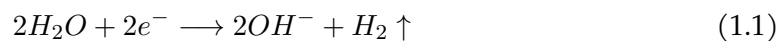


Figura 1.2: Distribución de célula de voltaje. Tomado de Abe (1991).

## 1.2. Estado del arte

### 1.2.1. El principio de la electrólisis

El principio de la electrólisis del agua es bastante sencillo (Abe, 1991). La aplicación de corriente continua al agua provoca la electrólisis, dividiendo el agua en hidrógeno y oxígeno mediante las reacciones que se muestran a continuación:



A través de estas reacciones, se descomponen dos moléculas de agua y el hidrógeno evoluciona en el cátodo. En el ánodo, el oxígeno evoluciona y al mismo tiempo se regenera una molécula de agua. Como resultado, una molécula de agua se descompone y otra molécula de agua se desplaza hacia el ánodo. Los electrolizadores de agua que se utilizan actualmente en la industria trabajan a una tensión de célula de 1,8 – 2,2 voltios, lo que corresponde a 4,3 – 5,3 kWh por Nm<sup>3</sup> de hidrógeno. Aquí, N significa "condición normal", es decir, el volumen a 0°C y 1 atmósfera de presión. La Figura 1.2 muestra un ejemplo de distribución de la tensión de la célula a su componente.

La reacción de descomposición del agua por electrólisis es una reacción endotérmica, en la que la energía correspondiente a  $\Delta G$  debe ser suministrada en forma de electricidad y el resto,  $T\Delta S$ , por calor. El cambio de entalpía,  $\Delta H$ , para electrolizar el agua se muestra como sigue:

$$\Delta H = \Delta G + T\Delta S. \quad (1.4)$$

El voltaje de la célula correspondiente a  $\Delta G$  es el voltaje reversible, unos 1,2 V, y  $T\Delta S$ , el potencial de absorción de calor, unos 0,28 V (Abe, 1991). En la electrólisis real, el voltaje de la célula es mayor que el potencial reversible y la diferencia se convierte en calor. A esta tensión de la célula, todo el calor generado por la sobretensión y las pérdidas óhmicas es utilizado por la reacción y no hay generación ni absorción de calor hacia y desde el exterior del sistema.

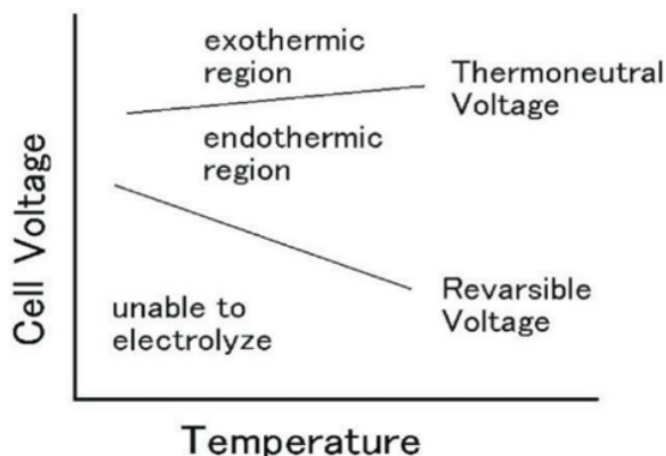


Figura 1.3: Cambio de célula de voltaje por la temperatura. Tomado de Abe (1991).

No es posible la electrólisis a la tensión de la célula bajo tensión reversible, pero sí es posible, al menos teóricamente, la electrólisis del agua bajo tensión termoneutral. La electrólisis de vapor a alta temperatura utiliza este principio y, al suministrar parte de la energía con calor, reduce la tensión de la célula. En cuanto a la electrólisis del agua alcalina, no es práctico esperar que un electrolizador funcione por debajo de la tensión termoneutral. La tensión termoneutral es muy importante en el diseño de los electrolizadores, ya que toda la electricidad suministrada más allá de este punto se convierte en calor, que debe ser eliminado para mantener la temperatura de las células. La Figura 1.3 muestra la variación de estas tensiones en función de la temperatura.

En la electrólisis del agua, el rendimiento de la corriente suele ser muy alto, más del 95 %, y por lo que la eficiencia energética es casi igual a la eficiencia de la tensión.

### Electrólisis del agua alcalina

La Electrólisis del Agua Alcalina (AWE, siglas en inglés) es un método maduro y sencillo. Los mayores electrolizadores son de este tipo y tienen el mayor alcance comercial (Dincer and Acar, 2014). La célula consiste en un par de electrodos separados por un diafragma que se llena con una solución alcalina, normalmente hidróxido de potasio, en una concentración entre el 25 y el 30 %. El agua se divide en el cátodo para formar  $H_2$  y liberar aniones de hidróxido ( $OH^-$ ) que atraviesan el diafragma y se combinan para formar  $O_2$  en el ánodo.

Comúnmente, hay una convección natural o forzada a través del sistema que separa los gases producidos de la solución. En los electrolizadores comerciales, la temperatura es inferior a  $80\text{ }^\circ\text{C}$  y están diseñados para una presión de hasta 30 bar, a pesar de que algunas líneas de investigación están orientadas a aumentarla.

En las últimas décadas se han producido avances en electrolizadores denominados electrolizadores alcalinos avanzados. Los puntos más importantes del desarrollo son:

1. **Configuración de brecha cero.** Consiste en minimizar la distancia entre electrodos

para reducir las pérdidas óhmicas.

2. **Nuevos materiales para el diafragma.** Anteriormente hechas de amianto, se investiga el uso de membranas inorgánicas. Algunas se basan en poliácido de antimonio impregnado con polímeros (H. Vandenborre and Baetsle (1980)), en un compuesto poroso formado por una matriz de polisulfona y  $ZrO_2$  (P. Vermeiren and Leysen (1998)), o sobre sulfuro de polifenilo (K. Rajeshwar and Licht (2008)).
3. **Aumento de la temperatura.** La temperatura se aumenta para promover la conductividad electrolítica y mejorar la cinética de reacción en los electrodos
4. **Materiales electrocatalíticos.** Estos materiales se desarrollan para reducir los sobrepotenciales en los electrodos.

Los electrolizadores de agua alcalina se diseñan y fabrican para una amplia gama de aplicaciones. Las principales industrias consumidoras de hidrógeno son:

- La refrigeración de generadores de energía eléctrica en centrales eléctricas.
- La industria de los semiconductores.
- Los ordenadores de pantalla plana y las unidades de producción de pantallas de televisión.
- Las plantas de vidrio y las industrias metalúrgicas.
- Otras aplicaciones industriales como el procesamiento de alimentos, las aplicaciones de laboratorio, los tratamientos térmicos, la meteorología y las industrias de soldadura.

La electrólisis de agua alcalina es una tecnología madura. Se han instalado muchos electrolizadores industriales capaces de suministrar hasta  $650 m^3$  de  $H_2/h$  para diferentes usos finales. El hidrógeno como portador de energía abre el camino a nuevas aplicaciones como la gestión de redes inteligentes para una mayor flexibilidad energética, el almacenamiento químico de energías renovables y las estaciones de repostaje de hidrógeno para vehículos con pilas de combustible.

Desde un punto de vista económico, la vida útil de estos sistemas, del orden de varias decenas de miles de horas, puede considerarse satisfactoria para un funcionamiento continuo. No obstante, las células de electrolizadores alcalinos apenas pueden funcionar con densidades de corriente muy bajas. Esto supone un límite en cuanto a la flexibilidad en el funcionamiento en función de la carga, que será necesaria para el funcionamiento con fuentes de energía renovables.

Desde el punto de vista de los materiales, los principales esfuerzos de investigación se centran en el desarrollo de diafragmas avanzados con material de electrodo adaptado. La mayoría de los diafragmas eficientes utilizados están hechos de amianto, que no está permitido en muchos países debido a que tiene partículas nocivas para el ser humano. Se ha propuesto la sustitución del amianto por materiales compuestos de cerámica y polímero, pero todavía hay margen de mejora (J. Divisek and Schmitz (1985)). También es necesario mejorar los electrocatalizadores. Se ha intentado desarrollar nuevos electrocatalizadores

y se han estudiado las propiedades electrocatalíticas de algunos macrociclos de metales de transición.

Desde el punto de vista del rendimiento, se pueden obtener mayores eficiencias empleando electrolizadores alcalinos avanzados. A lo largo de las últimas décadas se han desarrollado prototipos construidos para suministrar hasta  $25 \text{ m}^3$  de  $\text{H}_2/\text{h}$ . Dichas unidades se han diseñado para funcionar con altas densidades de corriente ( $1,25 \text{ A}/\text{cm}^2$ ), a  $393 \text{ K}$  y con una presión de funcionamiento de 25-40 bares. El consumo de energía eléctrica es de  $3,81 \text{ kWh}/\text{m}^3 \text{ H}_2$  a  $363 \text{ K}$  y algo menor,  $3,65 \text{ kWh}/\text{m}^3 \text{ H}_2$  a  $393 \text{ K}$ .

### **Electrólisis a alta temperatura y presión**

En la actualidad, los electrolizadores están diseñados para un funcionamiento estacionario. A su vez, existen electrolizadores que producen gases a presión atmosférica o hasta 30 bares. Por tanto, se necesitan etapas de compresión para el almacenamiento a las altas presiones. Frente a esto, las opiniones se dividen entre los que proponen diseñar electrolizadores que produzcan directamente los gases con mayor presión (K. Onda and Ito (2004)), (C. Ziems and Krautz (2012)) y los que aseguran que esto supone una pérdida de eficiencia (A. Roy and Infield (2006)).

En el último grupo se encuentran aquellos reportados por (A. Roy and Infield (2006)), que consideran en su análisis el consumo de energía en los equipos auxiliares y la pérdida de gas durante la operación para concluir que los electrolizadores atmosféricos son más eficientes en comparación con los electrolizadores que operan a presiones de hasta 700 bar. El porcentaje de aumento de la energía consumida alcanza el 16 hasta el 66 % a 700 bar, según los cálculos de los autores. Al mismo tiempo, consideran que la corrosión, la fragilidad del hidrógeno, la complejidad de la operación, la respuesta dinámica y los costes, hacen que los electrolizadores presurizados sean menos favorables.

Por el contrario, el primer grupo afirma que la energía necesaria para comprimir los gases crece más que la energía teórica de disociación del agua. Incluso hay proyectos que intentan demostrar con plantas piloto la factibilidad de tal solución, como el caso de la Universidad Tecnológica de Brandemburgo Cottbus (C. Ziems and Krautz, 2012). En la presentación del proyecto, definen las perspectivas de la tecnología de la electrólisis alcalina, como se muestra en la Figura 1.4.

Dawood et al. (2020) aseguran haber conseguido mejorar la eficiencia de los sistemas alcalinos con un estado de funcionamiento de 240 y 37 bar. A su vez, proponen un nuevo diseño con electrolito dentro de una estructura porosa que permite densidades de corriente de hasta  $2 \text{ A}/\text{cm}^2$  y tensiones que no superan los  $1,75 \text{ V}$  (valor típico en los equipos comerciales). Por otro lado, en el análisis de costes se obtienen precios competitivos al no utilizar metales preciosos.

Ganley (2009) también experimentó con celdas electrolíticas de alta presión y temperatura hasta 87 bar y  $400 \text{ }^\circ\text{C}$ . Los resultados fueron prometedores dado que la tensión aplicada se reduce drásticamente. Sin embargo, el autor plantea objeciones sobre estos resultados debido a la posible mezcla de productos y a la corrosión de los electrodos que podrían haber distorsionado los valores mencionados.

Dicho esto, es necesario diseñar nuevos experimentos que permitan explicar los fenómenos observados. Y, en conclusión, es teóricamente posible aumentar la eficiencia del sistema incrementando la presión y la temperatura, pero aún quedan cuestiones técnicas por resolver, entre las que destacan la contaminación cruzada de gases y la estabilidad de los materiales, respectivamente.

### Impacto de la fluctuación de la entrada eléctrica

El estudio de la respuesta a las corrientes de entrada variables es de gran interés dada la atención que suscita la interconexión de los electrolizadores con las energías renovables. Cuanto más directa sea la conexión entre ellas, mayor será la eficiencia que se consiga en el almacenamiento de energía en forma de hidrógeno. Si bien existen ciertas investigaciones que estudian la respuesta de los electrolizadores al cambio en el suministro de energía, como una interrupción completa o un impulso (Mazloomi et al., 2013), (Shaaban, 1994), (N. Shimizu and Oda, 2006), (M. Vanags and Bajars, 2012), no hay mucha información al respecto (Mazloomi and Sulaiman, 2012).

Dobó and Palotás (2016, 2017) desarrollaron una serie de experimentos para caracterizar la respuesta de una celda electrolítica alcalina a las fluctuaciones de tensión y corriente. La célula electrolítica consistía en un recipiente cerrado lleno de una solución de hidróxido de potasio al 30 % en peso con electrodos planos de acero inoxidable.

En el primer caso, la célula se alimentó con una señal de tensión sinusoidal con amplitud  $a$  y frecuencia  $f$  montada en una  $U_{DC}$  de tensión continua. Con una amplitud entre 0 y 2 V, una frecuencia entre 1 Hz y 5000 Hz y una tensión continua entre 1,4 V y 2,8 V, se realizaron, 6512 experimentos de 15 s de duración. En cada caso se calculó la potencia eléctrica entregada y los gases producidos, los segundos en función del cambio de presión en la célula. Los resultados obtenidos muestran que a mayor amplitud  $a$  y frecuencia  $f$ , la eficiencia de la celda disminuye. Se obtiene una degradación de la eficiencia con respecto a la correspondiente al funcionamiento en corriente continua de hasta un 20 %. Sin embargo, hay zonas de trabajo en las que las caídas de eficiencia debidas a la fluctuación de la entrada. Se concluye que es posible aceptar la fluctuación en la tensión, pero se recomienda suavizar el rizado para obtener mejores resultados.

En el segundo caso, se alimentó la célula con varias formas de onda de corriente (sinusoidal, triangular, diente de sierra y cuadrada) caracterizadas por la corriente continua  $I_{DC}$ , el valor cuadrático medio (rms)  $I_{rms}$  y la frecuencia  $f$ . A su vez, se define un factor de ondulación  $r$  como la relación entre el valor rms de la componente alterna  $I_{rms}$  y el valor continuo  $I_{DC}$ , comparando así las diferentes formas de onda. Se realizaron más de 4600 experimentos en un rango de 1 a 10000 Hz de frecuencia, 1 a 5 kAm<sup>2</sup> de corriente continua y 0 Am<sup>2</sup> a  $I_{DC}$ . De los resultados se puede concluir que el aumento de la corriente continua genera una disminución de la eficiencia. Además, hay una disminución de la eficiencia con un mayor factor de rizado (por ejemplo, para  $f = 1$  kHz y  $I_{DC} = 4$ kAm<sup>2</sup>, la eficiencia disminuye un 16 % cuando el factor de rizado pasa de  $r = 0$  % a  $r = 100$  %). Esto se debe a que la producción de gases podría considerarse directamente relacionada con el  $I_{DC}$  y la componente alterna sólo eleva la potencia demandada para el mismo  $I_{DC}$ . A pesar de tener una menor participación, un aumento de la frecuencia puede mejorar la eficiencia (por ejemplo, para un  $I_{DC} = 2$ kAm<sup>2</sup> y  $r = 100$  %, la eficiencia es del 48,5 % para el caso continuo y es del 50 % para  $f = 10$ kHz).

| Composition formula                                  | Method                | T (°C) | Electrolyte | C (mol dm <sup>-3</sup> ) | j (Am <sup>-2</sup> ) | $\eta_{oxygen}$ (mV) |
|--|-----------------------|--------|-------------|---------------------------|-----------------------|----------------------|
| Ni+Spinel type Co <sub>3</sub> O <sub>4</sub>        | Thermo-decomposition  | 25     | KOH         | 1                         | 1000                  | 235 ± 7              |
| Ni+La doped Co <sub>3</sub> O <sub>4</sub>           | Thermo-decomposition  | 25     | KOH         | 1                         | 1000                  | 224 ± 8              |
| MnOx modified Au                                     | Electro-deposition    | 25     | KOH         | 0.5                       | 100                   | 300                  |
| Li10% doped Co <sub>3</sub> O <sub>4</sub>           | Spray pyrolysis       | RT     | KOH         | 1                         | 10                    | 550                  |
| Ni   | N/A                   | 90     | KOH         | 50 wt%                    | 1000                  | 300                  |
| La <sub>0.5</sub> Sr <sub>0.5</sub> CoO <sub>3</sub> | Spray-stiner          | 90     | KOH         | 50 wt%                    | 1000                  | 250                  |
| Ni <sub>0.2</sub> Co <sub>0.8</sub> LaO <sub>3</sub> | Plasma jet projection | 90     | KOH         | 50 wt%                    | 1000                  | 270                  |

Figura 1.4: Sobrepotencial de oxígeno de diferentes materiales de electrodos. Tomado de David (2021).

| Composition formula   | Method             | T (°C) | Electrolyte | C (mol dm <sup>-3</sup> ) | j (Am <sup>-2</sup> ) | $\eta_{hydrogen}$ (mV) |
|---|--------------------|--------|-------------|---------------------------|-----------------------|------------------------|
| Ni-Fe-Mo-Zn   | Co-deposition      | 80     | KOH         | 6                         | 1350                  | 83                     |
| Ni-S-Co   | Electro-deposition | 80     | NaOH        | 28 wt%                    | 1500                  | 70                     |
| Ni50%-Zn  | Electro-deposition | N/A    | NaOH        | 6.25                      | 1000                  | 168                    |
| MnNi <sub>3.6</sub> Co <sub>0.75</sub> Mn <sub>0.4</sub> Al <sub>0.27</sub> | Arc melting        | 70     | KOH         | 30 wt%                    | 1000                  | 39                     |
| Ti <sub>2</sub> Ni  | Arc melting        | 70     | KOH         | 30 wt%                    | 1000                  | 16                     |
| Ni50%Al   | Melting            | 25     | NaOH        | 1                         | 1000                  | 114                    |
| Ni75%Mo25%  | Co-deposition      | 80     | KOH         | 6                         | 3000                  | 185                    |
| Ni80%Fe18%  | Co-deposition      | 80     | KOH         | 6                         | 3000                  | 270                    |
| Ni73%W25%   | Co-deposition      | 80     | KOH         | 6                         | 3000                  | 280                    |
| Ni60%Zn40%  | Co-deposition      | 80     | KOH         | 6                         | 3000                  | 225                    |
| Ni90%Cr10%  | Co-deposition      | 80     | KOH         | 6                         | 3000                  | 445                    |

Figura 1.5: Sobrepotencial de hidrógeno de diferentes materiales de electrodos. Tomado de David (2021).

### Dependencia de la pureza del gas

Para estudiar el cambio en la concentración volumétrica de H<sub>2</sub> en O<sub>2</sub>, P. Haug and Turek (2017) realizaron un conjunto de experimentos siguiendo las tendencias en las características de funcionamiento:

1. Una disminución del caudal de recirculación del electrolito genera menos impurezas.
2. Un aumento de la concentración de electrolito reduce el contenido de hidrógeno en el oxígeno.
3. Un aumento de la temperatura del electrolito permite reducir las impurezas.

Cabe señalar que estas tendencias también están relacionadas con otras características, como las propiedades de los materiales o los sobrepotenciales óhmicos (Figuras 1.4 y 1.5).

Otra idea investigada es conocer el cambio de las impurezas con tres configuraciones del circuito. La primera y tradicional es la mezcla de los circuitos de recirculación del electrolito a la celda y la interconexión de ambos separadores de gas (mixtos). La segunda es la independencia de las recirculaciones y los separadores de gas, mientras que la tercera mantiene los circuitos de recirculación separados, pero permite la interconexión de los separadores de gas (parcialmente separados). Se observa que hay una mejora en la pureza cuando se pasa a circuitos de recirculación separados, mientras que no es considerable cuando los separadores de gas son independientes. Sin embargo, la separación

de los circuitos de recirculación no permite igualar las concentraciones de Hidróxido de Potasio (KOH, siglas en inglés) necesarias para el adecuado funcionamiento de la célula. Por ello, se proponen soluciones que mejoran la pureza:

1. Método parcialmente separado a bajas densidades de corriente (cuando las impurezas son mayores) y cambio a método mixto cuando se alcanzan las altas densidades de corriente.
2. Ciclos de periodos del orden de media hora entre los métodos parcialmente separado y mixto para conseguir una mejora de la pureza respecto al método tradicional.
3. Separadores mejorados.

Actualmente, el material Zirfon PERL se utiliza ampliamente como separador en los electrolizadores comerciales de agua alcalina. Este material está compuesto por un 85 % de nanopartículas de óxido de circonio y un 15 % de polisulfona (PSU). Tiene una estabilidad aceptable en solución de KOH hasta 80 °C, una presión de punto de burbuja alta (hasta 2 bar) y una resistencia de área baja (menos de 0,3  $\Omega\text{cm}^2$ ). Otros compuestos como los basados en PSU [6], poliéter-éter-cetona sulfonado (SPEEK) (Kerres et al., 1996) y separadores de barita/PSU (C. Ziems and Krautz, 2012).

El principal reto de la AWE es la interconexión con fuentes renovables fluctuantes debido a su mínima carga parcial (normalmente entre el 10 % y el 40 %) (Otero et al., 2014). Al disminuir la densidad de corriente, la concentración de anolito de hidrógeno aumenta debido al cruce de  $H_2$  disuelto a través del separador. Este efecto se magnifica con las altas presiones. Por lo tanto, la mejora del material de los separadores ayudará a mejorar el rendimiento, la pureza y la presión de los electrolizadores alcalinos. Últimamente, (Lee et al., 2020) han sintetizado separadores de  $ZrO_2$ /PSU con diferentes proporciones de óxido de circonio y los han comparado teniendo en cuenta la resistencia iónica, la presión del punto de burbuja y la permeabilidad al  $H_2$ . Concluyen que el separador con un 75 % de  $ZrO_2$  tiene mejores resultados debido al pequeño tamaño de poro conseguido (70 nm).

### 1.2.2. Producción de hidrógeno mediante electrólisis alcalina

En este apartado, se ofrece una visión general de las tecnologías de producción de hidrógeno, haciendo hincapié en la producción a partir de la electrólisis alcalina.

La electrólisis del agua desempeñará un papel importante a corto y medio plazo. Además, la electrólisis ocupa hasta hoy una posición dominante al ser la única tecnología que puede utilizar directamente los excedentes de energía renovable y fluctuante como los molinos de viento o los paneles solares (F. Zhang and Maddy, 2016) por lo que tiene una perspectiva concreta en el uso de este tipo de energía como eje de la economía del hidrógeno. Entre la producción de  $H_2$  neutro en  $CO_2$ , la electrólisis destaca porque produce hidrógeno de alta pureza y cuenta con una infraestructura ya desarrollada al ser una tecnología bien establecida (Nikolaidis and Poullikkas, 2017), (Ursúa, 2012). En la misma dirección, la electrólisis alcalina es una tecnología madura y fiable que destaca de otros tipos de electrólisis por su coste y simplicidad (Schmidt et al., 2017).

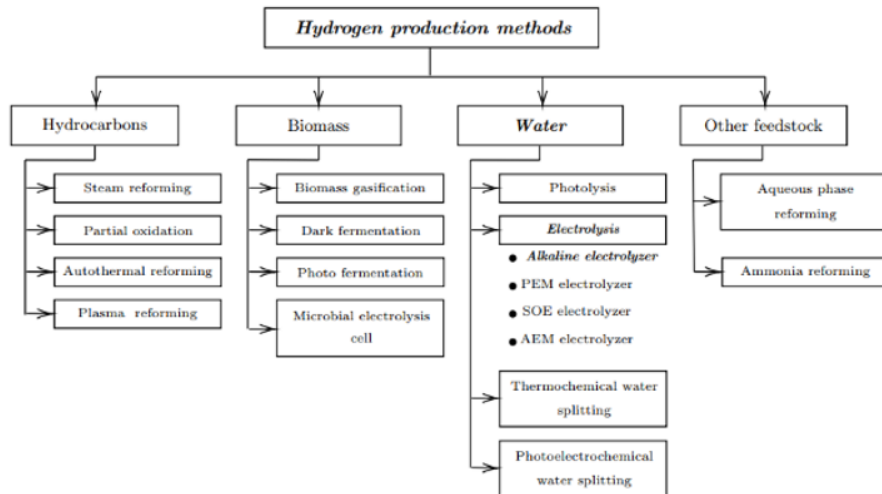


Figura 1.6: Taxonomía de la producción de hidrógeno con énfasis en el objetivo del presente trabajo. Tomado de David (2021).

### 1.2.3. Perspectiva de la economía del hidrógeno

Se pueden encontrar varias revisiones que presentan las diferentes tecnologías relacionadas con el uso del hidrógeno.

Abdalla et al. (2018) publicó una revisión de las tecnologías del hidrógeno en la que explican detalladamente y comparan los principales métodos de almacenamiento actuales. (F. Zhang and Maddy, 2016) presenta un compendio breve y bien organizado de las tecnologías de producción, almacenamiento y generación de electricidad. (Dutta, 2014) resume los modelos de desarrollo de la economía del hidrógeno en varios países junto con una explicación de la producción, el almacenamiento y la utilización del hidrógeno. (Mazloomi and Gomes, 2012) analizan los aspectos económicos de la producción centralizada y distribuida. Además, presentan los riesgos inherentes a las etapas de producción, almacenamiento y distribución, proponiendo posibles técnicas de reducción de riesgos.

Al mismo tiempo, hay estudios como el de (Yanes, 2009) que detallan los pasos a seguir para alcanzar una economía del hidrógeno madura. Entre esos pasos están (Gahleitner, 2013) y (Schiebahn et al., 2015), el uso de hidrógeno fósil para alimentar vehículos (Mahlia et al., 2014), (Ball and Weeda, 2015), (HyUnder, 2014) y (Mazloomi et al., 2014) y la integración de electrolizadores con energías renovables en microrredes (M. L. Arlt and Weng, 2017) y (Ganeshan et al., 2017). Todos estos desarrollos hacen que las tecnologías del hidrógeno tengan en cuenta las cuestiones económicas necesarias para que sea sostenible en el tiempo. Para ello, será necesario que las empresas, los gobiernos y los centros de investigación cooperen juntos en esta dirección Ball and Weeda (2015).

### 1.2.4. Revisión de la literatura sobre modelización y control

#### Modelos de electrólisis alcalina

Aunque ha sido estudiado el principio de funcionamiento de las pilas alcalinas, se ha descrito ampliamente por varios autores, la mayoría de ellos se han centrado en el régimen



estacionario y han presentado relaciones analíticas empíricas relaciones a partir del ajuste de un electrolizador específico. La mayoría de los modelos se centran sólo en la descripción de la pila, pero no en el sistema completo (Hammoudi et al., 2012), (Haug et al., 2017), (Milewski et al., 2014). Además, la mayoría de ellos describen el régimen estacionario y se construyen a partir de ecuaciones empíricas (E. Amores and Carreras, 2014), (Hug et al., 1993), (Ulleberg, 2003). Recientemente, (Sánchez et al., 2020) utilizaron un software comercial para modelar todo el sistema, mientras que la pila de células se describe mediante un enfoque semi-empírico. Otro ejemplo reciente de modelo dinámico es el desarrollado por (Lee et al., 2021). Presentan un modelo numérico transitorio tridimensional para la pila alcalina, considerando las reacciones electroquímicas y los procesos de transporte dentro de una configuración de brecha cero.

A continuación, se desarrollarán los puntos más importantes de los modelos existentes en la literatura, se desarrollarán los puntos más importantes de los modelos existentes en la literatura.

### Reacciones electroquímicas

En 2003, (Ulleberg, 2003) propuso un modelo basado en conceptos termodinámicos y de transferencia de calor para obtener la tensión del paquete, el flujo de gas producido y el equilibrio térmico del sistema, todo ello en función de la corriente impuesta. Estos resultados se validaron en la planta PHOEBUS de Jülich, donde se realizaron pruebas de células fotovoltaicas, producción y almacenamiento de hidrógeno (Vivas et al., 2018).

### Contaminación del gas

La principal dificultad en el funcionamiento de un electrolizador alcalino es la contaminación de ambas corrientes, especialmente en el lado del  $O_2$ . Generalmente, este concepto se aborda en los modelos como una ecuación empírica que relaciona la contaminación con el estado del sistema (por ejemplo, densidad de corriente, temperatura, presión). Esta forma evidencia la falta de análisis dinámico de la pureza. Se pueden encontrar ajustes empíricos, como es el caso del trabajo realizado por (Hug et al., 1993). Este trabajo es considerado por (Sánchez et al., 2018) para ejecutar un modelo semi-empírico para un electrolizador de 15kW. Además, en el Instituto Max Planck para la Investigación del Hierro existen estudios sobre modelos físicos de la difusión de los gases y de las propiedades de la membrana que separa las medias celdas (Sánchez et al., 2013), (Schalenbach et al., 2016a). Sin embargo, no se ha encontrado hasta ahora en la literatura un modelo que integre los comportamientos de las células y los fenómenos de transporte que tienen lugar en el conjunto. Además, existen estudios que analizan la fenomenología del proceso de contaminación como (Schalenbach et al., 2018).

Hay dos fuerzas motrices para la permeación cruzada del gas a través de la membrana. La primera es la difusión impulsada por las diferencias en la concentración de gas disuelto entre las dos medias celdas (Schalenbach et al., 2016b). La segunda causa de la contaminación cruzada es la permeabilidad del electrolito con los gases disueltos debido a la presión diferencial entre ambas medias celdas.

Para llenar este vacío, se propuso un Modelo Semi-físico de Base Fenomenológica (PBSM,

siglas en inglés) (David, 2021) que se alimenta de la modelización previa y de la experiencia acumulada, y que describe los fenómenos que ocurren dentro del electrolizador. La disponibilidad de este modelo permitirá tener una idea más precisa de la dinámica e incluso marcará pautas para la mejora del diseño en futuros prototipos. El enfoque basado en la fenomenología ofrece además la posibilidad de perfeccionar el modelo mediante el uso de mejores formulaciones para calcular los parámetros de este. Este modelo validado experimentalmente también puede utilizarse como fuente de modelos reducidos con una finalidad orientada al control.

### **Revisión de las estrategias de control de los electrolizadores alcalinos**

Al igual que ocurre con la modelización, tras una revisión exhaustiva de la bibliografía relacionada y también a partir de las conclusiones recogidas por (P. Olivier and Bouamama, 2017), el diseño de controladores para gestionar el funcionamiento de los electrolizadores teniendo en cuenta las cuestiones mencionadas anteriormente parece no estar abordado todavía. Por lo tanto, el desarrollo de modelos de entrada-salida útiles para el diseño de control es un tema de investigación que ha estado abierto durante muchos años (P. Olivier and Bouamama, 2017). En general, los objetivos de control se centran completamente en la gestión del electrolizador como consumidor y productor eléctrico de  $H_2$  conectado a una red (Gahleitner, 2013), (F. Vivas et al., 2018).

La gestión de las válvulas de salida adquiere un gran interés en este trabajo. Sin embargo, su control sólo se ha podido encontrar mencionado por (Schug, 1998) en su descripción de una planta piloto, en el modelo presentado por (Sánchez et al., 2018) y recientemente en (David, 2021). Schug, en su trabajo, describió en detalle un electrolizador alcalino junto con resultados experimentales. Lamentablemente, el sistema de control no es lo suficientemente detallado, pero la conexión de la salida de la planta con la acción de control puede reconocerse en el diagrama de flujo simplificado. Asimismo, Sánchez et al. explicaron brevemente el esquema de control en el que un regulador de contrapresión mantiene la presión del sistema, mientras que un conjunto de electroválvulas controla la diferencia de nivel.

Por último, (David, 2021) a partir de un modelo no lineal bien establecido que considera la dinámica y la fenomenología precisa de los electrolizadores alcalinos y que fue reportado en (David et al., 2019, 2020), obtiene un modelo de orden reducido orientado al control y valida adecuadamente utilizando el modelo no lineal completo (que, a su vez, se valida con datos reales). Luego, diseña un controlador óptimo y evalúa el rendimiento en lazo cerrado del sistema basado en la maximización de la pureza del hidrógeno mediante la mitigación de la contaminación cruzada de gases en las cámaras.

#### **1.2.5. Descripción del sistema**

Como se ha mencionado anteriormente, una solución propuesta para el almacenamiento de energía es la combinación de un electrolizador, tanques de almacenamiento y una pila de combustible. De este modo, la energía eléctrica adicional se emplea para producir hidrógeno. Cuando las fuentes de energía renovables no son capaces de satisfacer la demanda, el hidrógeno almacenado es consumido por la pila de combustible.

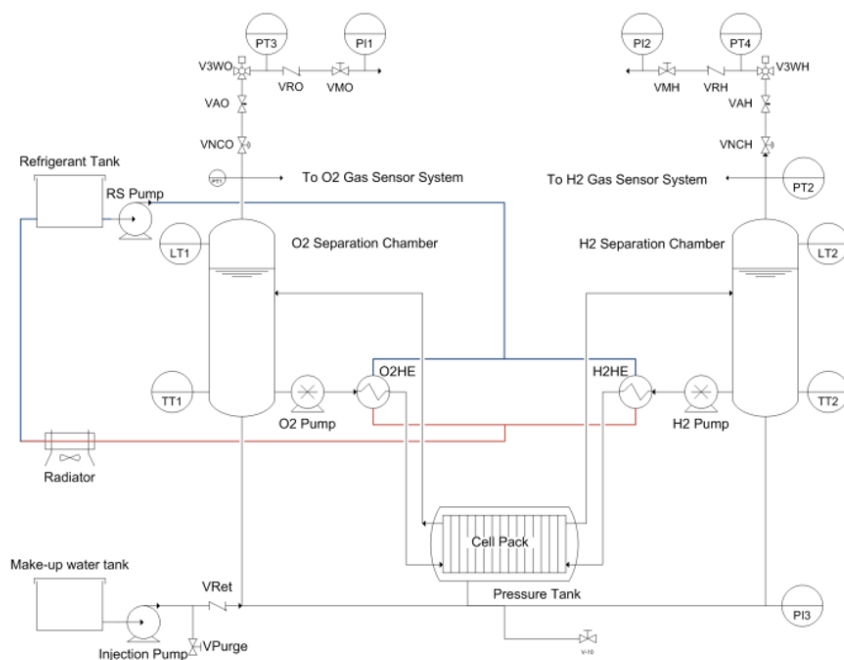


Figura 1.7: Diagrama de flujo del proceso del electrolizador del laboratorio de hidrógeno (EHL). Los Indicadores y Transmisores se incluyen sin lazos de control. Tomado de David (2021).

Los electrolizadores alcalinos de alta presión pueden suministrar gases a una presión de almacenamiento, prescindiendo del uso de compresores. Sin embargo, la contaminación cruzada, es decir, la concentración de  $O_2$  en la corriente de  $H_2$  y viceversa, aumenta con la presión, por lo que se requiere una atención especial en el funcionamiento por cuestiones de seguridad y calidad. En la Figura 1.7 se puede ver el esquema del Electrolizador del Laboratorio de Hidrógeno (EHL, siglas en inglés), que está compuesto por varios subsistemas que se explicarán y detallarán más adelante.

### Paquete de células

La parte principal del EHL es el Paquete de Células (CP, siglas en inglés) que consta de quince celdas electrolíticas individuales de tipo alcalino conectadas en serie, como puede verse en la Figura 1.8, cada una de las cuales está formada por dos medias celdas: una productora de  $O_2$  y otra de  $H_2$ . La célula electrolítica está separada en dos semicélulas mediante una membrana que impide la mezcla de los gases producidos. Esta membrana es un material compuesto por un polímero (polisulfona) y una cerámica porosa (Zirconia  $ZnO_2$ ), denominada Zirfon PERL. Las características que se buscan en esta membrana son:

- Porosidad y alta humectabilidad (alta conductividad iónica debido a la adecuada circulación del OH).
- Poros pequeños (baja permeabilidad al gas).
- Elevada resistencia eléctrica (bajas corrientes parásitas).

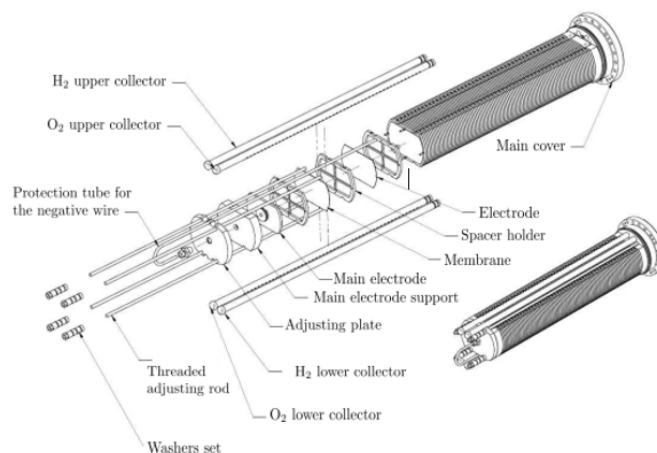


Figura 1.8: Despiece del conjunto del paquete celular. Tomado de Dincer and AlZahrani (2018).

- Materiales delgados (bajo flujo óhmico debido a la conducción iónica).
- Fracción volumétrica de poros elevada (alta conductividad iónica).
- Flexibilidad, estabilidad mecánica y durabilidad química.

Los electrodos son láminas de níquel que actúan como cátodos para una célula y ánodos para la siguiente. La distancia entre cátodo y ánodo es de aproximadamente 2 cm. La célula se inunda con una solución de hidróxido de potasio (KOH) al 30 % (donde se obtiene la mayor conductividad iónica), que es la que proporciona los aniones OH necesarios para facilitar la reacción. Finalmente, para extraer los gases producidos de la célula (para mejorar la eficiencia eléctrica y reducir la contaminación cruzada) es necesario recircular la solución de KOH. Por lo tanto, se introduce en la parte inferior de la célula para arrastrar las burbujas hacia la parte superior. En los electrolizadores que funcionan a baja presión, este proceso se produce por convección, mientras que para las altas presiones es necesario generar la recirculación.

La velocidad de ascenso de las burbujas es una variable que, como se ha indicado anteriormente, afecta a la contaminación y al rendimiento eléctrico.

### Cámaras de separación y tanque de presión

Del PC salen dos flujos de solución de KOH mezclados con burbujas de H<sub>2</sub> y O<sub>2</sub> que se vierten en el SC para que las burbujas se desprendan y se acumulen en la parte superior (Figura 1.9). Es a través de este movimiento de la solución que el gas, disuelto y en burbujas, producido en la semicelda, llega a la cámara de separación donde sale de la solución. En la SC el gas producido en su parte superior se acumula, aumentando así la presión total del sistema. Las líneas de salida (OL) de los gases están controladas por dos válvulas motorizadas que permiten definir una presión de funcionamiento del EHL.

Como se deduce de la Figura 1.9, el agua se produce en el ánodo, mientras que en el cátodo se consume, resultando un balance de consumo final de un mol de agua por cada

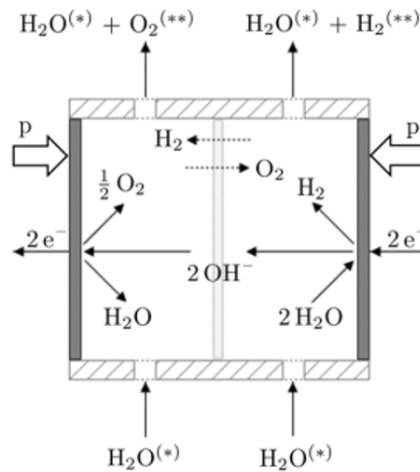


Figura 1.9: Esquema de la célula electrolítica con las reacciones  $H_2O^*$  representando la solución de KOH Y  $H_2^{**}$   $O_2^{**}$  representando las salidas contaminadas. Tomado de Dincer and AlZahrani (2018).

mol de  $H_2$  producido. Debido a esto, la concentración de soluto (KOH) en el ánodo disminuye y en el cátodo aumenta, lo que genera un aumento del potencial eléctrico y la consecuente disminución de la eficiencia eléctrica. Por ello, es necesario que ambos circuitos, actualmente independientes, tengan alguna conexión. Esto se consigue mediante la interconexión de los fondos del SC a través del Tanque de Presurizado (PT, siglas en inglés). Este dispositivo, además de permitir el flujo de agua desde el SCO hacia el SCH, permite minimizar los esfuerzos mecánicos del CP, ya que las presiones internas y externas son prácticamente iguales. En la parte inferior del Sistema de Refrigeración (CS, siglas en inglés) se instala una bomba (denominada bomba de recirculación) que impulsa la solución, ya libre de burbujas, hacia la parte inferior del CP, consiguiendo así la mencionada recirculación.

### Líneas de salida

Para mantener los niveles y la presión igualados en torno al punto de trabajo, la salida de los gases por la parte superior de los SC se controla mediante una válvula motorizada. Después de una electroválvula de seguridad normalmente cerrada se encuentra la válvula motorizada anteriormente nombrada. Se trata de una válvula de tres vías que permite la apertura a Vent o Tank. La primera salida se utiliza para operaciones intermedias como la Presurización y la Despresurización, momentos en los que la calidad de los gases producidos (pureza) es menor. Antes de la válvula de seguridad, hay una conexión con el sistema de medición de la pureza de los gases. Este toma una muestra de los gases de escape que pasan por una válvula reguladora de presión para alcanzar los valores de presión inferiores a 1 bar de manómetro que requiere el sensor. Este dispositivo mide la cantidad de  $O_2$  y  $H_2$  presente en las líneas de  $H_2$  y  $O_2$ , respectivamente.

| Variable                             | Description   | Sensor type              | Expected range | Device range | Units |
|--------------------------------------|---|--------------------------|----------------|--------------|-------|
| $I$                                  | Electric current                                      | Hall, Hass 100S          | 0-60           | 0-100        | A     |
| $U$                                  | Voltage   | Resistive divider        | 0-60           | -90-90       | V     |
| $T_{SCH}, T_{SCO}$                   | Temperature   | Pt100                    | 20-60          | -200-850     | °C    |
| $P_{SCH}, P_{SCO}, P_{OLH}, P_{OLO}$ | Pressure  | Transmitter membrane SML | 0-70           | 0-200        | bar   |
| $L_{SCH}, L_{SCO}$                   | Level   | Capacitive sensor        | 0-90           | 0-90         | mm    |
| $x_{H_2, O_2}$                       | H <sub>2</sub> concentration in O <sub>2</sub> stream | CiTiceL T3HYE            | 0-10000        | 0-30000      | ppm   |
| $x_{O_2, H_2}$                       | O <sub>2</sub> concentration in H <sub>2</sub> stream | CiTiceL T7OX-V           | 0-1            | 0-25         | %     |

Figura 1.10: Variables medidas presentes en EHL. Tomado de Dincer and AlZahrani (2018).

| Variable    | Description             | Actuator type | Range | Unit              |
|-------------|-------------------------|---------------|-------|-------------------|
| $u_{PWM}^1$ | Power source modulation | IGBT          | 0-100 | %                 |
| $u_{PS}$    | Power source activation | SSR           | 0/1   | ON/OFF            |
| $u_{RS}^2$  | Refrigeration system    | Relay         | 0/1   | ON/OFF            |
| $u_{IP}^2$  | Injection pump          | Relay         | 0/1   | ON/OFF            |
| $u_{RP}$    | Recirculation pump      | -             | -     | l h <sup>-1</sup> |

<sup>1</sup> Despite not being part of the equipment, the power delivered to the EHL can be regulated with a duty cycle control for direct current supply.

Figura 1.11: Actuadores de corriente en el EHL. Tomado de David (2021).

### Sistemas auxiliares

A la salida de las Bombas de Recirculación (RP, siglas en inglés) y antes de reingresar al PC, se encuentran dos intercambiadores de calor tubo-en-tubo en contracorriente con agua destilada enfriada posteriormente en un radiador con ventilador. Este sistema funciona de forma intermitente basándose en una ley de control de tipo histéresis. Además, en la tubería de bajada del SCO al PT, hay una entrada conectada a una válvula de retención que permite operar una Bomba de Inyección (PI, siglas en inglés) para inyectar agua destilada para reponer la que se consume en la reacción. Esta bomba también funciona de manera intermitente cuando se alcanza una combinación de niveles en ambos SC y se interrumpe frente a un determinado valor de nivel en cualquiera de ellos.

En la Figura 1.10 se resumen todas las mediciones realizadas actualmente en los equipos probados, mientras que en la Figura 1.11 se observan las salidas o acciones del sistema.

## 1.3. Objetivos

El objetivo general de este proyecto es diseñar un sistema de control predictivo para un electrolizador alcalino que asegure la pureza del hidrógeno controlando la presión y el nivel de líquido de los tanques y así evitar una contaminación cruzada.

Este objetivo general puede descomponerse en los siguientes objetivos específicos:

- Presentar un controlador basado en modelo lineal para una planta lineal con múltiples entradas y salidas con restricciones basadas en los resultados del trabajo donde se desarrolló el modelo del sistema electrolítico.
- Diseñar el controlador MPC para un modelo linealizado que garantice una generación de referencia adecuada para las señales de control más importantes del algo-

ritmo: la variación de presión y la variación de nivel entre los tanques.

- Plantear y resolver el problema de optimización multiobjetivo con restricciones para mejorar el rendimiento de los actuadores que controlan la entrada de gas en los tanques frente a perturbaciones en la corriente eléctrica y en la presión.
- Encontrar el horizonte de predicción y la sintonía en la función objetivo óptimos que mejor opere para el controlador diseñado de forma que se pueda reducir las variaciones en la presión y el nivel en el tanque de hidrógeno para que no haya contaminación cruzada.

## 1.4. Estructura

En esta sección, se presenta una introducción de todos los capítulos para facilitar la comprensión de la organización de este proyecto como sigue:

- **Capítulo 2 - Descripción del modelo**  
En el Capítulo 2, se explica el modelo semifísico de base fenomenológica basado en datos reales. También se explican los modelos reducidos y linealizados orientados al control que se desarrollaron en un trabajo previo a este.
- **Capítulo 3 – Control predictivo basado en modelo**  
En el Capítulo 3, se explica la teoría y metodología que se necesita para implementar un control predictivo en variables de estado discretas, definiendo también lo que significa un problema de optimización multiobjetivo.
- **Capítulo 4 – Diseño del controlador**  
En el capítulo 4 se desarrolla el controlador predictivo óptimo para el modelo de 14 estados lineal dado. Este controlador se diseña utilizando el modelo orientado al control presentado en el Capítulo 3 junto con una explicación detallada de todos sus objetivos y restricciones.
- **Capítulo 5 - Simulación y resultados**  
En el Capítulo 5, se presentan y discuten los resultados de las simulaciones para una perturbación de la corriente eléctrica manteniendo constante la perturbación de la presión y se presenta el análisis de su respuesta, determinando los beneficios de este tipo de controlador.
- **Capítulo 6 – Análisis económico**  
En el Capítulo 6, se presenta un desglose de los costes económicos de este proyecto, tanto de lo que supondría llevar a cabo este proyecto fuera de un entorno estudiantil, como del coste real que ha supuesto este proyecto.
- **Capítulo 7 – Impacto medioambiental**  
En el capítulo 7, se expone una explicación sobre las consecuencias que puede suponer el desarrollo de un sistema de electrólisis alcalina para la producción de hidrógeno.
- **Capítulo 8 - Conclusiones y trabajo futuro**  
En el capítulo 8 se explican detalladamente las principales contribuciones que los

resultados de este proyecto aportan a la mejora del funcionamiento del sistema electrolítico y a la producción de hidrógeno, junto con un resumen de las tareas que se han realizado y otras que se pueden seguir realizando.



## Capítulo 2

# Descripción del modelo

### 2.1. Descripción del proceso y objetivo del modelo

Se presenta un modelo semifísico de base fenomenológica (PBSM) de un electrolizador alcalino auto presurizado construido para la obtención de hidrógeno de alta pureza. El modelo, basado en balances de masa y energía, representa el comportamiento dinámico de la producción de hidrógeno y oxígeno mediante electrólisis. La Figura 1.8 muestra un esquema del electrolizador del Laboratorio de Hidrógeno (ELH).

El modelo permite anticipar variables operativas como las respuestas dinámicas en las concentraciones de la celda electrolítica, y las variaciones, tanto de nivel como de presión, en las cámaras de separación de gases debido al cambio de la corriente eléctrica. Los parámetros del modelo se han ajustado basados en mediciones experimentales tomadas de un prototipo disponible y mediante un proceso de identificación adecuado. Los elementos inherentes a este tipo de metodología de modelización proporcionan información adicional sobre los fenómenos que tienen lugar en el mismo.

Los electrolizadores producen normalmente hidrógeno con una alta pureza, superior al 99 %. En el caso de los electrolizadores de alta presión, este valor desciende a presiones más elevadas. Los electrolizadores comerciales soportan presiones de hasta 30 bar. Sin embargo, este prototipo fue diseñado para 200 bar y se ha probado hasta 70 bar. En ese caso, la pureza del  $O_2$  que es siempre el valor más bajo, fue del 98 %. Tiene un tanque presurizado que contiene un paquete de 15 celdas electrolíticas alcalinas como se ilustra en la Figura 1.8, dos cámaras de separación de gases, dos sistemas de refrigeración, dos circuitos de solución de KOH y una bomba de reposición de agua. La simetría del conjunto se utiliza en el modelado del sistema, lo que permite una implementación paralela de las ecuaciones.

Este electrolizador alcalino de alta presión es un sistema inestable debido a la producción de gases que se recogen en las cámaras de separación. Sólo en funcionamiento en bucle cerrado con la introducción de un sistema que controle la apertura de las válvulas se podría esperar un funcionamiento normal. En ese caso, el electrolizador podría producir hidrógeno a las cantidades deseadas de presión y temperatura deseadas. Además, en caso de que la corriente eléctrica corriente eléctrica sea constante, la respuesta del electrolizador alcanzará un estado estable.

Como se ha dicho anteriormente, para controlar la presión de los gases y niveles en am-

| Accessory                         | Length [cm] | Diameter [cm]      |
|-----------------------------------|-------------|--------------------|
| Straight sections I <sup>1</sup>  | 312         | 1.58               |
| Straight sections II <sup>2</sup> | 244         | 1.58               |
| Annulus                           | 32          | $D_{equiv} = 7.57$ |
| Cell <sup>3</sup>                 | 1.6         | 13.8               |
| Separation chamber                | 60          | 8.2                |
| Other accessories                 | -           | 1.58               |

<sup>1</sup> Identical circuit for the cathodic and anodic recirculation line (13 → 11 and 14 → 12).

<sup>2</sup> Equalization line (7/8 → 8/7)

<sup>3</sup> Values for individual cell. Number of cells in the Package Cell  $n_{cell} = 15$

Figura 2.1: Tabla de dimensionado de las secciones de las tuberías y accesorios. Tomado de David (2021)

bas cámaras del ELH, se instalan dos válvulas motorizadas instaladas en los conductos de salida de los gases. La concentración de KOH es variable debido a la producción de agua en el ánodo y su consumo en el cátodo, como puede verse en la Figura 1.10. Para evitar esta variación, ambos circuitos se comunican a través del tanque de presión para igualar sus concentraciones.

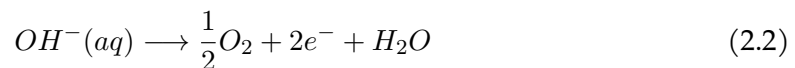
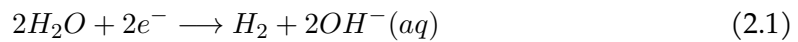
Además, esta línea permite igualar las presiones dentro y fuera de la célula. Las dimensiones de las tuberías y tanques se muestran en Figura 2.1. El objetivo del modelo es predecir:

- La contaminación de cada corriente de gas con el otro gas debido a la permeabilidad de la membrana permeabilidad de la membrana y la difusividad a través de la línea de equalización.
- Los cambios tanto de presión como de niveles en las cámaras de separación en función de la corriente.

El funcionamiento se puede separar en dos fenómenos principales: la producción de gas en cada y la separación y compresión del gas en las cámaras de separación.

## 2.2. Hipótesis de modelización

En este proceso no podemos acudir a ningún hecho similar, ya que todos los fenómenos son acreditados desde el punto de vista fisicoquímicos. El agua en contacto con los electrodos participa en las dos siguientes reacciones químicas en la célula electrolítica, una en cada electrodo, impulsadas por la corriente eléctrica simbolizada por el flujo de electrones  $e^-$ :



Cada reacción se produce en una semicelda, por lo que no hay mezcla directa de gases en ese espacio. No obstante, la membrana que separa las semiceldas es levemente permeable a los gases, lo que hace que aparezca un primer foco de contaminación cruzada de gases.

Como las reacciones producen gases y la solución acuosa tiene un límite de capacidad de solubilización de esos gases, la solución se considerará que estas soluciones saldrán de cada media celda en su límite de solubilización del gas correspondiente. Consecuentemente, todo el exceso de gas que produce la reacción en dicho límite de solubilidad es transportado en el líquido como pequeñas burbujas de gas.

En la cámara de separación a la que pasa cada solución, se extrae la separación de las burbujas de gas, sin perder la saturación del gas en la solución. Sin embargo, el gas producido por esa separación se considerará saturado en el agua debido al equilibrio entre el agua líquida y el gas en la atmósfera de la cámara de separación. El gas se mantiene en la parte superior de la cámara, presurizándola. Luego es descargado de forma regulada por la parte superior, intentando con este flujo controlado conservar la presión en el sistema. La solución desgasificada por eliminación de burbujas es retirada de la cámara a través de una bomba y se supone, que dicha solución, está saturada en la cámara. La presión de descarga de dicha bomba debe ser suficiente para presurizar el depósito que contiene el paquete de células. Los supuestos que completan la hipótesis de modelización anteriormente expuesta son:

1. Agitación perfecta en todos los sistemas de proceso (PS), excepto el líquido gaseado en la cámara de separación.
2. Las semiceldas funcionan siempre a pleno volumen sin acumulación de gas.
3. Todo el ion  $OH^-$  se produce o se consume dentro de las medias celdas, es decir, no hay  $OH^-$  en ninguna otra corriente.
4. Temperatura espacialmente uniforme en todo el dispositivo.
5. Temperatura temporalmente constante debido a la acción del sistema de refrigeración.
6. Las bombas de recirculación permiten superar la fricción en el sistema y garantizar el flujo entre las medias celdas y las cámaras de separación.
7. La mezcla de gases en la parte superior de las cámaras de separación se considera un gas ideal.

### 2.2.1. Definición del sistema de proceso

La Figura 2.2 muestra los sistemas de proceso (PS) que se toman para construir el modelo. El número de cada PS está colocado en romano al lado de cada caja. La mayoría de los sistemas de proceso presentan una acción que puede formularse mediante una expresión algebraica. Además, la simetría de los procesos, donde hay dos semicircuitos, uno por cada semicelda, facilita la construcción del modelo. Cabe resaltar los siguientes pares de sistemas de procesos, para los que hay que esbozar todos los equilibrios (iguales en su estructura matemática por simetría, pero con parámetros particulares): PS I y II, PS III y IV, PS IX y X, y, por último, PS XIII, que no tiene simetría.

Como ya se citó, las demás PS tienen modelos triviales, por lo que no se deduce ningún saldo para ellas. Mientras que las PS I y II son las únicas con reacción química, todos los balances se trabajan en base molar en lugar de utilizar la base de masa.

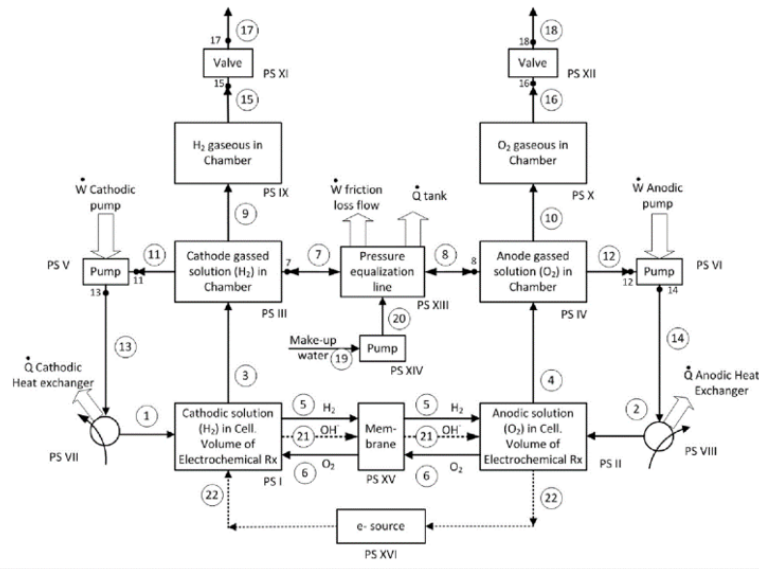


Figura 2.2: Diagrama de flujo con los sistemas de proceso numerados en romanos. Los intercambios de masa se identifican con números dentro de los círculos. Tomado de David (2021)

### 2.2.2. Estructura básica del modelo

La estructura básica del modelo se presenta en Figura 2.3 donde se mantienen las ecuaciones de equilibrio que proporcionan información para responder a las preguntas planteadas al modelo.

### 2.2.3. Variables, parámetros y constantes

En la Figura 2.4 presentaremos la nomenclatura utilizada para las variables, parámetros y constantes pertenecientes a este modelo y se utiliza para contabilizarlas.

### 2.2.4. Ecuaciones constitutivas y de evaluación

Para cada uno de los parámetros estructurales, los que aparecen en la estructura del modelo básico, se propone su ecuación constitutiva o de evaluación en la Figura 2.5 donde se resumen las ecuaciones para los nuevos parámetros que surgen de las ecuaciones anteriores, los cuales se denominan parámetros funcionales.

Finalmente, las constantes del modelo consideradas se presentan en la Figura 2.6 Estas ecuaciones constitutivas y de evaluación que se consideran relevantes para aclarar, se explican a continuación:

#### Caudal de inyección molar $n_{20}$

En los momentos en que se inyecta agua,  $n_{20}$  no es nulo y en ese momento ya no es válido que  $n_7 = n_8$ . Lo que hay que definir es qué proporción del caudal de inyección circula hacia cada SC. Para simplificar, buscando el lugar donde la línea de inyección se conecta

| #  | Equation   | Process System     |
|----|--|--------------------|
| 1  | $\frac{dV_3}{dt} = \frac{1}{V_{mix,I}} \left[ \dot{n}_1 + \dot{n}_6 - \dot{n}_3 - \dot{n}_5 + r_1 \sum_i \sigma_{i,1} \right]$   | SP <sub>I</sub>    |
| 2  | $\frac{dx_{H_2,3}}{dt} = \frac{1}{N_I} \left[ x_{H_2,1} \dot{n}_1 - x_{H_2,3} \dot{n}_3 - \dot{n}_5 + r_1 - x_{H_2,3} \dot{N}_I \right]$   | SP <sub>I</sub>    |
| 3  | $\frac{dx_{O_2,3}}{dt} = \frac{1}{N_I} \left[ x_{O_2,1} \dot{n}_1 + \dot{n}_6 - x_{O_2,3} \dot{n}_3 - x_{O_2,3} \dot{N}_I \right]$   | SP <sub>I</sub>    |
| 4  | $\dot{n}_{21} = 2r_1$  | SP <sub>I</sub>    |
| 5  | $\dot{n}_{22} = 2r_1$  | SP <sub>I</sub>    |
| 6  | $\frac{dN_{III}}{dt} = \dot{n}_3 + \dot{n}_7 - \dot{n}_9 - \dot{n}_{11}$   | SP <sub>III</sub>  |
| 7  | $\frac{dL_{Lg,III}}{dt} = \frac{1}{A_{SC}} \left( \dot{V}_3 - \dot{V}_7 - \dot{V}_9 - \dot{V}_{11} + \dot{V}_{bubbles} \right)$  | SP <sub>III</sub>  |
| 8  | $\frac{dx_{H_2,III}}{dt} = \frac{1}{N_{III}} \left[ x_{H_2,3} \dot{n}_3 + x_{H_2,7} \dot{n}_7 - \dot{n}_{H_2,9} - x_{H_2,11} \dot{n}_{11} - x_{H_2,III} \dot{N}_{III} \right]$             | SP <sub>III</sub>  |
| 9  | $\frac{dx_{O_2,III}}{dt} = \frac{1}{N_{III}} \left[ x_{O_2,3} \dot{n}_3 + x_{O_2,7} \dot{n}_7 - \dot{n}_{O_2,9} - x_{O_2,11} \dot{n}_{11} - x_{O_2,III} \dot{N}_{III} \right]$             | SP <sub>III</sub>  |
| 10 | $\dot{n}_{11} = \dot{n}_{13}$  | SP <sub>V</sub>    |
| 11 | $0 = \eta_1 \dot{W}_1 - \frac{P_{13} - P_{11}}{\rho_{L,11}} \Rightarrow f(\dot{m}_{13}) = h_{f,13 \rightarrow 11}$   | SP <sub>V</sub>    |
| 12 | $x_{H_2,13} = x_{H_2,11}$  | SP <sub>V</sub>    |
| 13 | $x_{O_2,13} = x_{O_2,11}$  | SP <sub>V</sub>    |
| 14 | $x_{H_2,1} = x_{H_2,13}$   | SP <sub>V,II</sub> |
| 15 | $x_{O_2,1} = x_{O_2,13}$   | SP <sub>V,II</sub> |
| 16 | $\frac{dP_{15}}{dt} = \frac{RT}{A_T L_{g,IX}} \left( \dot{n}_9 - \dot{n}_{15} \right) - \frac{P_{15}}{L_{g,IX}} \dot{L}_{g,IX}$  | SP <sub>IX</sub>   |
| 17 | $\frac{dx_{H_2,15}}{dt} = \frac{1}{N_{IX}} \left[ x_{H_2,9} \dot{n}_9 - x_{H_2,15} \dot{n}_{15} - x_{H_2,15} \dot{N}_{IX} \right]$   | SP <sub>IX</sub>   |
| 18 | $\frac{dx_{O_2,15}}{dt} = \frac{1}{N_{IX}} \left[ x_{O_2,9} \dot{n}_9 - x_{O_2,15} \dot{n}_{15} - x_{O_2,15} \dot{N}_{IX} \right]$   | SP <sub>IX</sub>   |
| 19 | $\dot{n}_{15} = \dot{n}_{17}$  | SP <sub>XI</sub>   |
| 20 | $\dot{V}_{17} = C_{v,1} w_1 \sqrt{\frac{P_{17} - P_{15}}{\rho_{g,XI}}}$  | SP <sub>XI</sub>   |
| 21 | $\frac{dN_{XIII}}{dt} = \dot{n}_{XIII,in} - \dot{n}_{XIII,out} + \dot{n}_{20}$   | SP <sub>XIII</sub> |
| 22 | $0 = \frac{P_{18} - P_{17}}{\rho_L} - h_{f,8 \rightarrow 7} \Rightarrow f(\dot{m}_{18}) = \frac{P_{18} - P_{17}}{\rho_L}$  | SP <sub>XIII</sub> |
| 23 | $\frac{dx_{H_2,XIII}}{dt} = \frac{1}{N_{XIII}} \left[ x_{H_2,XIII,in} \dot{n}_{XIII,in} - x_{H_2,XIII,out} \dot{n}_{XIII,out} + A_{line} \Phi_{H_2} - x_{H_2,XIII} \dot{N}_{XIII} \right]$ | SP <sub>XIII</sub> |
| 24 | $\frac{dx_{O_2,XIII}}{dt} = \frac{1}{N_{XIII}} \left[ x_{O_2,XIII,in} \dot{n}_{XIII,in} - x_{O_2,XIII,out} \dot{n}_{XIII,out} + A_{line} \Phi_{O_2} - x_{O_2,XIII} \dot{N}_{XIII} \right]$ | SP <sub>XIII</sub> |

Figura 2.3: Ecuaciones de equilibrio que forman la estructura básica del modelo. Tomado de David (2021)

| Symbol           | Name  | Symbol                  | Name   |
|------------------|---|-------------------------|--|
| $\bar{\rho}_i$   | Molar density of stream i                     | $V_{mix,I}$             | Volume in PS I                               |
| $\dot{n}_i$      | Molar flow in stream i                        | $r_j$                   | Reaction rate for reaction j                 |
| $\sigma_{X,j}$   | Stoichiometric coefficient of X in reaction j | $x_{X,3}$               | Concentration of species X in molar fraction |
| $N_I$            | Total moles in PS I                           | $M_{III}$               | Total mass in PS III                         |
| $\dot{m}_i$      | Mass flow in stream i                         | $w_{X,III}$             | Concentration of species X in mass fraction  |
| $\eta_1$         | Pump efficiency                               | $\hat{W}_1$             | Specific work of the Pump                    |
| $P_j$            | Pressure in point j                           | $\rho_{L,i}$            | Mass density in stream i                     |
| $R$              | Ideal gas constant                            | $T$                     | System temperature                           |
| $\mathfrak{M}_X$ | Molar mass of species X                       | $A_T$                   | Chamber cross area                           |
| $L_{g,IX}$       | Height of gas volume                          | $\rho_{g,XI}$           | Mass density of gas in PS XI                 |
| $\dot{V}_i$      | Volumetric flow in stream i                   | $h_{f,a \rightarrow b}$ | Friction energy loss from a to b             |

Figura 2.4: Lista de símbolos. Tomado de David (2021)

a la línea de recirculación, se define que todo el flujo de inyección va al SCO.

### 2.2.5. Identificación de los parámetros

Con la estructura propuesta, se realizó la identificación de los parámetros libres, cuyos valores aparecen en la Figura 2.6. Estos parámetros combinan los valores obtenidos de la literatura con la identificación mediante el conocido método de mínimos cuadrados. Para calcular dichos parámetros se evalúan los errores de salida, que miden la diferencia entre

| #  | Parameter <sup>a</sup>   | Equation  |
|----|--------------------------|---|
| 1  | $\dot{n}_n$              | $\dot{n}_n = \dot{V}_n \bar{\rho}_n$  |
| 3  | $\dot{n}_5$              | $\dot{n}_5 = \left( \Phi_{\text{H}_2-\text{O}_2, \text{Fick}} + \Phi_{\text{H}_2-\text{O}_2, \text{Darcy}} \right) A_{\text{cell}} n_{\text{cell}}$   |
| 4  | $\dot{n}_6$              | $\dot{n}_6 = \left( \Phi_{\text{O}_2-\text{H}_2, \text{Fick}} + \Phi_{\text{O}_2-\text{H}_2, \text{Darcy}} \right) A_{\text{cell}} n_{\text{cell}}$   |
| 5  | $r$                      | $r = \eta_F \frac{n_{\text{cell}}}{\sigma_{e-2} F} I$   |
| 6  | $N_M$                    | $N_M = V_{\text{mix}, M} \bar{\rho}_m$  |
| 8  | $\dot{N}_M$              | $\dot{N}_M = V_{\text{mix}, M} \dot{\bar{\rho}}_m$  |
| 10 | $\dot{n}_q$              | $\dot{n}_q = (n_{\text{H}_2, N, b} + n_{\text{O}_2, N, b}) \frac{FC_{\text{flash}}}{\tau_b}$  |
| 12 | $\dot{n}_r$              | $\dot{n}_r = \frac{\dot{m}_r}{\mathfrak{M}_r}$  |
| 14 | $\dot{V}_3$              | $\dot{V}_3 = \dot{V}_1 + \dot{V}_{\text{H}_2, r1} - \dot{V}_{\text{H}_2\text{O}, r1} - \dot{V}_5 + \dot{V}_6$   |
| 15 | $\dot{V}_p$              | $\dot{V}_p = \frac{\dot{m}_p}{\rho_{\text{SlnKOH}}}$  |
| 17 | $\dot{V}_q$              | $\dot{V}_q = \dot{n}_q \frac{RT}{P_{\text{H}_2\text{O}, r}}$  |
| 19 | $\dot{V}_r$              | $\dot{V}_r = \dot{m}_r \frac{\rho_{\text{H}_2\text{O}, r}}{\rho_{\text{SlnKOH}}}$   |
| 21 | $\dot{V}_{b, N}$         | $\dot{V}_{b, N} = -(n_{\text{H}_2, N, b} + n_{\text{O}_2, N, b}) RT \frac{P_Q}{P_Q^2}$  |
| 23 | $x_{D, p}$               | $x_{D, p} = \min(x_{D, n}, x_{D, \text{sat}, M})$   |
| 27 | $x_{D, q}$               | $x_{D, q} = \frac{n_{D, N, b}}{n_{\text{H}_2, N, b} + n_{\text{O}_2, N, b}}$  |
| 31 | $x_{D, r}$               | $x_{D, r} = \min(x_{D, n}, x_{D, \text{sat}, M})$   |
| 35 | $\dot{V}_4$              | $\dot{V}_4 = \dot{V}_2 + \dot{V}_{\text{O}_2, r} + \dot{V}_{\text{H}_2\text{O}, r2} + \dot{V}_5 - \dot{V}_6$  |
| 36 | $h_{f, a \rightarrow b}$ | $h_{f, a \rightarrow b} = \sum_S \left( K_S \frac{v_S^2}{2} \right)$  |
| 39 | $L_{g, Q}$               | $L_{g, Q} = L_{SC} - L_{g, N}$  |
| 41 | $\dot{L}_{g, Q}$         | $\dot{L}_{g, Q} = -\frac{dL_{g, N}}{dt}$  |
| 43 | $\dot{N}_Q$              | $\dot{N}_Q = \frac{P_Q A_{SC} L_{g, Q}}{RT}$  |
| 45 | $\dot{N}_Q$              | $\dot{N}_Q = \dot{n}_q - \dot{n}_t$   |
| 47 | $\dot{m}_{\text{theo}}$  | $f(\dot{m}_{\text{theo}}) = h_{f, 7 \rightarrow 8}(\dot{m}_{\text{theo}}) + g(L_{g, III} - L_{g, IV}) + \frac{P_{15} - P_{16}}{\rho_{\text{SlnKOH}}}$ |

<sup>a</sup>Indexes:  $D$  and  $E$ :  $\text{H}_2$  or  $\text{O}_2$ ,  $F$ :  $\text{H}_2$ ,  $\text{O}_2$  or  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $n$ : flows 3 or 4,  $o$ : flows 5 or 6,  $r$ : flows 11 or 12,  $t$ : flows 15 o 16,  $z$ : reactions 1 (Cathodic side) or 2 (Anodic side),  $M$ : PSs I or II,  $N$ : PSs III or IV,  $Q$ : PSs IX or X.

Figura 2.5: Ecuaciones constitutivas o de evaluación de los parámetros estructurales. Tomado de David (2021)

| #  | Parameter <sup>a</sup>              | Equation   |
|----|-------------------------------------|--|
| 1  | $\Phi_{D-E, \text{Fick}}$           | $\Phi_{D-E, \text{Fick}} = D_D \frac{C_{D, n, D} - C_{D, n, E}}{z_{\text{cell}}}$  |
| 3  | $C_{D, n}$                          | $C_{D, n} = \min(x_{D, n} \bar{\rho}_n, C_{D, \text{sat}, M})$   |
| 7  | $C_{D, \text{sat}, M}$              | $C_{D, \text{sat}, M} = K_{H, e, D} x_{D, n} P_N$  |
| 11 | $\Phi_{D-E, \text{Darcy}}$          | $\Phi_{D-E, \text{Darcy}} = \epsilon_D \frac{P_{ND} - P_{NE}}{z_{\text{cell}}}$  |
| 13 | $n_{D, N, b}$                       | $n_{D, N, b} = \max(x_{D, N} - x_{D, \text{sat}, M}, 0) N_{III}$   |
| 17 | $x_{D, \text{sat}, M}$              | $x_{D, \text{sat}, M} = \frac{C_{D, \text{sat}, M}}{\bar{\rho}_n}$   |
| 21 | $\mathfrak{M}_i$                    | $\mathfrak{M}_i = x_{\text{H}_2\text{O}, i} \mathfrak{M}_{\text{SlnKOH}} + x_{\text{H}_2, i} \mathfrak{M}_{\text{H}_2} + x_{\text{O}_2, i} \mathfrak{M}_{\text{O}_2}$                  |
| 25 | $\mathfrak{M}_{\text{SlnKOH}}$      | $\mathfrak{M}_{\text{SlnKOH}} = \left( \frac{1-C}{\mathfrak{M}_{\text{H}_2\text{O}}} + \frac{C}{\mathfrak{M}_{\text{KOH}}} \right)^{-1}$   |
| 26 | $\dot{V}_m$                         | $\dot{V}_m = \dot{V}_r$  |
| 28 | $\dot{V}_{D, r_z}$                  | $\dot{V}_{D, r_z} = \dot{n}_{D, r_z} \frac{RT}{P_{ND}}$  |
| 30 | $\dot{n}_{F, r_z}$                  | $\dot{n}_{F, r_z} = \sigma_{F, r_z} r$   |
| 34 | $\dot{V}_{\text{H}_2\text{O}, r_z}$ | $\dot{V}_{\text{H}_2\text{O}, r_z} = \frac{\dot{n}_{\text{H}_2\text{O}, r_z} \mathfrak{M}_{\text{H}_2\text{O}}}{\rho_{\text{H}_2\text{O}}}$  |
| 36 | $\dot{V}_o$                         | $\dot{V}_o = \dot{n}_o \frac{RT}{P_N}$   |
| 38 | $K_S$                               | Taken from [84]  |
| 39 | $f_{\text{Darcy}}$                  | $f_{\text{Darcy}} = \left\{ -2 \log \left[ \frac{\epsilon}{3.71ID} - \frac{5.02}{Re} \log \left( \frac{\epsilon}{3.71ID} + \frac{14.5}{Re} \right) \right] \right\}^{-2}$ <sup>b</sup> |
| 40 | $Re$                                | $Re = \frac{\rho_{\text{SlnKOH}} v_S ID}{\mu_{\text{SlnKOH}}}$   |
| 41 | $v_S$                               | $v_S = \frac{1}{A_S} \frac{\dot{m}_S}{\rho_{\text{SlnKOH}}}$   |

<sup>a</sup>Indexes:  $D$  and  $E$ :  $\text{H}_2$  or  $\text{O}_2$ ,  $F$ :  $\text{H}_2$ ,  $\text{O}_2$  or  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $n$ : flows 3 or 4,  $o$ : flows 5 or 6,  $r$ : flows 11 or 12,  $t$ : flows 15 o 16,  $z$ : reactions 1 (Cathodic side) or 2 (Anodic side),  $M$ : PSs I or II,  $N$ : PSs III or IV,  $Q$ : PSs IX or X.

<sup>b</sup>for turbulent flows [177]

Figura 2.6: Lista de símbolos, variables, parámetros y constantes del modelo. Tomado de David (2021)

el modelo y los experimentos.

## 2.2.6. Análisis de los grados de libertad

Se obtiene un modelo resoluble cuando sus grados de libertad (la diferencia entre el número de variables y parámetros desconocidos y las ecuaciones) son nulos. El modelo pre-

senta 42 variables, 50 parámetros estructurales y 49 parámetros funcionales. En total hay 141 ecuaciones que equivalen al número de variables y parámetros desconocidos. Por lo tanto, el modelo es resoluble.

### 2.3. Solución del modelo y análisis de los resultados

El modelo se resuelve utilizando Matlab. Utilizando el código obtenido en el trabajo precedente, que es sencillo debido a las características de los parámetros fijos del PBSM, se han simulado varias condiciones operativas del electrolizador se han simulado varias condiciones operativas del electrolizador.

Estas condiciones permiten evaluar el comportamiento de este PBSM respecto a datos de operación tomados del montaje real. En las siguientes subsecciones, se presentan tres simulaciones diferentes:

- En primer lugar, dos perturbaciones escalonadas que muestran la respuesta en la célula dan información cualitativa que puede ser comparada con el sistema real.
- En segundo lugar, se presenta el comportamiento de las burbujas cuando se abren las válvulas y cambia la corriente.
- Y, por último, se comparan los procesos de presurización y funcionamiento.

#### Análisis del comportamiento de la célula

Se han aplicado dos perturbaciones escalonadas a los 600 s y 1200 s de la simulación. El orden de dichas perturbaciones es: primero un paso de corriente eléctrica de 20 A a 24 A, y a continuación un aumento del 50 % en la difusividad de la membrana.

Estas condiciones permiten evaluar el comportamiento de este PBSM respecto a los datos de operación tomados del montaje real. En las siguientes subsecciones, se presentan tres simulaciones diferentes:

- En primer lugar, dos perturbaciones escalonadas que muestran la respuesta en la célula dan información cualitativa que puede ser comparada con el sistema real.
- En segundo lugar, se presenta el comportamiento de las burbujas cuando se abren las válvulas y cambia la corriente.
- Y tercero, se comparan los procesos de presurización y funcionamiento entre las simulaciones y los datos reales.

El modelo propuesto es capaz de representar la evolución dinámica del nivel, la presión y todas las concentraciones del sistema. Por lo tanto, este modelo, denominado modelo orientado a la simulación, será la base en la siguiente sección para realizar un modelo orientado al control necesario para diseñar controladores para la operación del electrolizador alcalino.

| Symbol              | Description  |
|---------------------|--|
| <b>Inputs</b>       |  |
| $u_{H_2}$           | H <sub>2</sub> outlet valve opening                |
| $u_{O_2}$           | O <sub>2</sub> outlet valve opening                |
| <b>Disturbances</b> |  |
| $I$                 | Electrical input current                           |
| $P_{tank}$          | External pressure in the storage tank              |
| <b>Outputs</b>      |  |
| $LLg,III$           | Liquid level solution in H <sub>2</sub> SC         |
| $LLg,IV$            | Liquid level solution in O <sub>2</sub> SC         |
| $P_{IX}$            | Pressure in H <sub>2</sub> SC                      |
| $P_X$               | Pressure in O <sub>2</sub> SC                      |
| $x_{H_2,15}$        | H <sub>2</sub> purity in the H <sub>2</sub> outlet |
| $x_{O_2,16}$        | O <sub>2</sub> purity in the O <sub>2</sub> outlet |

Figura 2.7: Lista de entradas, perturbaciones y salidas Tomado de David (2021)

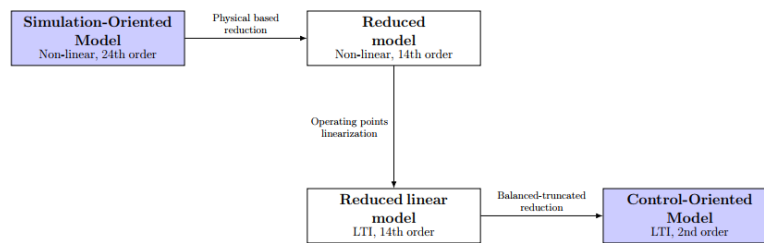


Figura 2.8: Explicación gráfica de los pasos dados para pasar de un modelo orientado a la simulación a un modelo orientado al control. Tomado de David (2021)

Este modelo altamente detallado tiene 25 ecuaciones diferenciales (es decir, 25 estados) y 17 variables adicionales, 50 parámetros estructurales y 49 parámetros funcionales. El modelo tiene dos entradas, dos perturbaciones y seis salidas que se presentan en la Figura 2.7.

Este modelo es adecuado para fines de simulación, pero no para el diseño de control. Por lo tanto, se desarrolla un Modelo Orientado al Control (COM, siglas en inglés), en la Figura 2.8 se explica los pasos para pasar de un Modelo Orientado a la Simulación (SOM, siglas en inglés) a un COM, considerando el objetivo de la implementación del control, que es la acción sobre las aperturas de las válvulas para reducir la contaminación cruzada en las corrientes de gas.

## 2.4. Reducción del modelo sobre una base física

Aunque el objetivo final es maximizar la pureza de los gases, ésta es una consecuencia de la presión y la concentración a ambos lados de la membrana. Por lo tanto, las concentraciones de impurezas no se tienen en cuenta para el controlador, cuyo objetivo será mantener igualados los niveles de líquido y la presión del sistema.

Además, en la hipótesis de alcanzar purezas de gas superiores al 99%, se desprecia la contaminación por gas, lo que significa que  $x_{O_2}$  y  $x_{H_2}$  se consideran nulos en los lados catódico y anódico del electrolizador, respectivamente. Igualmente, en la región del gas (PSIX y PSX), se consideran los gases puros (es decir,  $x_{H_2; 15} = x_{O_2; 16} = 1$ ).

Debido a esta última hipótesis, se puede suponer la saturación de gas puro en cada célula



| ODEs corresponding to the reduced nonlinear model. |   |
|--|---|
| State  | Corresponding ODE   |
| 1  | $\frac{d\hat{n}_3}{dt} = \frac{1}{V_{mix,I}} (\hat{n}_1 + \hat{n}_{22} + \hat{n}_6 - \hat{n}_3 - \hat{n}_5 - \hat{n}_{21} + r \sum_i \sigma_{i,1})$               |
| 2  | $\frac{d\hat{x}_{H_2,3}}{dt} = \frac{1}{N_T} (x_{H_2,1} \hat{n}_1 - x_{H_2,3} \hat{n}_3 - \hat{n}_5 + \hat{n}_6 + r_1 - x_{H_2,3} \hat{N}_I)$                     |
| 3  | $\frac{d\hat{n}_4}{dt} = \frac{1}{V_{mix,II}} (\hat{n}_2 - \hat{n}_{22} - \hat{n}_6 - \hat{n}_4 + \hat{n}_5 + \hat{n}_{21} + r \sum_i \sigma_{i,2})$              |
| 4  | $\frac{dx_{O_2,4}}{dt} = \frac{1}{N_T} (x_{O_2,2} \hat{n}_2 + \hat{n}_5 - \hat{n}_6 - x_{O_2,4} \hat{n}_4 + \frac{r}{2} - x_{O_2,4} \hat{N}_{II})$                |
| 5  | $\frac{d\hat{N}_{III}}{dt} = \hat{n}_3 + \hat{n}_7 - \hat{n}_9 - \hat{n}_{11}$  |
| 6  | $\frac{d\hat{L}_{g,III}}{dt} = \frac{1}{A_{SC}} (\hat{V}_3 + \hat{V}_7 - \hat{V}_9 - \hat{V}_{11} + \hat{V}_{b,III})$   |
| 7  | $\frac{d\hat{x}_{H_2,III}}{dt} = \frac{1}{N_{III}} (x_{H_2,3} \hat{n}_3 + x_{H_2,7} \hat{n}_7 - \hat{n}_9 - x_{H_2,11} \hat{n}_{11} - x_{H_2,III} \hat{N}_{III})$ |
| 8  | $\frac{d\hat{N}_{IV}}{dt} = \hat{n}_4 - \hat{n}_8 - \hat{n}_{10} - \hat{n}_{12}$  |
| 9  | $\frac{d\hat{L}_{g,IV}}{dt} = \frac{1}{A_{SC}} (\hat{V}_4 - \hat{V}_8 - \hat{V}_{10} - \hat{V}_{12} + \hat{V}_{b,IV})$  |
| 10   | $\frac{dx_{O_2,IV}}{dt} = \frac{1}{N_{IV}} (x_{O_2,4} \hat{n}_4 - x_{O_2,8} \hat{n}_8 - \hat{n}_{10} - x_{O_2,12} \hat{n}_{12} - x_{O_2,IV} \hat{N}_{IV})$        |
| 11   | $\frac{dP_{g,5}}{dt} = \frac{RT}{A_T L_{g,IX}} (\hat{n}_9 - \hat{n}_{15}) - \frac{P_{g,5}}{L_{g,IX}} \dot{L}_{g,IX}$  |
| 12   | $\frac{dP_{g,6}}{dt} = \frac{RT}{A_T L_{g,X}} (\hat{n}_{10} - \hat{n}_{16}) - \frac{P_{g,6}}{L_{g,X}} \dot{L}_{g,X}$  |
| 13   | $\frac{d\hat{n}_7}{dt} = \frac{1}{\tau_{equal}} (\hat{n}_{heo} - \hat{n}_7)$  |
| 14   | $\frac{d\hat{n}_8}{dt} = \frac{1}{\tau_{equal}} (\hat{n}_{heo} - \hat{n}_8)$  |

Figura 2.9: Lista de estados incluidos en el modelo reducido no lineal. Tomado de David (2021)

para calcular la difusión a través de la membrana, es decir

$$C_{H_2,sat,I} = K_{H_e,H_2} P_{IX} \quad (2.3)$$

$$C_{O_2,sat,II} = K_{H_e,O_2} P_X \quad (2.4)$$

donde  $K_{H_e,H_2}$  y  $K_{H_e,O_2}$  son las constantes de la ley de Henry para el  $H_{O_2}$  y el  $O_{H_2}$ , respectivamente. Además, según la ley de los gases ideales, los moles del gas se comportan igual sin importar la sustancia, por lo que la contabilidad del número de moles en cada línea es lo único que realmente importa. Por lo tanto, los moles contaminantes de  $O_{H_2}$  (o  $H_{O_2}$ ) en el cátodo (o ánodo) se tratan como  $H_{O_2}$  (u  $O_{H_2}$ ).

Además, a pesar de tener dos vías de difusión, es decir, a través de la membrana y a través de la línea de equalización, esta última es menor que la primera (106 veces). Esto se debe principalmente a un de la línea de equalización (aproximadamente 3 m) frente al grosor de la membrana (aproximadamente  $5 \times 10^{-4}$  m).

Entonces, la difusión a través de la línea de equalización puede despreciarse junto con los estados correspondientes.

A partir de los supuestos anteriores, el modelo puede reducirse a 14 estados, que tienen un significado físico y se enumeran en la Figura 2.9. Los estados restantes se consideran constantes mientras que los parámetros, que están representados por ecuaciones algebraicas, no se modifican. En resumen, en la Figura 2.10 se presenta una descripción gráfica de los estados finales.

Diferentes escenarios con señales de tipo pulso en las perturbaciones I y  $P_{tank}$  y entradas de control  $u_{H_2}$  y  $u_{O_2}$  se simularon para comparar las respuestas del modelo original y el reducido COM.

La Figura 2.11 muestra el resultado cuando las condiciones iniciales de operación corresponden a  $I = 30$  A y  $P_{H_2} = 4000$  kPa (un punto de operación en el centro del rango de operación considerado) y se aplica una señal tipo pulso en la corriente. La duración de

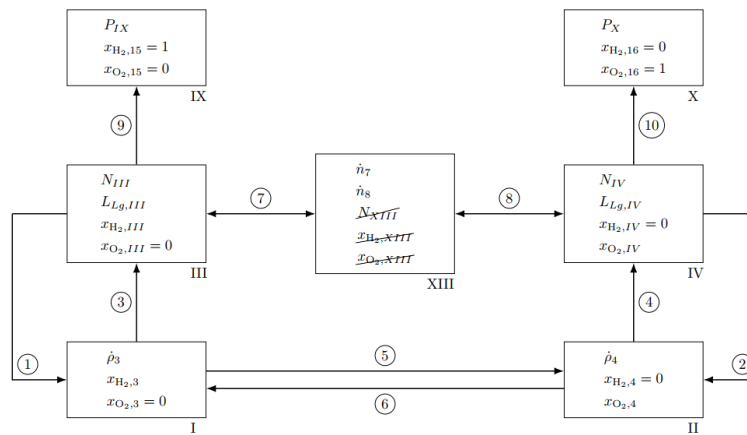


Figura 2.10: Diagrama de flujo del sistema reducido indicando las variables definidas como constante y las rechazadas. Tomado de David (2021)

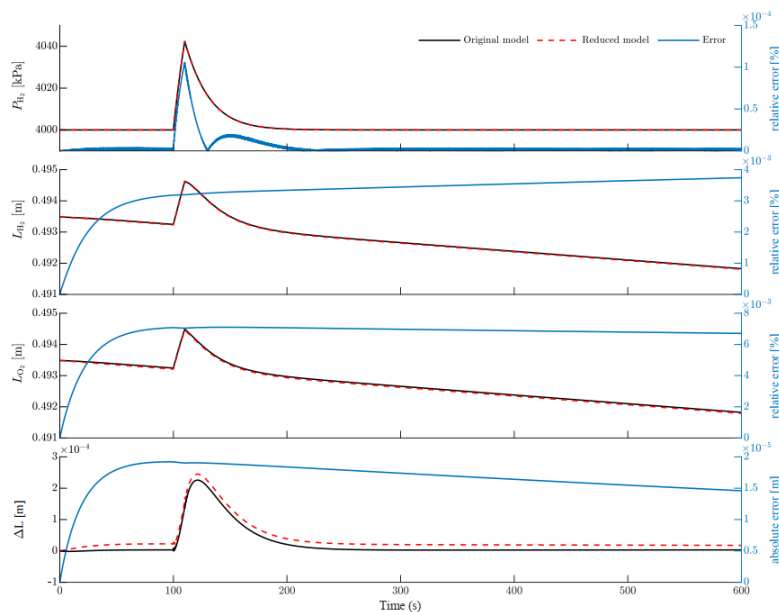


Figura 2.11: Comparación entre las respuestas del modelo no lineal completo y el COM reducido cuando se aplica un impulso de 10 s de duración en la corriente eléctrica cuando  $P_{H_2} = 40$  bar e  $I = 30$  A. Tomado de David (2021)

dicho pulso fue de 10 s y la amplitud de 30 A.

En el gráfico superior de la Figura 2.12, se observan las evoluciones de la presión  $P_{H_2}$  para el modelo original completo (línea negra sólida) y la misma presión para la COM reducida (línea roja discontinua). En el segundo y tercer gráfico se comparan las evoluciones de los niveles  $L_{H_2}$  y  $L_{H_2}$  respectivamente. El gráfico inferior muestra la diferencia de niveles  $\Delta L$  para los modelos original y reducido, respectivamente.

Los errores relativos, y el error absoluto, en el caso de la diferencia de niveles, pueden verse en líneas azules sólidas. En este último caso, los valores nominales son cercanos a cero y el error relativo es impracticable.

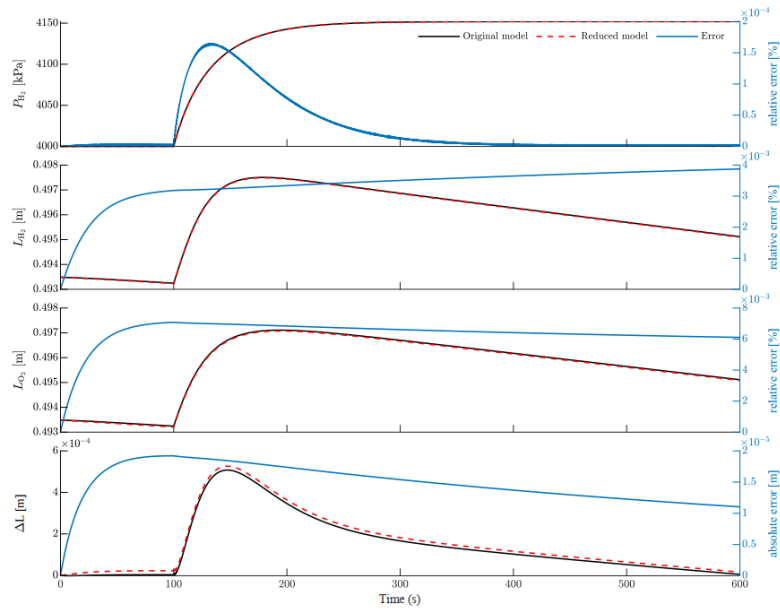


Figura 2.12: Comparación entre las respuestas del modelo no lineal completo y el COM reducido cuando se aplica un escalón constante en la corriente eléctrica cuando  $P_{H_2} = 40$  bar e  $I = 30$  A. Tomado de David (2021)

Obsérvese que el máximo error de aproximación es de  $2 \times 10^{-5}$  m en  $\Delta L$ , que es bastante pequeño.

En todos los casos, se puede observar que la presión y los niveles en ambas cámaras de separación no presentaron diferencias mientras que la diferencia de nivel tiene un desajuste creciente, aunque de pequeña cuantía.

Recordando que las entradas de control son la presión del sistema y la diferencia de nivel en las cámaras de separación, se puede concluir que este modelo reducido es capaz de dar información precisa sobre estas variables.



## Capítulo 3

# Control Predictivo basado en modelo

### 3.1. Introducción al control predictivo

El control predictivo basado en Modelo (MPC) se originó a finales de los años setenta y se ha desarrollado considerablemente desde entonces. Esta tecnología avanzada es la más frecuente para el control de procesos en instalaciones industriales. El MPC no es concretamente una estrategia de control, sino que consiste en una amplia recopilación de métodos de control que utilizan un modelo de forma explícita para obtener una señal de control minimizando una función de coste. Las ideas, que aparecen en mayor o menor grado en la familia del control predictivo, son básicamente el uso explícito de un modelo para predecir la salida del proceso en instantes de tiempo futuros (horizonte), el cálculo de una secuencia de control minimizando una función objetivo y el uso de una estrategia de retroceso, de forma que en cada instante el horizonte se desplaza hacia el futuro, lo que implica la aplicación de la primera señal de control de la secuencia calculada en cada paso. (Bordons (2004)).

El éxito del MPC se debe a que es quizás la forma más general de plantear el problema de control en el dominio del tiempo. El uso de una estrategia de horizonte finito permite el tratamiento explícito de las restricciones de proceso y de funcionamiento por el MPC.

La ventaja principal es que se puede optimizar el instante de tiempo inmediato, mientras que tiene en cuenta instantes de tiempo futuros. Esto se consigue optimizando un horizonte de tiempo finito  $H_p$ , pero implementando únicamente el instante de tiempo actual. Este trabajo se ha beneficiado de las siguientes características del controlador:

- Compensa las perturbaciones medibles.
- Es fácilmente implementable, y aunque posee un alto coste computacional, existen métodos para calcular su controlador explícitamente de forma que la computación sea mínima.
- El tratamiento de las restricciones es conceptualmente muy simple y pueden ser incluidas en cualquier momento para el cálculo de la ley de control.

Se diferencia del controlador Proporcional-Integral-Derivativo (PID) y Regulador Cuadrático Lineal (LQR, siglas en inglés) en que estos no poseen la capacidad de predicción.

Los modelos que usan MPC generalmente se hacen con el fin de representar el comportamiento de sistemas dinámicos complejos. Los modelos predicen los cambios en las variables dependientes del sistema. Las variables independientes que no pueden ser ajustados por el controlador son consideradas perturbaciones. Las variables dependientes en estos procesos son otras medidas que permiten ver mejor algunos objetivos del control, o a veces son medidas de las restricciones en el proceso.

El MPC se considera una técnica madura para sistemas lineales y más bien lentos como los que suelen encontrarse en la industria de procesos. Los sistemas más complejos, como los procesos no lineales, híbridos o muy rápidos, se consideraban fuera del alcance del MPC. En los últimos años, se han producido algunos resultados impresionantes en estos campos. También han aparecido en la literatura aplicaciones del MPC a procesos no lineales e híbridos.

La mayoría de las aplicaciones – véase Cheng et al. (2009) y Cherevko (2018) – se encuentran en el área del refinado, uno de los campos de aplicación originales del MPC, donde tiene una sólida base. Un importante número de aplicaciones se encuentra en la petroquímica y la química. Aunque la tecnología MPC aún no ha penetrado profundamente en áreas donde las no linealidades del proceso son fuertes y se producen cambios frecuentes en las condiciones de operación, el número de aplicaciones MPC no lineales está aumentando claramente.

En general, los procesos industriales son no lineales, pero muchas aplicaciones MPC se basan en el uso de modelos lineales. Esto se debe a dos razones principales: por un lado, la identificación de un modelo no lineal es un problema y, por otro lado, los modelos lineales proporcionan buenos resultados cuando la planta está operando en la vecindad del punto de operación. Además, el empleo de un modelo lineal junto con una función objetivo cuadrática da lugar a un problema convexo cuya solución está bien estudiada y con muchos productos comerciales disponibles.

Obsérvese que el MPC de una planta lineal con restricciones lineales deriva en un controlador no lineal, y que esta combinación de dinámica y restricciones lineales ha influido en el éxito comercial del MPC. Sin embargo, el término MPC no lineal se utiliza para los controladores predictivos que hacen uso de un modelo dinámico no lineal (y, por tanto, restricciones no lineales) y da lugar a lugar a la complejidad adicional.

A pesar de que muchos casos reales no son lineales Zheng (2000), a menudo pueden ser considerados como tales en un rango de operación pequeño. Muchas veces se aplican enfoques MPC lineales cuando el mecanismo de realimentación del compensador MPC presenta errores de predicción debido a un desajuste entre el modelo y el proceso.

### 3.1.1. Estructura del control predictivo

La comprensión de la estructura del MPC hace necesario conocer el planteamiento matemático y la estrategia de solución del modelo. A continuación, se muestra la conceptualización de la estructura de control predictiva.

1. **Modelo de Predicción.** Hace referencia al modelo matemático explícito no lineal del

balance de masa y energía.

2. **Modelo del proceso.** Relaciona la respuesta del proceso con todas las entradas medidas.
3. **Modelo de las perturbaciones.** Intenta describir la parte de la respuesta del proceso que no puede ser explicada por el modelo del proceso.
4. **Función objetivo.** Función de coste que expone los objetivos de control a minimizar, que presenta una ponderación en cada término que considera la importancia de este en el proceso.
5. **Historial de movimientos pasados.** El MPC utiliza las medidas instantáneas para calcular cambios futuros en las variables dependientes. Estos se calculan para mantener las variables dependientes cerca al objetivo mientras se cumplen las restricciones. El control envía solo el primer cambio en cada variable independiente a ser implementado, y repite el cálculo cuándo el siguiente cambio es requerido.

En comparación con otros métodos de control de procesos, el control predictivo basado en modelos puede utilizarse para resolver los problemas más comunes de los procesos industriales actuales, que deben funcionar con especificaciones de rendimiento muy estrictas en las que deben satisfacerse muchas restricciones.

El MPC tiene sus bases en la optimización iterativa y de horizonte finito de un modelo de planta. En la iteración  $k$  el estado actual de la planta es muestreado y una estrategia de control que minimice el costo para un horizonte de tiempo a futuro relativamente corto.

El problema se resuelve calculando la señal de control  $u(k)$  y aplicándola al proceso. Si esta señal viola las restricciones, se satura al límite, bien por el programa de control que vigila estos niveles o por restricción de un actuador que no soporta aquel límite. El principal objetivo del control predictivo entonces es, calcular la mejor señal de control posible, optimizando un índice de funcionamiento que no se cumple. Los principales elementos del MPC son la función objetivo que debe minimizarse, el modelo empleado para calcular las predicciones de las variables controladas, la definición de las restricciones del proceso y el método aplicado para resolver el problema de optimización Camacho and Bordons (2004).

### 3.1.2. Composición general de un control predictivo

Se observa en la Figura 3.1 la composición general de un controlador control predictivo basado en modelo (García, 1989). Podemos ver las salidas conocidas  $y(k)$ , una acción de control  $u(k)$  conocida y una referencia a seguir  $s(k|k)$  determinada, además, de un horizonte de predicción  $H_p$ , las acciones de control futuras  $u(k+1|k)$  y la predicción de salida  $\bar{y}(k+1|k)$  para  $k = 1, \dots, H_p$ .

Estas salidas futuras determinadas en el horizonte de predicción son predichas en cada iteración  $k$  usando el modelo del proceso. Los valores de la salida previstos dependen del valor actual en la iteración  $k$  y las señales de control  $u(k+1|k)$  para  $k = 1, \dots, H_p - 1$  que son calculadas y enviadas al sistema.

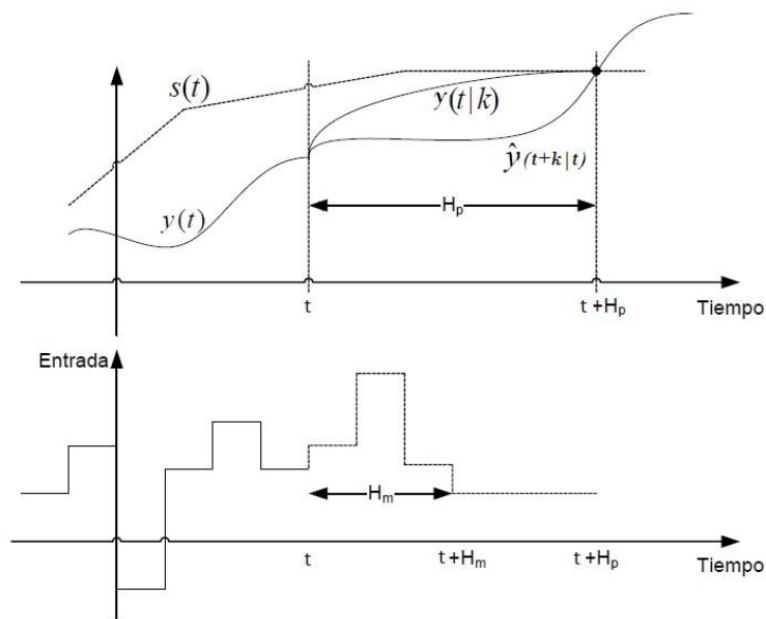


Figura 3.1: Composición general de un MPC. Tomado de Camacho and Bordons (2016)

El conjunto de señales de control futuras es calculado optimizando una regla determinada, la cual intenta mantener la salida del proceso lo más cerca de la referencia. Las restricciones influyen en la ley de control en el MPC. Principalmente en los procesos de una industria se pueden presentar muchas restricciones físicas o restricciones de control, las cuales lo ideal es que sean involucradas dentro del proyecto de nuestro controlador predictivo. Entonces, en la función de costo que se quiere minimizar es donde hay que tener en consideración las restricciones del proceso.

La señal de control calculada en el paso siguiente  $u(k+1|k)$  es utilizada para el momento actual y las demás señales son desechadas, ya que para la siguiente iteración de muestreo la salida  $y(k+1)$  es conocida y se repetiría el proceso con  $u(k+1|k+1)$ . En cada iteración  $k$  se resuelve un problema de control óptimo sobre un horizonte finito donde se resuelve:

$$\text{mín } f(|y - r|, |u|) \text{ sujeto a :} \quad (3.1)$$

$$y_{min} \leq y \leq y_{max}$$

$$u_{min} \leq u \leq u_{max}$$

$$\Delta u_{min} \leq \Delta u \leq \Delta u_{max}$$

condiciones de estabilidad

La estructura básica de implementación del MPC se observa en la Figura 3.3. Se usa un modelo para predecir la salida futura a partir de las entradas y salidas pasadas y actuales y de las futuras salidas predichas. El optimizador calcula las acciones de control futuras dadas una función de coste y sus restricciones. El modelo elegido determina la eficacia del control, por lo que este debe ser lo suficientemente adecuado como para poder predecir la evolución del proceso de una forma razonable y al mismo tiempo lo suficientemente simple como para poder implementarlo. Las distintas metodologías difieren en la manera



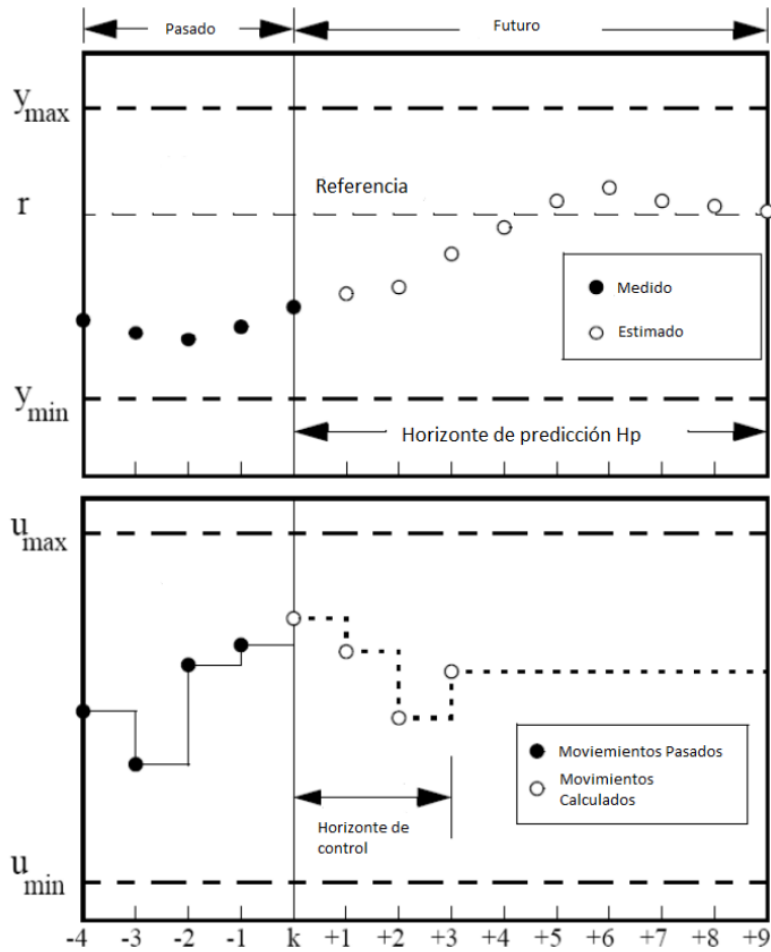


Figura 3.2: Restricciones en la salida del proceso y en la señal de control. Tomado de Camacho and Bordons (2016)

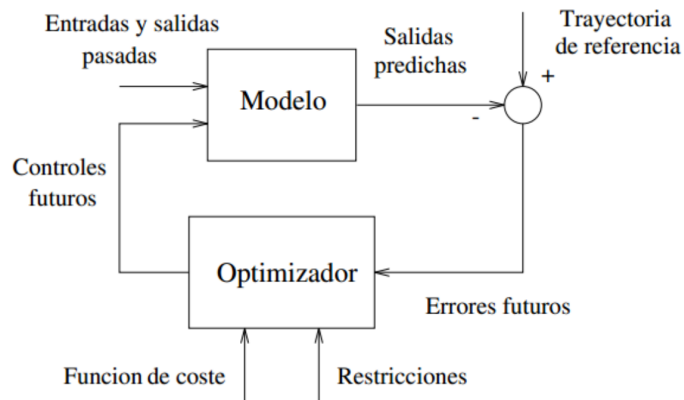


Figura 3.3: Estructura de un MPC. Tomado de Bordons (2004)

que se implementa el modelo del proceso.

El conjunto de señales de control futuras es calculado optimizando una regla determinada la cual intenta mantener la salida del proceso lo más cerca de la referencia.

### 3.1.3. Optimización multiobjetivo

En la ingeniería de control, la optimización multiobjetivo ha sido utilizada durante mucho tiempo. Sin embargo, solo en los últimos diez años se ha desarrollado intensivamente. No únicamente ha sido desarrollado para los modelos avanzados de control, sino que también para las arquitecturas clásicas de control como es el PID o PI G.P. Liu (2003).

En el diseño de controladores basados en minimización de funciones de coste está muy desarrollada en la ingeniería de control.

La optimización multiobjetivo (también llamado multicoste, multicriterio o vector de optimización) fue introducida por Pareto (1906) y puede ser definida como el problema de encontrar las variables de decisión o parámetros, los cuales satisfacen las restricciones y optimiza el vector, donde cada uno de los elementos representan las funciones objetivo. La formulación de un problema típico es, considerando el sistema discreto e invariante en el tiempo, dado como una representación de espacio de estados:

$$x(k+1) = f(x(k), u(k)) \quad (3.2)$$

donde  $x(k)$  es el vector de estado,  $x(k+1)$  es el vector de estado en la siguiente iteración y  $u(k)$  es la variable de control de entrada. Además,  $f(x(k), u(k))$  es la función de estado actualizado que depende del tipo de modelo, el cual describe el sistema Lineal Invariante en el Tiempo (LTI, siglas en inglés) el cual es:

$$f(x(k), u(k)) = Ax(k) + Bu(k) \quad (3.3)$$

Por otro lado, se asume que el sistema de variables está sujeto a las siguientes restricciones:

$$x(k) \in X, \quad u(k) \in U, \quad \forall k > 0, \quad (3.4)$$

donde  $X$  y  $U$  son conjuntos de poliedros convexos. Se considera el siguiente problema de control óptimo multiobjetivo,

$$\begin{aligned} \min_u \quad & J(U, x) \quad \text{sujeto a:} \\ & f(x(k), u(k)) = Ax(k) + Bu(k), x_0 = x \\ & x(k) \in \Omega \end{aligned} \quad (3.5)$$

$J(U, x) = [J_0(U, x), J_1(U, x), \dots, J_l(U, x)]: \mathbb{R}^s \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{l+1}$  donde  $l \geq 1$ ,  $s = Nm$ ,  $U = [u_0, \dots, u_{N-1}]$  es la secuencia de movimientos futuros, es  $x_k$  pasos en el futuro de predicción del estado inicial  $x = x(k)$  y  $\Omega$  es el poliedro de la región terminal. Cada función de coste se define como:

$$J_i(U, x) = \sum_{k=0}^{N-1} L_i(x(k), u(k)) + F_i(x(N)) \quad (3.6)$$

donde  $L$  es una aplicación lineal y el coste terminal  $F$  es otra aplicación lineal donde se asumen que son convexas, donde  $L_i$  y  $F_i$  pueden ser cualquier norma o función y pueden estar ponderadas o no. Este criterio es descrito en García (1989).

### Algunos métodos para resolver problemas de optimización multiobjetivo

Los métodos para resolver problemas de optimización multiobjetivo R. Shridhar (1998) pueden clasificarse por multitud de criterios. Existen dos grandes grupos:

- Métodos por escalarización: estos tipos de métodos normalmente usan coeficientes. Son muy eficientes, pero, por otro lado, no siempre encuentran la solución aceptable debido a conflicto de intereses entre las funciones objetivo. Suelen buscar óptimos locales y no globales.
- Métodos de Pareto: estos métodos buscan soluciones directamente en el espacio de soluciones. Estos métodos utilizan los conceptos de dominancia y no dominancia. La desventaja es que necesitan mucha capacidad de computación y la convergencia al resultado suele ser muy lenta.
- Métodos que no son ni de Pareto ni de escalarización.

## 3.2. Implementación MPC con YALMIP

Los problemas MPC se pueden formular de varias formas en YALMIP (Yalmip<sup>®</sup>, 2016). Primero vamos a definir los datos numéricos que define nuestro LTI y el problema de control.

- **nx**: número de estados
- **nu**: número de entradas
- **Q**: penalización de estado
- **R**: penalización de acción de control
- **N**: horizonte
- **x0**: estado inicial

Nuestro problema de optimización es minimizar a un coste finito de horizonte el estado y el control de trayectoria mientras se satisfacen las restricciones.

### Predicción explícita

La primera versión que implementamos explícitamente expresa el estado predicho como una función de un estado de corriente dado y la secuencia de control futura. Nosotros simplemente hacemos un bucle de las ecuaciones de simulación y las restricciones y objetivos a lo largo del horizonte.

Para evitar algunos gastos generales, formulamos el problema con el estado inicial como una variable de decisión.

```
u = sdpvar(repmat(nu,1,N),repmat(1,1,N));
x0 = sdpvar(2,1);
constraints = [ ];
objective = 0;
x = x0;
for k = 1:N
x = A*x + B*uk;
objective = objective + norm(Q*x,1) + norm(R*uk,1);
constraints = [constraints, -1 ≤ uk ≤ 1, -5 ≤ x ≤ 5];
end
```

Una vez que las restricciones y función de objetivo ha sido generado, podemos resolver el problema de optimización:

```
optimize(constraints,objective);
value(u1)
```

Ahora podemos obtener una solución a partir de un estado inicial arbitrario, simplemente restringiendo el estado inicial. El beneficio es que no tenemos que redefinir el modelo completo cada vez que cambia el estado inicial, sino simplemente hacerle una pequeña adición. Sin embargo, la sobrecarga en Yalmip para convertir al formato específico del solucionador permanece. Por supuesto, el inconveniente es que existen algunas variables y restricciones adicionales, pero el impacto computacional de esto es absolutamente menor.

```
optimize([constraints, x0 == [3;1]],objective);
value(u1)
```

## Capítulo 4

# Diseño del controlador

### 4.1. Introducción

En el Capítulo 2, se presentó un modelo orientado a la simulación (SOM) bajo el método de un modelo semifísico de base fenomenológica. Este modelo es adecuado para los propósitos de simulación, pero no para el diseño de control. Sin embargo, se desarrolló un modelo orientado a control de 14 estados lineal considerando el objetivo de la implementación de control, la cual es la acción de las válvulas de los tanques abriéndose para reducir la contaminación cruzada entre los gases, además de la predicción de las perturbaciones para que los actuadores funcionen de antemano a ellas, para luego reducirlo a un modelo de 2° orden.

Este último modelo reducido no es adecuado para diseñar el controlador, puesto que, al ser un recorte tan grande en cuanto a variables y estados, perdió su sentido físico y era complicada su implementación en la estrategia de control. Sin embargo, el modelo de 14 estados lineal sí es adecuado, ya que permitirá que esas variables que producen pequeños efectos en las variables controlables puedan ser ignoradas bajo algunas suposiciones y condiciones garantizadas que se explican después.

El modelo nominal será usado para diseñar el controlador lineal considerado. Se puede observar que no hay cambios drásticos en la respuesta en frecuencia en diferentes puntos de operación. Este hecho sugiere que el controlador lineal puede conseguirse con una actuación adecuada.

Este capítulo evalúa el diseño del modelo linealizado utilizando algoritmos avanzados basados en ideas de MPC explicado en el Capítulo 3 para equilibrar la presión y el nivel del tanque de hidrógeno con el objetivo de maximizar su producción.

El diseño consiste en un controlador predictivo que monitoriza tanto las válvulas de los tanques de hidrógeno y oxígeno, teniendo un rango de 0 a 10 vueltas siendo, por tanto, un punto de partida una variación de  $\pm 3$  vueltas, como dos entradas que se han tomado como perturbaciones, estas son una corriente eléctrica que fluctuará con el tiempo y la propia presión del tanque de hidrógeno que se considerará constante.

Este enfoque es más avanzado que los anteriores controles empleados, ya que tiene en cuenta una función de costes que optimiza el funcionamiento de la electrólisis del sistema mediante el control de dos válvulas de entrada a los tanques de los gases.

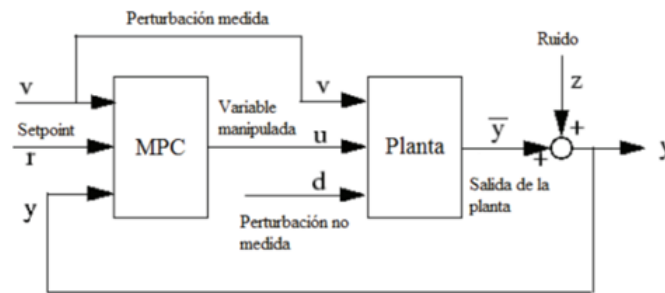


Figura 4.1: Esquema de control propuesto. Tomado de Camacho and Bordons (2016)

Nos centramos aquí solamente en la sección de producción de hidrógeno, maximizando numéricamente la producción. El enfoque propuesto permite a los operadores del sistema conocer de antemano la producción prevista y, por tanto, programar operaciones de mantenimiento preventivo en el electrolizador, esta propuesta se centra en el uso de un sistema de control avanzado para optimizar la producción y mejorar el funcionamiento de los aparatos. El hidrógeno generado se equilibra regulando el nivel y la presión del tanque mediante el controlador.

El MPC que se presenta en este capítulo se basa en un algoritmo de programación para poder predecir el comportamiento futuro que tendrá el sistema y de esa forma poder cumplir con las especificaciones del proyecto teniendo en cuenta las predicciones de potencia disponible y de consumo de energía, mejorando así el equilibrio y reduciendo el número de conexiones y desconexiones de los dispositivos.

El esquema de control se sugiere para conseguir los objetivos presentados en la Figura 4.1. El controlador produce dos aperturas de válvulas  $u_{H_2}$  y  $u_{O_2}$  llevando los valores entre 0 (mínima apertura) y 10 (máxima apertura). Los valores de control son computados para asegurar que:

$$P_{XI} \rightarrow P_{ref} \quad (4.1)$$

$$\Delta L \rightarrow 0 \quad (4.2)$$

En una operación normal, la presión se ajusta externamente para que siga suavemente la presión del tanque de almacenamiento  $P_{tank}$ . En consecuencia, la referencia para la presión  $P_{ref}$  se define como:

$$P_{ref} = P_{tank} + P_{gap} \quad \text{sujeto a} \quad \left| \frac{dP_{ref}}{dt} \right| < \beta \quad (4.3)$$

siendo  $\beta$  la tasa límite en kPa/s. Este límite de tasa asegura que un cambio repentino en la presión de almacenamiento no genera una variación excesiva en la presión a ambos lados de la membrana, con la consecuente contaminación cruzada. Además, la  $P_{gap}$  entre la de referencia y la del tanque que es de 50 kPa es necesaria para compensar la acción de las válvulas de retención.

La Figura 3.3 muestra el sistema basado en las ideas del MPC, donde el bloque de optimización recibe información del bloque del modelo (planta de electrólisis), que se encarga de calcular las predicciones de la salida de la planta en un horizonte  $H_p$  definido. Se utiliza un modelo para predecir las salidas futuras basándose en los valores pasados y actuales y en las acciones de control futuras óptimas propuestas.

Estas acciones son calculadas por el optimizador, teniendo en cuenta la función de coste (donde se considera el error de seguimiento futuro) así como las restricciones. Este optimizador se desarrollará en la sección 4.1.4.

Como se ha indicado anteriormente, en la electrólisis alcalina, una diferencia de presión entre ambas semiceldas genera el cruce de gases. Por lo tanto, el objetivo de control es mantener los niveles de solución líquida igualados en ambos tanques (medidos por LT1 y LT2 en la Figura 1.7) mientras que el  $H_2$  y el  $O_2$  son a una determinada presión (medida por PT1 y PT2 en la Figura 1.7). Este objetivo se consigue actuando sobre dos válvulas de entrada motorizadas (VMO y VMH en la Figura 1.8). Los rangos de funcionamiento para presión  $P_{tank}$  y la corriente eléctrica  $I$  son de 0 a 7000 kPa y de 10 a 50 A, respectivamente.

El algoritmo MPC desarrollado en esta trabajo sigue el método Linear Model Predictive Control (o simplemente MPC) con restricciones que ofrece una alternativa para resolver el problema de optimización lineal utilizando optimizadores convencionales, como la Programación Cuadrática (QP, siglas en inglés) o soluciones de programación lineal. Únicamente tiene en cuenta los primeros términos de control del horizonte  $H_p$ . Por lo tanto, se supone que el proceso es estable y sin integradores. La optimización (numérica por la presencia de restricciones) se realiza en cada instante de muestreo y el valor de la acción de control actual se envía al proceso. Los inconvenientes de este método son el tamaño del modelo de proceso requerido y también la incapacidad de trabajar con procesos inestables Camacho and Bordons (2004).

#### 4.1.1. Estrategia de control

En este capítulo, hemos puesto a prueba la estrategia de control en el modelo lineal. La respuesta de un sistema dinámico lineal en espacio de estados Kalman and Bucy (1961), puede ser representada como las siguientes matrices discretas del espacio de estados:

$$x_{k+1} = Ax_k + Bu_k y_k = Cx_k \quad (4.4)$$

Y en nuestro caso, para poder hacer un buen uso del controlador, debemos separar las variables controladas entre las variables de entrada que representan las válvulas y las variables que equivalen a las perturbaciones, esto lo definimos:

$$\begin{aligned} x(k+1) &= Ax(k) + B_u u(k) + B_d d(k) \\ y(k) &= Cx(k) \end{aligned}$$

Siendo  $x(k)$  y  $x(k+1)$  el estado actual y futuro del controlador. Además, el vector  $u(k)$  representa las variables manipulables,  $d$  se interpreta como el vector de las perturbaciones y el vector  $y$  representa la salida medida del proceso. Finalmente, las matrices  $A, B, C, D$

están definidas para cada estrategia de control. Además, la longitud del vector de estados depende del controlador. Estos parámetros resumen el objetivo final de los controladores: minimizar la diferencia en los niveles y presiones de los tanques para reducir la contaminación por el gas cruzado en los gases producidos.

#### 4.1.2. Objetivos de control

- **Objetivo 1:** Para maximizar la producción de hidrógeno, se minimiza la diferencia entre los valores de la predicción y sus valores deseados para el electrolizador para todos los dispositivos a lo largo del horizonte de predicción ( $H_p$ ).
- **Objetivo 2:** Mantener preferiblemente la presión del tanque lo más constante posible para evitar cualquier problema en la eficiencia del sistema.
- **Objetivo 3:** Para maximizar el funcionamiento de los dispositivos y evitar conexiones y desconexiones innecesarias, el controlador debe predecir en la medida de lo posible las fluctuaciones en la corriente eléctrica lo largo de  $H_p$ .

#### 4.1.3. Función objetivo del control predictivo

La función objetivo estándar de un control predictivo viene dado por una función multi-objetivo que busca en el primer sumatorio minimizar el error cuadrático provocado por la diferencia entre el setpoint y la salida del proceso y el segundo sumatorio busca minimizar el esfuerzo de control aplicado sobre el sistema con el fin de gastar menos energía para llegar al punto deseado. Así, tal función se puede expresar como

$$J = \sum_{i=1}^{H_p} \|x_{k+i}\|_Q^2 + \sum_{i=1}^{H_p-1} \|u_{k+i}\|_R^2, \quad (4.5)$$

donde  $H_p$  es conocido como el horizonte de predicción,  $y$  es la salida del proceso,  $Q$  es una matriz que pondera la importancia que se desea dar a la minimización del error,  $u$  es la acción de control, y  $R$  es una matriz que pondera la importancia que se desea dar al esfuerzo de control.

Implícitamente se asume que todas las variables están escritas en función del estado deseado. La solución a este problema se llamó Linear Quadratic Gaussian (LQG). Un problema cuadrático QP es uno de los problemas más estudiados, el único requisito es que el hessiano de este problema debe ser semidefinido positivo para que el problema sea convexo y por lo tanto tenga solución.

La función objetivo penaliza las desviaciones con respecto al cuadrado del estado deseado y el valor al cuadrado de las variables manipulables. Se resuelve en cada tiempo de muestreo para maximizar la producción, sin exceso de conexiones/desconexiones. Entonces para este trabajo tenemos tres variables a ponderar que afectan al sistema y la función de coste en discreto queda:

$$J = \sum_{i=1}^{H_p} (\|\Delta L_{k+i}\|_Q^2 + \sum_{i=1}^{H_p} \|P_{tank,k+i} - P_{ref}\|_t R^2) + \sum_{i=1}^{H_p-1} \|u_{k+i}\|_S^2$$



donde  $\Delta L$  es la primera salida del sistema y debe tener una variación máxima de 4 %, el segundo término implica la variación entre la presión de salida  $P_{H_2}$ , que a la vez es la presión de referencia para la presión de entrada  $P_{tank}$ , en un caso ideal debería tener una diferencia igual a cero o en su defecto de  $\pm 50$  kPa y  $u$  es la acción de control en las dos válvulas.

El primer término de la ecuación se utiliza para el Objetivo 1, mientras que el segundo término de esta ecuación pretende alcanzar el Objetivo 2 de la Sección 4.1.

#### 4.1.4. Problema de optimización

Para resolver este problema, las predicciones de la producción de hidrógeno se expresan en función de las acciones de control futuras  $Q, R, S$ , y de los valores pasados de estas entradas y de las salidas  $\Delta L$  y  $P_{H_2}$ . Así, utilizando la ecuación con todas las restricciones del sistema y los modelos del electrolizador donde la última restricción pretende resolver el Objetivo 3, se puede demostrar que el problema de optimización a resolver en cada tiempo de muestreo es

$$\min_u \sum_{i=1}^{H_p} J_i(k)$$

sujeto a

$$u_{\min} \leq u(k) \leq u_{\max},$$

con  $Q, R, S \in (0, 1)$ ,

$$J_1 = \|\Delta L\|,$$

$$J_2 = \|P_{tank} - P_{ref}\|$$

$$J_3 = \|u_k\|, \forall k = 0, \dots, H_p - 1.$$

#### 4.1.5. Restricciones

La mayoría de las restricciones se definen con la siguiente descripción:

$$Wu \leq w + Vx(k)$$

donde  $W, w$  y  $V$  son matrices que dependen de parámetros del proceso y de sus límites y solamente se calcularán cuando estos o los límites establecidos varíen.  $Vx(k)$  depende del estado del proceso y se recalculará en cada instante de muestreo. El problema completo se denomina problema de programación cuadrática lineal (LQR) y tiene la forma:

$$J = \sum_{i=1}^{H_p} \|J_1\|_Q^2 + \sum_{i=1}^{H_p} \|J_2\|_R^2 + \sum_{i=1}^{H_p-1} \|J_3\|_S^2$$

Para cumplir con los objetivos hay que tener en cuenta las siguientes restricciones, donde en cada muestra (k), tenemos que:

$$\begin{aligned}x_{k+1} &= f(x_k, u_k, d_k) \\y_k &= g(x_k, u_k) \\x(k|k) &= x(0|k)\end{aligned}$$

sujeto a

$$\begin{aligned}u_{min} &\leq u(k+j|k) \leq u_{max}, \\y_{min} &\leq y(k+j|k) \leq y_{max}, \\x_{min} &\leq x(k+j|k) \leq x_{max}.\end{aligned}$$

siendo  $x_k$  el estado actual y  $x_{k+1}$  el estado siguiente,  $u_k$  la entrada a controlar,  $d_k$  la entrada de la perturbación y  $x(0|k)$  el vector de estados estimados, que será el valor inicial para el LQR.

Según los datos de las simulaciones de David (2021) estos serían los valores máximos y mínimos obtenidos. La restricción dominante es la diferencia de presión respecto de la referencia. Así, las restricciones muestran esta idea para todos los casos en los que la variable binaria puede ser 0 ó 1 y  $j = 1, \dots, H_p-1$ .

El escalado de las variables facilitará la elección de ponderación del controlador. Típicamente se escala las entradas y salidas de forma que tengan un rango entre el 0 y el 100 por ciento. Las restricciones definidas en las ecuaciones que ahora son lineales en las variables de decisión hacen que el problema de optimización puede resolverse mediante algún LQR Rolf Findeisen (2006).

A partir de la combinación de las entradas al sistema se pueden conocer las presiones máximas que puede llegar a producir el sistema y la máxima variación de nivel del tanque de hidrógeno.

Proponemos que el problema MPC de minimización de la función de coste puede transformarse en el siguiente QP. Esta ecuación se resuelve en cada iteración utilizando con la estimación de horizonte creciente:

$$\text{mín } J = \sum_{i=1}^{H_p} \|J1\|_Q^2 + \sum_{i=1}^{H_p} \|J2\|_R^2 + \sum_{i=1}^{H_p-1} \|J3\|_S^2$$

sujeto a

$$\begin{aligned}-3 \text{ mm} &\leq J_1 \leq 3 \text{ mm} \\1000 \text{ kPa} &\leq J_2 \leq 7000 \text{ kPa} \\0 \text{ vueltas} &\leq J_3 \leq 9 \text{ vueltas}\end{aligned}$$

## Capítulo 5

# Simulaciones y resultados

Las simulaciones numéricas han sido realizadas con el controlador diseñado anteriormente basado en el COM presentado, combinado con el modelo completamente no lineal del electrolizador, que llama al SOM. La simulaciones has sido hechas en Matlab/ Simulink con la herramienta YALMIP.

### 5.1. YALMIP: herramienta de optimización convexa

YALMIP se utiliza como un complemento (toolbox) gratuito para Matlab, y sirve para modelar problemas de optimización convexos (aunque también se utiliza para problemas no convexos).

El lenguaje es consistente con la sintaxis de Matlab, por lo que es muy fácil de aprender para usuarios familiarizados con este entorno. Implementa una gran cantidad de recursos de modelado, permitiendo que el usuario se concentre en el modelo a alto nivel, mientras que YALMIP se ocupa del modelado a bajo nivel para obtener modelos eficientes y numéricamente satisfactorios.

Soporta varios tipos de problemas lineales, cuadráticos, cónicos de orden 2, semidefinidos, geométricos, y otros más como por ejemplo los problemas cónicos con mezcla de variables enteras. También se puede usar YALMIP para calcular soluciones explícitas mediante el interfaz "MultiParametric Toolbox" (MPT), este está orientado a controladores con restricciones lineales, no lineales y sistemas híbridos.

Se han considerado varios escenarios y se discutirán más abajo. En la primera situación, ocurre mientras se aplica una corriente eléctrica conocida a lo largo de la simulación mientras la presión del tanque es constante. En el segundo escenario, el electrolizador produce gases a presión constante pero la corriente eléctrica fluctúa, como si fuera proporcionada por fuentes de energía renovables.

Para cada uno de los casos, se analiza la función de coste, considerando diversas penalizaciones en el error de seguimiento y en la minimización de la diferencia del nivel del tanque de hidrógeno con el de oxígeno y la presión del tanque de hidrógeno con la presión de referencia para poder minimizar el coste de la producción de hidrogeno.

Aunque el objetivo final es maximizar la pureza de los gases, esto es una consecuencia de la presión y la concentración a ambos lados de la membrana. Por lo tanto, las concentraciones de impurezas no se tienen en cuenta para el controlador, cuyo objetivo, en efecto, será mantener igualados los niveles de líquido y la presión del sistema.

## 5.2. Indicadores clave de rendimiento y parámetros de control

Se utilizan índices de desempeño (KPI) para medir aquellas métricas más relevantes para la estrategia, que determinan el éxito o no de las ponderaciones en la función de coste, el máximo error de la referencia de presión y la diferencia de nivel, también se han medido distintos tiempos de simulación. Los KPIs que se van a utilizar se definen como:

$$\begin{aligned}
 KPI1 &= |max(\Delta L)| \\
 KPI2 &= \sum_{k=0}^{H_s} k * \left| \frac{P_{tank}(k) - P_{tank}(k-1)}{2} * T_s \right| \\
 KPI3 &= \sum_{i=1}^{H_s} (t_{it}) \\
 KPI4 &= máx(t_{it}) \\
 KPI5 &= \frac{\sum_{i=1}^{H_s} (t_{it})}{n_{t_{it}}}
 \end{aligned}$$

donde  $t_{it}$  es el tiempo que tarda el problema de optimización en resolverse en una iteración de tiempo y  $n_{t_{it}}$  es el número de iteraciones que se han realizado y  $T_s$  es el tiempo de muestreo de 0.25 s.

Para el segundo índice de desempeño, se ha utilizado el criterio Integral del Error Absoluto multiplicado por el Tiempo (ITAE, siglas en inglés) que ha sido definido en su aproximación trapezoidal discreta. El ITAE integra el error absoluto multiplicado por el tiempo a lo largo del tiempo. Lo que hace es ponderar mucho más los errores que existen después de mucho tiempo que los que existen al principio de la respuesta. El ajuste ITAE produce sistemas que se asientan mucho más rápidamente que los otros dos métodos de ajuste. La desventaja de esto es que la sintonización ITAE también produce sistemas con una respuesta inicial lenta (necesaria para evitar una oscilación sostenida). (Giraldo, 2021).

Utilizando estos indicadores se pueden ver los distintos parámetros del MPC, como son el horizonte de predicción más adecuado, el indicador de rendimiento de los tiempos de cálculo y el paso de integración, además esto se hará con distintos tiempos de simulación y valores de ponderación tal y como se pueden ver en la tabla y, en consecuencia, decidir el valor más conveniente.

### 5.3. Resultados

#### Escenario 1

En este primer escenario, se ha tomado varios horizontes cada uno con diversas ponderaciones para una I variable a lo largo del tiempo de manera que actúa como una entrada escalón con distintas amplitudes.

Lo primero que hay que fijarse en la Tabla 5.1 es en la sintonía que mejor se comporta para cada horizonte de predicción  $H_p$ . Para ello, hay que mirar los índices de desempeño más importantes que son KPI 1 y KPI 2.

El primero, que indica la variación de nivel de los tanques tiene en todas las simulaciones un valor del orden de micrómetros y como podemos ver las ponderaciones de la función de costes que mejor predicción tienen son distintas para cada  $H_p$ , lo que no podemos decir todavía cual es mejor. Por tanto, para decidirlo tendremos más en cuenta el segundo indicador de rendimiento que a parte de darnos una información más precisa, es clave en esta estrategia ya que la pureza del hidrógeno se basa sobre todo en el control de la presión.

Entonces, en todos los distintos horizontes, hay que mirar el mejor resultado que tiene KPI 2, el máximo error de presión frente a la de referencia, por esta razón, la compensación que sobresale es  $Q = 0.45$ ,  $R = 0.55$  y  $S = 0.05$ , además, también se puede observar que cuanto mayor es el horizonte, menor son los errores, pasamos de un error de  $2.6296 \times 10^5$  a uno de  $1.5546 \times 10^5$ . Por tanto, podemos afirmar por ahora que el controlador predictivo es eficaz para grandes horizontes.

Algo a aclarar en estos resultados son los valores del segundo índice de desempeño. El Criterio Integral del Error Absoluto multiplicado por el Tiempo (ITAE, siglas en inglés) es una medida que se utiliza para suprimir los errores que persisten en el tiempo, por eso cuanto mayor es el horizonte, menor es el KPI 2. Al estar el valor absoluto del error multiplicado por el tiempo, los errores grandes se multiplican por tiempos pequeños dando poco peso a estos y gran peso a valores bajos de error, de ahí que se muestren unos valores tan grandes en este indicador.

En cuanto a coste computacional, evidentemente cuando mayor es el horizonte de predicción, mayor son los tiempos de simulación y los KPIs correspondientes, KPI 3, KPI 4 y KPI 5.

El tercer índice es la suma total de tiempo por iteración de cada horizonte con distintas compensaciones, tardando el mayor de ellos más de 1 minuto con un horizonte de simulación de 2 minutos en reaccionar a la perturbación y como se puede observa el mejor valor es el que tiene un peso de 20 % en la acción de control de las válvulas mientras que para el KPI 4 este valor puede bajar en horizontes pequeños pero mantenerse en el mismo valor para límites de predicción altos.

Sin embargo, para la media de los tiempos por iteración tenemos unos valores parecidos a KPI 3. Para  $H_p = 2$  estimamos un valor mínimo de un 5 % de ponderación para las válvulas y para valores más grandes este valor aumentaría hasta un 20 %.

Tabla 5.1: Resultados de la simulación para una corriente eléctrica variable

| $H_p$ | Sintonía        | Corriente no constante        |                            |          |        |        |
|-------|-----------------|-------------------------------|----------------------------|----------|--------|--------|
|       |                 | KPI 1<br>( $\times 10^{-3}$ ) | KPI 2<br>( $\times 10^5$ ) | KPI 3    | KPI 4  | KPI 5  |
| 2     | 0'3, 0'5, 0'2   | 0.1828                        | 2.7377                     | 34.2460  | 5.5306 | 0.0684 |
|       | 0'4, 0'4, 0'2   | 0.1694                        | 2.7515                     | 27.8169  | 0.0898 | 0.0555 |
|       | 0'4, 0'45, 0'15 | 0.1590                        | 2.7370                     | 31.0701  | 0.0978 | 0.0620 |
|       | 0'4, 0'55, 0'05 | 0.1536                        | 2.6296                     | 26.8667  | 0.0625 | 0.0536 |
|       | 0'45, 0'45, 0'1 | 0.1041                        | 2.7188                     | 27.2423  | 0.0808 | 0.0544 |
|       | 0'5, 0'4, 0'1   | 0.0944                        | 2.7239                     | 27.5308  | 0.0822 | 0.0550 |
| 4     | 0'3, 0'5, 0'2   | 0.1061                        | 2.6748                     | 28.9287  | 1.6598 | 0.0577 |
|       | 0'4, 0'4, 0'2   | 0.1092                        | 2.6963                     | 27.7121  | 0.0654 | 0.0553 |
|       | 0'4, 0'45, 0'15 | 0.1238                        | 2.6552                     | 28.3291  | 0.0844 | 0.0565 |
|       | 0'4, 0'55, 0'05 | 0.1956                        | 2.3781                     | 28.8176  | 0.0763 | 0.0575 |
|       | 0'45, 0'45, 0'1 | 0.1898                        | 2.6030                     | 30.5848  | 0.0720 | 0.0610 |
|       | 0'5, 0'4, 0'1   | 0.1921                        | 2.6183                     | 33.4471  | 0.1000 | 0.0668 |
| 6     | 0'3, 0'5, 0'2   | 0.2078                        | 2.6110                     | 38.7724  | 2.2999 | 0.0774 |
|       | 0'4, 0'4, 0'2   | 0.2135                        | 2.6435                     | 39.1090  | 0.1233 | 0.0781 |
|       | 0'4, 0'45, 0'15 | 0.2410                        | 2.5789                     | 41.3296  | 0.1179 | 0.0825 |
|       | 0'4, 0'55, 0'05 | 0.3785                        | 2.1731                     | 43.6652  | 0.1305 | 0.0872 |
|       | 0'45, 0'45, 0'1 | 0.3930                        | 2.4965                     | 48.5459  | 0.1441 | 0.0969 |
|       | 0'5, 0'4, 0'1   | 0.3994                        | 2.5214                     | 50.6414  | 0.1476 | 0.1011 |
| 10    | 0'3, 0'5, 0'2   | 0.4026                        | 2.4926                     | 58.1216  | 2.3129 | 0.1160 |
|       | 0'4, 0'4, 0'2   | 0.3891                        | 2.5456                     | 62.0317  | 0.1756 | 0.1238 |
|       | 0'4, 0'45, 0'15 | 0.4081                        | 2.4417                     | 68.3305  | 0.2239 | 0.1364 |
|       | 0'4, 0'55, 0'05 | 0.5485                        | 1.8530                     | 74.0337  | 0.2002 | 0.1478 |
|       | 0'45, 0'45, 0'1 | 0.5123                        | 2.3096                     | 88.1819  | 0.2259 | 0.1760 |
|       | 0'5, 0'4, 0'1   | 0.5070                        | 2.3510                     | 94.1964  | 0.3868 | 0.1880 |
| 15    | 0'3, 0'5, 0'2   | 0.5084                        | 2.3613                     | 103.1139 | 0.2526 | 0.2058 |
|       | 0'4, 0'4, 0'2   | 0.4952                        | 2.4340                     | 117.6025 | 0.3046 | 0.2347 |
|       | 0'4, 0'45, 0'15 | 0.5279                        | 2.2908                     | 133.2273 | 0.3735 | 0.2659 |
|       | 0'4, 0'55, 0'05 | 0.7085                        | 1.5546                     | 148.3403 | 0.3272 | 0.2961 |
|       | 0'45, 0'45, 0'1 | 0.6768                        | 2.1107                     | 176.9284 | 0.7141 | 0.3532 |
|       | 0'5, 0'4, 0'1   | 0.6745                        | 2.1676                     | 190.6983 | 0.4206 | 0.3806 |

## Escenario 2

En el siguiente escenario, tenemos ahora que la fluctuación de la corriente eléctrica es conocida en un punto concreto y por tanto, el controlador la tomará como constante. Entonces, en este supuesto la intensidad es de 10 A.

En la Tabla 5.2, empezamos analizando el primer indicador, donde podemos ver que las

Tabla 5.2: Resultados de la simulación para una corriente eléctrica de 10 A

| $H_p$ | Sintonía        | Corriente constante |                            |          |        |        |
|-------|-----------------|---------------------|----------------------------|----------|--------|--------|
|       |                 | KPI 1               | KPI 2<br>( $\times 10^5$ ) | KPI 3    | KPI 4  | KPI 5  |
| 2     | 0'3, 0'5, 0'2   | 0,0004              | 9,624                      | 29,0563  | 0,125  | 0,058  |
|       | 0'4, 0'4, 0'2   | 0,0003              | 1,004                      | 34,3947  | 0,1116 | 0,0687 |
|       | 0'4, 0'45, 0'15 | 0,0001              | 9,943                      | 36,8801  | 0,1198 | 0,0736 |
|       | 0'4, 0'55, 0'05 | -0,0001             | 9,211                      | 36,9076  | 0,1242 | 0,0737 |
|       | 0'45, 0'45, 0'1 | -0,0008             | 9,772                      | 33,348   | 0,1575 | 0,0666 |
|       | 0'5, 0'4, 0'1   | -0,001              | 9,839                      | 33,8381  | 0,1662 | 0,0675 |
| 4     | 0'3, 0'5, 0'2   | -0,001              | 9,517                      | 35,6014  | 2,2873 | 0,0711 |
|       | 0'4, 0'4, 0'2   | -0,0009             | 9,642                      | 34,6736  | 0,114  | 0,0692 |
|       | 0'4, 0'45, 0'15 | -0,0007             | 9,377                      | 34,6866  | 0,1498 | 0,0692 |
|       | 0'4, 0'55, 0'05 | -0,0002             | 7,646                      | 39,3792  | 0,2063 | 0,0786 |
|       | 0'45, 0'45, 0'1 | 0,0001              | 8,943                      | 38,1047  | 0,1215 | 0,0761 |
|       | 0'5, 0'4, 0'1   | 0,0002              | 9,100                      | 42,1236  | 0,1616 | 0,0841 |
| 6     | 0'3, 0'5, 0'2   | 0,0005              | 9,073                      | 46,8111  | 0,1861 | 0,0934 |
|       | 0'4, 0'4, 0'2   | 0,0006              | 9,279                      | 48,8024  | 0,17   | 0,0974 |
|       | 0'4, 0'45, 0'15 | 0,0009              | 8,879                      | 50,1434  | 0,1466 | 0,1001 |
|       | 0'4, 0'55, 0'05 | 0,0021              | 6,544                      | 54,4922  | 0,2196 | 0,1088 |
|       | 0'45, 0'45, 0'1 | 0,003               | 8,261                      | 59,4407  | 0,2304 | 0,1186 |
|       | 0'5, 0'4, 0'1   | 0,0032              | 8,476                      | 62,0655  | 0,2067 | 0,1239 |
| 10    | 0'3, 0'5, 0'2   | 0,0032              | 8,350                      | 72,323   | 2,3368 | 0,1444 |
|       | 0'4, 0'4, 0'2   | 0,0032              | 8,660                      | 74,316   | 0,2761 | 0,1483 |
|       | 0'4, 0'45, 0'15 | 0,0031              | 8,061                      | 80,9067  | 0,3516 | 0,1615 |
|       | 0'4, 0'55, 0'05 | 0,004               | 5,110                      | 94,2102  | 0,3716 | 0,188  |
|       | 0'45, 0'45, 0'1 | 0,0045              | 7,218                      | 108,4168 | 0,3364 | 0,2164 |
|       | 0'5, 0'4, 0'1   | 0,0044              | 7,497                      | 112,6884 | 0,2851 | 0,2249 |
| 15    | 0'3, 0'5, 0'2   | 0,0045              | 7,618                      | 130,5277 | 2,4958 | 0,2605 |
|       | 0'4, 0'4, 0'2   | 0,0045              | 8,026                      | 149,5587 | 0,6163 | 0,2985 |
|       | 0'4, 0'45, 0'15 | 0,0047              | 7,262                      | 179,8051 | 3,3126 | 0,3589 |
|       | 0'4, 0'55, 0'05 | 0,0058              | 4,017                      | 175,9443 | 0,4584 | 0,3512 |
|       | 0'45, 0'45, 0'1 | 0,0065              | 6,270                      | 205,2111 | 0,5068 | 0,4096 |
|       | 0'5, 0'4, 0'1   | 0,0066              | 6,584                      | 223,6079 | 0,5901 | 0,4463 |

sintonías que ofrecen una mejor respuesta varían en comparación con el escenario anterior, pues aquí no tenemos unos pesos que estén aventajados frente a otros sin importar valor del horizonte de predicción, además, tenemos que la variación de nivel tiene un orden de milímetros, bastante mayor que los resultados anteriores.

Por tanto, de nuevo tendremos que mirar el siguiente índice, y como se puede apreciar,

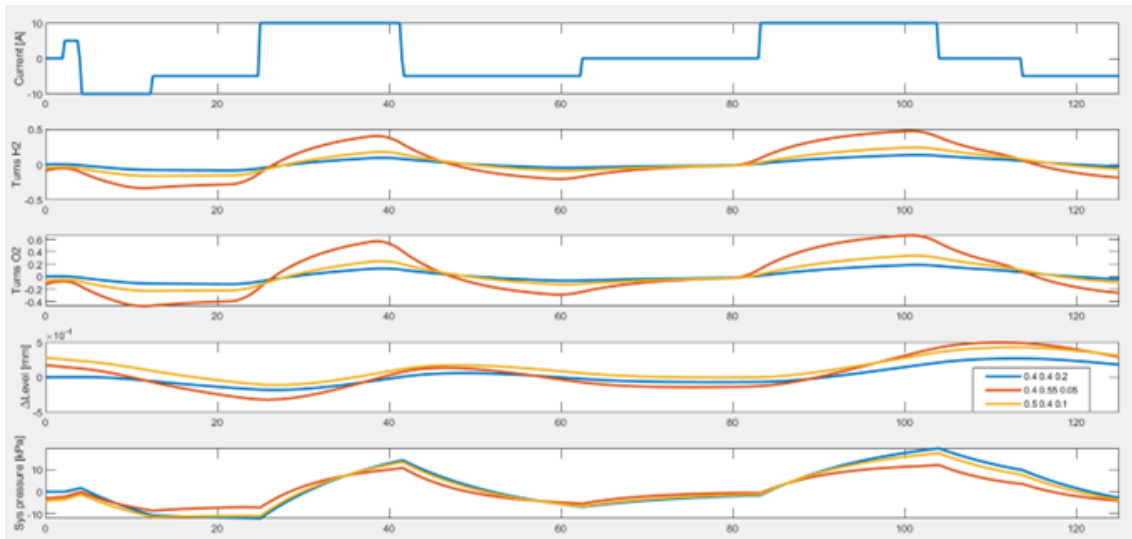


Figura 5.1: Simulación con  $H_p = 15$  y distintas ponderaciones para una  $I$  no constante

para el primero horizonte se necesita una acción de control del 20% en comparación con los demás resultados donde solo haría falta un 5%, siendo así, los pesos adecuados  $Q = 0.4$ ,  $R = 0.55$  y  $S = 0.05$  que es el mejor rendimiento que teníamos en el anterior caso en cuanto al error máximo de presión, pero no tanto para la variación de nivel.

En cuanto a los índices de desempeño que miden los tiempos se puede observar que estos son ligeramente superiores en cada iteración respecto a la Tabla 5.1 pero al igual que esta los resultados de KPI 3 y KPI 5 coinciden en las mejores sintonías en cada horizonte. Y al igual que antes hay una pequeña disonancia en cuanto a estos dos indicadores y el KPI 4 en el último  $H_p = 15$ .

Lo más importante a destacar aquí es que como habíamos previsto, el controlador predictivo basado en modelo es bastante más eficiente que si no pronosticáramos las fluctuaciones de la intensidad de corriente eléctrica.

Se puede enfatizar aquí que para la compensación que minimiza más el error de referencia de la presión, la variación de nivel de los tanques es la mayor y viceversa. Además, la variación entre los resultados del KPI 2 entre la mejor y peor ponderación es más amplia, pasando de  $8,026 \times 10^5$  a  $4,017 \times 10^5$  en comparación con la diferencia de un punto entre los resultados anteriores.

Como se puede observar en la Figura 5.1, se ha representado la ponderación con mayor KPI 2 (en azul), la que tiene menor KPI 2 (en rojo) y un valor entre medias pero con el mayor tiempo de iteración KPI 3 (en amarillo). En la línea azul se compensa demás las válvulas y apenas responden y en consecuencia las variaciones en la presión son mayores que en las otras dos simulaciones llegando a un máximo de 20 kPa frente a los 10 kPa que tiene la mejor de las tres respuestas.

También podemos apreciar que en general, para diferencias pequeñas en la fluctuación de corriente, puesto que la acción de control hace que las válvulas varíen media vuelta aproximadamente y además estas tardan varios segundos en percatarse de dicha diferen-



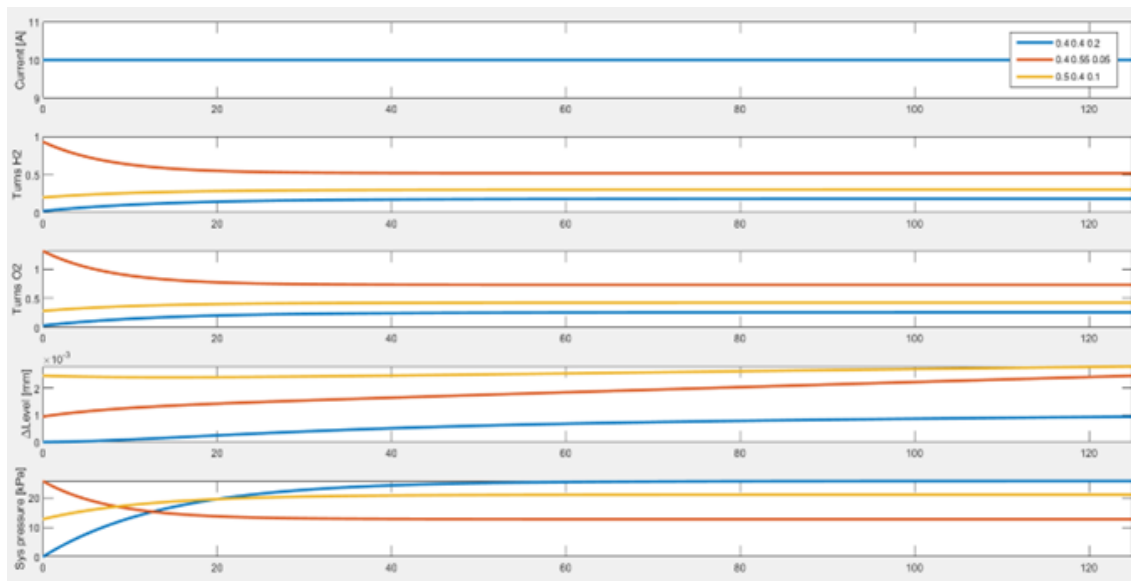


Figura 5.2: Simulación con  $H_p = 15$  y distintas ponderaciones para una  $I = 10$  A

cia. Dado que las modificaciones en la presión y en el nivel del tanque son tan pequeñas que prácticamente no hace falta actuar ante ellas.

Otro dato interesante que se puede sacar de estas gráficas es que la válvula del tanque de oxígeno se abre más que la del hidrógeno, esto es debido a que es más importante que entre hidrógeno en el tanque de oxígeno que viceversa para así mantener el contenido del tanque lo más puro posible.

En la Figura 5.2 tenemos distintas simulaciones con las sintonías que hemos probado en la figura anterior, aquí la presión varía más, entre 10 y 25 kPa, lo que confirma la teoría que a menor error entre la presión de salida y la de referencia, mayor es el criterio ITAE.

Se puede apreciar al principio que la entrada no está compensada hasta pasar unos segundos donde ya se estabiliza. La línea roja representa un 0.18 % más en la referencia frente a la variación del 0.30 % y 0.36 % de las líneas azul y amarilla respectivamente.

Se observa que en la línea roja es donde más se intenta compensar los cambios de la presión y la variación de nivel, de este modo consigue ser la que antes estabiliza estos valores. Mientras que las otras dos respuestas tardan varios segundos más en nivelar las respuestas.

Como últimas simulaciones, se han estudiado las respuestas del sistema con un horizonte de predicción más alto que en las simulaciones anteriores,  $H_p = 30$ . Se han hecho dos simulaciones más, las dos de ellas con la corriente eléctrica no constante pero la diferencia entre ellas está en que la primera la perturbación cambia de valor después de 30 segundos en cada salto y la segunda cambia de valor como habíamos hecho hasta ahora en rangos menores de 30.

con  $\tau$  siendo la constante de tiempo del sistema. Este valor se ha escogido puesto que se ha observado que la respuesta del sistema converge a un valor constante en este instante de

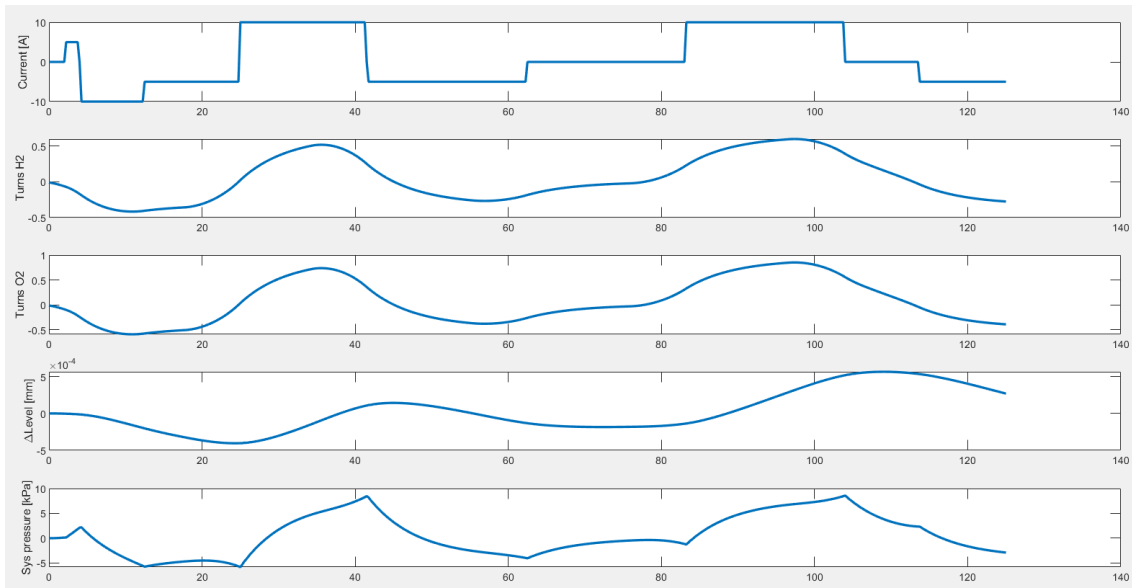


Figura 5.3: Simulación con  $H_p = 30$  e  $I$  no constante con  $\tau < 30$

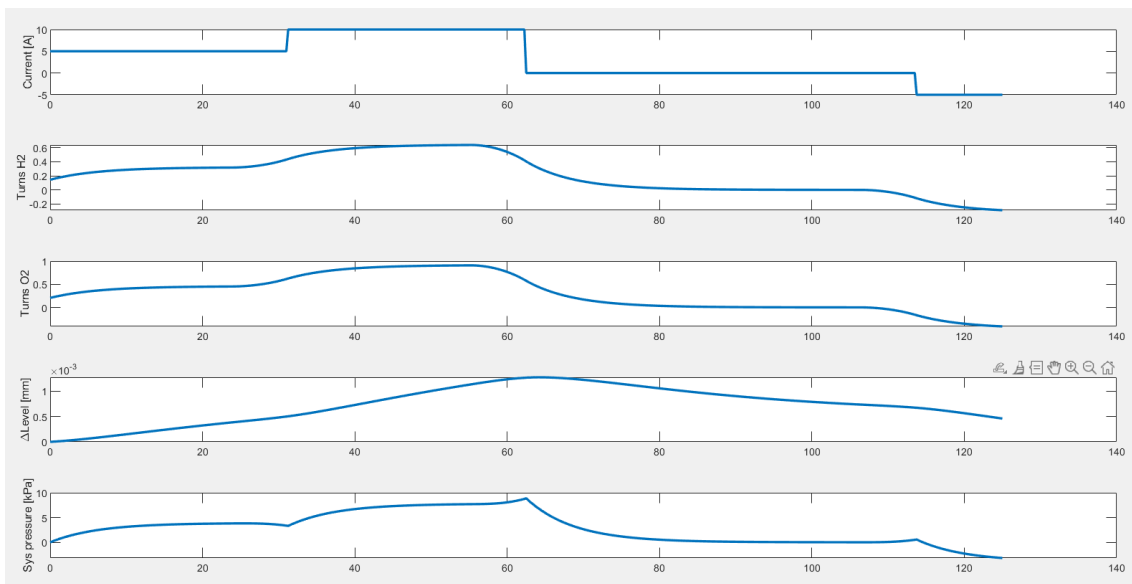


Figura 5.4: Simulación con  $H_p = 30$  e  $I$  no constante con  $\tau > 30$

tiempo, es decir, en estas simulaciones se ha jugado con el tiempo en el que  $I$  es constante, con unos valores de  $\pm 30$  para ver como se comporta el sistema.

En la Figura 5.3 los parámetros varían como habíamos estado viendo en las simulaciones anteriores de la Figura 5.1.

Sin embargo, como podemos ver en la Figura 5.4, la acción de control en la válvula de oxígeno varía igual que en los ensayos anteriores ante el mismo valor de perturbación pero como vemos, esto no se refleja en la respuesta de la variación de nivel y presión del sistema, puesto que tarda todo el rango donde la perturbación es constante en poder corregir dichos cambios.

Tabla 5.3: Resultados de la simulación para  $H_p = 30$  y una corriente eléctrica no constante

|   | KPI 1  | KPI 2 ( $\times 10^5$ ) | KPI 3   | KPI 4  | KPI 5  |
|---|--------|-------------------------|---------|--------|--------|
| <b>I variable con <math>\tau &lt; 30</math></b> | 0,0006 | 1,0481                  | 65,1584 | 0,3353 | 0,1301 |
| <b>I variable con <math>\tau &gt; 30</math></b> | 0,0013 | 0.7494                  | 72,4841 | 2,9613 | 0,1447 |

Para finalizar, lo que se ha podido ver en las Figuras 5.3 y 5.4 se recoge en la Tabla 5.3 donde de manera más clara se puede observar que la respuesta de la primera figura el error máximo de presión ante referencia es del orden de  $10^5$  frente al otro resultado que es más pequeño, es decir, el primer error, si nos pasamos a las gráficas de las figuras, es menor que el segundo.

Igualmente como se ha explicado antes, en los índices de desempeño de los tiempos de iteración se puede apreciar que KPI 3 y KPI 4, que indican el tiempo total de iteración y el valor máximo de esta respectivamente, son mucho mayores para  $\tau > 30$ , en otras palabras, el modelo del controlador tarda más en actuar frente a las perturbaciones que en simulaciones anteriores.



## Capítulo 6

# Análisis Económico

En esta sección, se va presentar el resumen del coste total de este proyecto. Los costes considerados son aproximados y variables. Una especial atención es que el coste se ha reducido casi un 99.99 % por el hecho de que la autora de este proyecto es estudiante universitaria, por lo que este proyecto se toma como aprendizaje. Otra consideración importante es que el software usado se provee gratuitamente gracias a las licencias que se ofrece a los estudiantes de la universidad durante la etapa de formación. En este capítulo, contemplaremos el posible coste total de realizar el proyecto, desglosando el gasto en equipamiento, licencias y recursos humanos utilizados durante la realización del mismo.

El sueldo del estudiante de realizar el trabajo de fin de grado (TFG) es de 9,5 €/hora, que es el precio orientativo que fija la Universidad Politécnica de Cataluña (UPC) como remuneración para el estudiante durante la realización de un convenio de prácticas en una empresa. A grosso modo, la Tabla 6.1 refleja los costes de las tareas realizadas y de los recursos utilizados. Estos datos son estimatorios, puesto que no existe coste real, salvo el coste del ordenador para poder dar uso a MATLAB y así poder realizar los correspondientes cálculos y simulaciones del proyecto. Por lo demás, se plantean costes aproximados, en función de los costes actuales de las licencias de los programas y de las horas empleadas para la realización de las tareas.

Tabla 6.1: Análisis de costes

| Recursos           | Horas                   | Coste/persona €/h | Coste estimado €/h | Coste real \€ |   |
|--------------------|-------------------------|-------------------|--------------------|---------------|---|
| Personal           | Preparación             | 60                | 9,50               | 570,00        | - |
|                    | Diseño del modelo       | 30                | 9,50               | 285,00        | - |
|                    | Análisis de datos       | 58                | 9,50               | 551,00        | - |
|                    | Simulaciones            | 72                | 9,50               | 684,00        | - |
|                    | Distribución del diseño | 40                | 9,50               | 380,00        | - |
|                    | Tutorías                | 30                | 9,50               | 285,00        | - |
|                    | Defensa                 | 20                | 9,50               | 190,00        | - |
|                    | <b>Total</b>            | 300               |                    | 2.945,00      | - |
| Licencias          | MATLAB                  |                   | 2.000,00           | -             |   |
|                    | YALMPI Toolbox          |                   | -                  | -             |   |
| Material           | Ordenador portátil      |                   | 899,00             | -             |   |
|                    | <b>Total</b>            |                   | 2.899,00           | -             |   |
| Energía            | 200                     |                   | 74,47              | -             |   |
| <b>Coste total</b> |                         |                   | 5.918,47           | -             |   |



## Capítulo 7

# Impacto Medioambiental

La realización de este trabajo no ha tenido apenas impacto en el medio ambiente más que un pequeño coste eléctrico por la utilización del ordenador para los cálculos y simulaciones. Por tanto, en este capítulo trataré la huella ecológica que puede dejar un electroizador empleado en la producción de hidrógeno.

La producción industrial de hidrógeno mediante electrólisis de agua alcalina (AEL) es un método maduro de producción de hidrógeno. Uno de los argumentos a favor de la AEL cuando se suministra con energía renovable es su superioridad medioambiental frente a la producción convencional de hidrógeno a base de combustibles fósiles. Sin embargo, hoy en día, la electricidad de la red nacional se utiliza ampliamente para las aplicaciones industriales de la AEL. También, la prohibición de las membranas de amianto ha provocado un cambio en los patrones de rendimiento, lo que hace necesaria una evaluación detallada.

Hay estudios (Koj et al., 2017) que arrojan como resultado que la dependencia de la mayoría de los efectos medioambientales de la fase de funcionamiento y, concretamente la combinación de electricidad depende del lugar donde se obtiene esta, aunque la construcción de los componentes del sistema y la sustitución de las pilas de células contribuyen en menor medida. La electrólisis del agua es una de las opciones más probadas para obtener hidrógeno con bajas emisiones de carbono (Rashid et al., 2015) y desempeña un papel fundamental en la movilidad, la industria o los escenarios de almacenamiento de energía.

En cuanto a la construcción de plantas de AEL, los materiales níquel y politetrafluoroetileno en particular, utilizados para la fabricación de células, revelaron que contribuyen significativamente a la carga medioambiental. No obstante, el único impacto medioambiental que puede apreciarse es a partir del hidrógeno. Es una de las palabras mágicas en la lucha contra el cambio climático: hidrógeno. Este gas incoloro, inodoro y no tóxico —aunque muy inflamable—, es un componente menor de la atmósfera, ya que la inmensa mayoría del hidrógeno terrestre se encuentra en forma de agua y moléculas orgánicas. (Michalski et al., 2017).

El hidrógeno es, actualmente, una gran promesa de las energías renovables y ecológicas en contraposición a los combustibles fósiles: virtualmente inagotable, su combustión solo produce agua, con cero emisiones. Pero hay que decir también que los científicos llevan años advirtiendo que indirectamente el hidrógeno podría afectar al cambio climático: alertan que se ha disparado su presencia en la atmósfera, probablemente por su uso como dispensador de energía.

Aunque el atractivo por el hidrógeno ( $H_2$ ) como carburante ha ascendido en igualdad de condiciones a la gran preocupación por el cambio climático, los principios de esta tecnología se remontan a hace más de dos siglos, que es en definitiva de lo que trata este trabajo: la electrolisis del agua, separando sus dos elementos mediante electricidad. Esto se logró por primera vez entre finales del siglo XVIII y principios del XIX. Obtenido así el hidrógeno como materia prima, en 1838, el suizo Christian Friedrich Schönbein y el británico William Robert Grove (Yanes (2021)) demostraron el camino inverso, "el principio de la pila de combustible de hidrógeno", combinándolo con oxígeno para producir agua y electricidad.

Existen distintas fuentes de producción que han dado lugar a un código de colores. El llamado hidrógeno verde es el que se produce por la electrolisis del agua alimentada por energías renovables. Pero este método ideal es mucho más caro, por lo que actualmente la gran mayoría del hidrógeno que se produce en el mundo se hace por un proceso más económico que emplea gas natural como materia prima y sí genera dióxido de carbono ( $CO_2$ ) por la reacción del metano con el agua, llamado reformado con vapor"Yanes (2021). Este es el hidrógeno gris, que no aporta nada de cara a la atenuación del cambio climático. No obstante, el hidrógeno gris puede transformarse en azul cuando el dióxido de carbono ( $CO_2$ ) que se genera se almacena mediante tecnologías de almacenamiento de carbono (CCUS), aunque existen discrepancias entre los expertos no solo respecto a la viabilidad de estos sistemas, sino también sobre lo verde que puede llegar a ser el hidrógeno azul.

En los últimos meses, solo el 2 % del hidrógeno mundial es verde, y el 0,1 % procede de la electrolisis del agua Yanes (2021) dedicada a este cometido; el resto es un subproducto de procesos industriales como la producción de cloro y sosa cáustica.

Aunque el hidrógeno continúa siendo una fuente de energía minoritaria, desde hace años existe un interés generalizado en impulsar un economía de hidrógeno para la descarbonización en aquellas actividades y sectores en los que es muy difícil implementar una electrificación como alternativa a los carburantes fósiles. Países como EEUU, Canadá, Reino Unido, Alemania, Australia, Japón, Corea del Sur o la Unión Europea, en su conjunto, han promulgado estrategias energéticas para la transición al hidrógeno verde Yanes (2021).

Existe un plan para 2050, donde un conglomerado de compañías del sector, propulsará el hidrógeno para poder suplir más del 20 % de la demanda de energía global, lo que evitará la emisión acumulada de 80 gigatoneladas de dióxido de carbono ( $CO_2$ ).

Pero además de que la economía del hidrógeno aún tiene por delante numerosos obstáculos técnicos que solucionar, existe otro problema adicional puesto que se ha estudiado si el  $H_2$  tiene un efecto indirecto de calentamiento al afectar al principal desagüe de metano, y por tanto a la duración del metano, resume el químico atmosférico de la Universidad de Edimburgo, David Stevenson (Yanes, 2021).

En 2006, Stevenson y sus colaboradores, alertaron que el hidrógeno atmosférico secuestra estos radicales hidroxilo"que normalmente son responsables de la eliminación del metano, el segundo gas de efecto invernadero (GEI) más importante, 28 veces más potente que el dióxido de carbono ( $CO_2$ ) a 100 años. Y si disminuyen los hidroxilos, el metano dura más tiempo en la atmósfera.



Además, “también puede haber un cambio en el ozono troposférico asociado al hidrógeno que puede añadir al efecto indirecto de calentamiento, y que también está relacionado a la reacción del hidrógeno con el hidroxilo”, agrega a OpenMind Hannah Bryant Yanes (2021), estudiante de doctorado de Stevenson que centra su trabajo en los efectos atmosféricos y ambientales del hidrógeno.

El ozono es el tercer gas de efecto invernadero (GEI) más importante. Pero todavía hay una interferencia más cuando el hidrógeno se combina con el oxígeno en la estratosfera para formar vapor de agua, que también contribuye al calentamiento global. “Por lo tanto, una futura economía de hidrógeno tendría consecuencias de efecto invernadero y no estaría libre de perturbaciones climáticas”, concluyeron Stevenson y sus colaboradores en 2006 Yanes (2021).

Respecto a qué poder de calentamiento indirecto puede tener el hidrógeno, los modelos manejados por Stevenson y otros científicos estiman que puede ser cinco veces mayor que el del CO<sub>2</sub> a 100 años. Pero advierten de que aún hay incertidumbres. “Todavía no estamos muy seguros de las consecuencias ambientales de añadir más H<sub>2</sub> a la atmósfera”, dice Stevenson. “Probablemente todos estos efectos sean pequeños, pero aumentarán al hacerlo la perturbación de hidrógeno (H<sub>2</sub>)” Yanes (2021).

Pero solo existe una respuesta a la pregunta de cómo es posible que el hidrógeno verde nos lleve a esas consecuencias indeseables: fugas. Todo el proceso de producción, transporte, distribución, almacenamiento y utilización del hidrógeno está siendo afectado por posibles filtraciones que liberan el gas a la atmósfera.

Estas fugas son normales; en el caso del hidrógeno azul, la fuga del metano empleado para producirlo se considera su principal inconveniente. Pero con independencia del color del hidrógeno, las propias filtraciones de este gas son la mayor amenaza a su expansión como fuente de energía.

Y los datos dicen que ya lo son: un estudio dirigido por la Universidad de California en Irvine ha analizado el aire atrapado en el hielo antártico durante los últimos 150 años. “Encontramos un aumento del 70 % en el H<sub>2</sub> atmosférico durante el siglo XX que puede atribuirse a la actividad humana” Yanes (2021), escriben los investigadores; y destacan que, si bien se pensaba en la quema de carburantes fósiles como fuente principal de emisión de hidrógeno, en cambio las normativas más estrictas de la contaminación automovilística introducidas a finales del siglo XX no han reducido los niveles de H<sub>2</sub>. Del control de este factor, de la creación de una red de hidrógeno verde perfectamente sellada, puede depender que la propuesta de este gas se haga realidad.



## Capítulo 8

# Conclusiones y trabajo futuro

El principal objetivo de este trabajo era desarrollar un controlador predictivo multi-objetivo lineal desde el principio hasta sus resultados finales, donde las soluciones de las simulaciones han sido satisfactorias y alentadoras para poner en funcionamiento el algoritmo de control propuesto en este proyecto.

El controlador se implementó en el sistema del electrolizador que ha sido capaz de producir gases a una determinada presión e igualar los niveles en las cámaras de separación, lo que significa minimizar el cruce de gases en las celdas electrolíticas. En esta sección se presentan los objetivos alcanzados y el trabajo posterior.

### Principales contribuciones

Desde un punto de vista global, a continuación se exponen las aportaciones de este proyecto que van a ser útiles para futuras mejoras:

- Se ha desarrollado una función objetivo de manera que el controlador predictivo pueda controlar las tres variables necesarias para la obtención de hidrógeno de alta pureza, estos son, las válvulas de entrada, la presión y el nivel del tanque de hidrógeno.
- Se ha buscado y encontrado la mejor sintonía para dicha función normalizada de tal forma que se obtengan resultados óptimos con la mayor eficiencia del sistema.
- Un controlador predictivo lineal basado en modelo para la planta lineal del sistema electrolítico junto con sus respectivas restricciones basadas en un trabajo anterior ha sido creado para prever anticipadamente las alteraciones en la pureza del hidrógeno de manera indirecta midiendo las variaciones en el nivel y en la presión de los tanques ante perturbaciones variables.
- Se ha asegurado una acción de control frente a perturbaciones variables en la intensidad de corriente eléctrica de manera que la apertura o cierre de las válvulas corrijan la presión y la variación del nivel del tanque evitando así la contaminación cruzada con el oxígeno.
- Se ha conseguido minimizar el error en la variación de presión frente a la referencia gracias a las ponderaciones de la función objetivo.

## Qué se ha hecho

- Se ha realizado un análisis de los datos de los trabajos anteriores centrado en la obtención de resultados para la implementación posterior de la estrategia de control. Se han identificado el orden de las entradas y salidas del modelo puesto que al utilizar un modelo reducido y linealizado del modelo real había que volver a determinar la posición de las entradas de las válvulas, las entradas de las perturbaciones y las salidas de la variación de nivel y presión.
- Con todas las entradas necesarias identificadas, junto a esto, se ha explicado por tanto, las restricciones necesarias para realizar el control para favorecer la sintonía de la función de costes de manera que cumpla las especificaciones. El uso del paquete YALMIP junto con Matlab han sido fundamentales para conseguir los resultados y crear soportes visuales, como figuras o tablas, para obtener las conclusiones resultantes. Se ha creado el problema multiobjetivo y se han seleccionado las ecuaciones y restricciones para cumplir con el comportamiento deseado del sistema y se han presentado todos los resultados para apoyar las consiguientes mejoras de la implementación del control.
- Los resultados obtenidos tras hacer varias pruebas de tanteo entre distintos pesos de dicha función se han utilizado posteriormente para simular las compensaciones más cercanas a la óptima para crear el algoritmo del MPC lineal. Con respecto a dicho controlador, se ha realizado su definición y enunciado con el fin de precisar su comportamiento y se ha pretendido analizar la mejora que podría suponer en cuanto a la eficiencia del sistema lineal reducido de 14 estados del PBSM para la producción de hidrógeno. Tras el planteamiento y validación de este modelo, se ha determinado que incluir un controlador predictivo en un modelo lineal del PBSM mejora los resultados un 0.18 %, es decir, se puede implementar un controlador con efectos más preciso en la pureza del hidrógeno.
- Con el controlador MPC ajustado para lograr los objetivos de control deseados, se ha hecho unas últimas simulaciones para comprobar qué pasaría si la constante de tiempo fuese mayor a 30, es decir, qué cambiaría si la ventana del tiempo donde se produce una perturbación de un valor determinado fuese mayor que el tiempo que tarda el sistema en converger a un punto de estabilidad. Lo que se ha podido ver es que el modelo del controlador no es capaz de actuar lo suficientemente rápido como para corregir dichas perturbaciones en el nivel del tanque, aunque dichos cambios siguen siendo tan pequeños que no comprometen la estabilidad del sistema ni la producción de hidrógeno.

## Trabajo futuro

El trabajo actual de desarrollo de un controlador predictivo basado en modelo ha sido llevado a cabo en Matlab para el modelo lineal del sistema electrolítico pero no ha podido ser comprobado y simulado para el modelo reducido no lineal de 14 estados debido a problemas con el ordenador con el que se ha realizado este proyecto, por tanto, para futuros trabajos se puede realizar las siguientes tareas:

- Simular el modelo lineal del MPC en la planta reducida no lineal de orden 14 del electrolizador de manera que se sigan cumpliendo las especificaciones impuestas

y resulte una estrategia de control igual de válida que para este trabajo. Esta tarea conlleva dificultades ya que habrá que separar e identificar los 14 estados de salida para realizar sistema realimentado, de manera que se le pueda hacer el ensayo con las salidas de la presión del tanque de hidrógeno y a la intensidad de corriente en los puntos de equilibrio, utilizados en el controlador predictivo lineal,  $P_{H_2} = 4000kPa$  e  $I = 30A$ . Una tarea importante será preparar el entorno Matlab/Simulink para trabajar junto con el software YALMIP para poder continuar con las simulaciones.

- Desarrollar un controlador predictivo basado en modelo no lineal con restricciones para el sistema no lineal de 25 estados. Esta iniciativa a parte de la complicación en sí que es realizar un controlador no lineal para una planta de tantos estado, tiene una dificultad añadida que son los problemas de tiempo de cálculo que va a necesitar la función objetivo del MPC no lineal, puesto que se va a tener que simular en Simulink que es un software que consume muchos recursos del sistema.



# Bibliografía

- A. Roy, S. W. and Infield, D. (2006). *Comparison of electrical energy efficiency of atmospheric and high-pressure electrolyzers*. International Journal of Hydrogen Energy. 31:1964-1979.
- Abdalla, M. A., Hossain, S., Nisfindya, O. B., T., A. A., Dawoodb, M., and Azada, A. K. (2018). *Hydrogen production, storage, transportation and key challenges with applications: A review*. 33. Energy Conversion and Management. 165:602-627.
- Abe, I. (1991). *Alkaline Water Electrolysis*. Encyclopedia of Life Support Systems (EOLSS), vol. i edition. Office Tera, Chiba, Japan.
- Ball, M. and Weeda, M. (2015). *The hydrogen economy - vision or reality?* 40. International Journal of Hydrogen Energy. 7903-7919.
- Bordons, C. (2004). *Model predictive control*. Progress in Systems Theory 26. Birkhauser.
- C. Ziems, D. T. and Krautz, H. J. (2012). *Project presentation: design and installation of advanced high pressure alkaline electrolyzer-prototypes*. Energy Procedia. 29:744-753.
- Camacho, E. and Bordons, C. (2004). *Model Predictive Control Second Edition*. ISBN: 1852336943.
- Camacho, E. F. and Bordons, C. (2016). *Control predictivo: pasado, presente y futuro*, chapter Formulación General del Control Predictivo Basado en modelo, pages 21 – 28. Escuela Superior de Ingenieros. Universidad de Sevilla.
- Cheng, J., Zhang, H., Chen, G., and Zhang, Y. (2009). *Study of IrxRu1-xO2 oxides as anodic electrocatalysts for solid polymer electrolyte water electrolysis*. Electrochimica Acta. 54(26):6250-6256.
- Cherevko, S. (2018). *Stability and dissolution of electrocatalysts: Building the bridge between model and real world systems*. Current Opinion in Electrochemistry. 8:118-125.
- David, M., Alvarez, H., Ocampo-Martinez, C., and Sánchez-Peña, R. (2019). *Phenomenological based model of hydrogen production using an alkaline self-pressurized electrolyzer*. 82. 18th European Control Conference (ECC). 4344-4349.
- David, M., Alvarez, H., Ocampo-Martinez, C., and Sánchez-Peña, R. (2020). *Dynamic modelling of alkaline self-pressurized electrolyzers: a phenomenological-based semiphysical approach*. 82. International Journal of Hydrogen Energy. 22394-22407.
- David, M. R. (2021). *Mathematical modelling and advanced control design applied to high-pressure electrolyzers for hydrogen production*. PhD thesis, Universitat Politècnica De Catalunya e Instituto Tecnológico De Buenos Aires.

- Dawood, F., Anda, M., and Shafiullah, G. (2020). *Hydrogen production for energy: an overview*. 45. *Int. J. Hydrogen Energy*. 3847–3869.
- Dincer, I. and Acar, C. (2014). *Review and evaluation of hydrogen production methods for better sustainability*. 40. *International Journal of Hydrogen Energy*. 11094-11111.
- Dincer, I. and AlZahrani, A. A. (2018). *Electrolyzers, Comprehensive Energy Systems*. Elsevier, 985-1025 edition. ISBN 9780128149256.
- Dobó, Z. and Palotás, A. B. (2016). *Impact of the voltage fluctuation of the power supply on the efficiency of alkaline water electrolysis*. 41. *International Journal of Hydrogen Energy*. 11849-11856.
- Dobó, Z. and Palotás, A. B. (2017). *Impact of the current fluctuation on the efficiency of alkaline water electrolysis*. 42. *International Journal of Hydrogen Energy*. 5649-5656.
- Dutta, S. (2014). *A review on production, storage of hydrogen and its utilization as an energy resource*. 48. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*. 5649-5656.
- E. Amores, J. R. and Carreras, C. (2014). *Influence of operation parameters in the modeling of alkaline water electrolyzers for hydrogen production*. 39. *International Journal of Hydrogen Energy*. 13063-13078.
- F. Vivas, F. De las Heras, A., Segura, and Andújar, J. (2018). *A review of energy management strategies for renewable hybrid energy systems with hydrogen backup*. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. 82:126-155.
- F. Zhang, P. Zhao, M. N. and Maddy, J. (2016). *The survey of key technologies in hydrogen energy storage*. *International Journal of Hydrogen Energy*. 41:14535-14552.
- Gahleitner, G. (2013). *Hydrogen from renewable electricity: An international review of power to-gas pilot plants for stationary applications*. 38. *International Journal of Hydrogen Energy*. 2039-2061.
- Ganeshan, A., Holmes, D. G., Meegahapola, L., and McGrath, B. P. (2017). *Enhanced control of a hydrogen energy storage system in a microgrid*. 38. *Australasian Universities Power Engineering Conference (AUPEC)*. 1-6.
- Ganley, J. (2009). *High temperature and pressure alkaline electrolysis*. 38. *International Journal of Hydrogen Energy*. 34:3604-3611.
- García, C; Prett, M. (1989). *Model predictive control: theory and practice*. 25. *Automatica*. (3): 335–348.
- Giraldo, S. A. C. (2021). Índices de desempeño. [https://controlautomaticoeducacion.com/control-realimentado/indices-de-desempeno/#:~:text=con\%20medios\%20anal\%C3\%ADticos.-,Integral\%20of\%20time\%20multiplied\%20Absolute\%20Error\%20Criterion\%20\(ITAE\),avanza\%2C\%20la\%20penalizaci\%C3\%B3n\%20es\%20mayor.01/05/2021](https://controlautomaticoeducacion.com/control-realimentado/indices-de-desempeno/#:~:text=con\%20medios\%20anal\%C3\%ADticos.-,Integral\%20of\%20time\%20multiplied\%20Absolute\%20Error\%20Criterion\%20(ITAE),avanza\%2C\%20la\%20penalizaci\%C3\%B3n\%20es\%20mayor.01/05/2021).
- G.P. Liu, J.B. Yang, J. W. (2003). *Multiobjective Optimisation and control*. Research studies Press Ltd. Exerter.
- H. Vandenborre, R. L. and Baetsle, L. H. (1980). *Alkaline inorganic-membrane-electrolyte (IME) water electrolysis*. *International Journal of Hydrogen Energy*. 5:165-171.



- Hammoudi, M., Henao, C., Agbossou, K., Dubé, Y., and Doumbia, M. (2012). *New multi-physics approach for modelling and design of alkaline electrolyzers*. 38. International Journal of Hydrogen Energy. 13895-13913.
- Haug, P., Kreitz, B., Koj, M., and Turek, T. (2017). *Process modelling of an alkaline water electrolyzer*. International Journal of Hydrogen Energy. 42:15689-15707.
- Hug, W., Divisek, J., Mergel, J., Seeger, W., and Steeb, H. (1993). *Intermittent operation and operation modelling of an alkaline electrolyzer*. International Journal of Hydrogen Energy. 18(12):973-977.
- HyUnder (2014). *Assessment of the potential, the actors and relevant business cases for largescale and longterm storage of renewable electricity by H2 underground storage in Europe*. . 13895-13913.
- J. Divisek, P. Malinowski, J. M. and Schmitz, H. (1985). *Improved construction of an electrolytic cell for advanced alkaline water electrolysis*. 40. International Journal of Hydrogen Energy. 10:383-388.
- K. Onda, T. Kyakuno, K. H. and Ito, K. (2004). *Prediction of production power for highpressure hydrogen by high-pressure water electrolysis*. Journal of Power Sources. 132:64-70.
- K. Rajeshwar, R. M. and Licht, S. (2008). *Solar Hydrogen Generation. Toward a renewable energy future*. Springer-Verlag. 78:280-300.
- Kalman, R. and Bucy, R. (1961). *New results in linear filtering and prediction theory, Transactions ASME. Series D. Journal of Basic Engineering*. 83:95-108.
- Kerres, J., Eigenberger, G., Reichle, S., Schramm, V., Hetzel, K., Schnurnberger, W., and J, I. S. (1996). *Advanced alkaline electrolysis with porous polymeric diaphragms*. . 104(1-2):47-57.
- Koj, J. C., Wulf, C., Schreiber, A., and Zapp, P. (2017). *Site-dependent environmental impacts of industrial hydrogen production by alkaline water electrolysis*. *Energy*, 1(1):1-2.
- Lee, H. I., Dung, D. T., Kim, J., Pak, J. H., k. Kim, S., Cho, H. S., Cho, W. C., and Kim, C. H. (2020). *The synthesis of a zirfon-type porous separator with reduced gas crossover for alkaline electrolyzer*. International Journal of Energy Research. 44(3):1875-1885.
- Lee, J., Alam, A., and Ju, H. (2021). *Multidimensional and transient modeling of an alkaline water electrolysis cell*. International Journal of Hydrogen Energy. 46:13678-13690.
- M. L. Arlt, G. F. C. and Weng, D. (2017). *Hydrogen storage applications in industrial microgrids*. In 2017 IEEE Green Energy and Smart Systems Conference (IGESSC). 1-6.
- M. Vanags, J. K. and Bajars, G. (2012). *Water electrolysis with inductive voltage pulses in Electrlysis*. InTech.
- Mahlia, T., Saktisahdan, T., Jannifar, A., Hasan, M., and Matseelar, H. (2014). *A review of available methods and development on energy storage: technology update*, *Renew. Sustain. Energy Rev.* 33. 532-545.
- Mazloomi, K. and Gomes, C. (2012). *Hydrogen as an energy carrier: Prospects and challenges*. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. 16:3024-3033.

- Mazloomi, K., Sulaiman, N., Ahmad, S. A., and Yunus, N. (2013). *Analysis of the frequency response of a water electrolysis cell*. International Journal of Electrochemical Science. 8:3731-3739.
- Mazloomi, K., Sulaiman, N., Ahmad, S. A., and Yunus, N. (2014). *Integration von Wind-WasserstoffSystemen in das Energiesystem*. 38. Nationale Organisation Wasserstoff, Berlin, Germany.
- Mazloomi, S. and Sulaiman, N. (2012). *Influencing factors of water electrolysis electrical efficiency*. Renewable and Sustainable Energy Reviews. 16:4257-4263.
- Michalski, J., Bünger, U., Crotogino, F., Donadei, S., Schneider, G.-S., Pregger, T., Cao, K.-K., and Heide, D. (2017). Hydrogen generation by electrolysis and storage in salt caverns: Potentials, economics and systems aspects with regard to the german energy transition. *Int. J. Hydrogen Energy*, 42(1):13427–13443.
- Milewski, J., Guandalini, G., and Campanari, S. (2014). *Modeling an alkaline electrolysis cell through reduced-order and loss-estimate approaches*. Journal of Power Sources. 269:203-211.
- N. Shimizu, S. Hotta, T. S. and Oda, O. (2006). *A novel method of hydrogen generation by water electrolysis using an ultra-short-pulse power supply*. Journal of applied electrochemistry. 36:419-423.
- Nikolaidis, P. and Poullikkas, A. (2017). *A comparative overview of hydrogen production processes*. 67. Renewable and Sustainable Energy Reviews. 597-611.
- Otero, J., Sese, J., Michaus, I., Maria, M. S., Guelbenzu, E., Irusta, S., Carrilero, I., and Arruebo, M. (2014). *Sulphonated polyether ether ketone diaphragms used in commercial scale alkaline water electrolysis*. Journal of Power Sources. 247:967-974.
- P. Haug, M. K. and Turek, T. (2017). *Influence of process conditions on gas purity in alkaline water electrolysis*. 42. International Journal of Hydrogen Energy. 9406-9418.
- P. Olivier, C. B. and Bouamama, P. B. (2017). *Low-temperature electrolysis system modelling: A review*. Renewable and Sustainable Energy Reviews. 78:280-300.
- P. Vermeiren, W. Adriansens, J. P. M. and Leysen, R. (1998). *Evaluation of the Zirfon separator for use in alkaline water electrolysis and Ni-H<sub>2</sub> batteries*. International Journal of Hydrogen Energy. 23:321-324.
- Pareto, V. (1906). *Manuale di economia politica, societa editrice libreria, Milano*. Macmillan. Translated into english by A.S. Schwier as Manual of political economy, New York.
- R. Shridhar, D. C. D. (1998). *A Tuning Strategy for Unconstrained Multivariable Model Predictive Control*. Ind. Eng. Chem. Res. 1998, 37, 4003-4016.
- Rashid, M., Al Mesfer, M.K. and Naseem, H., and Danish, M. (2015). Hydrogen production by water electrolysis: A review of alkaline water electrolysis, pem water electrolysis and high temperature water electrolysis. *Int. J. Eng. Adv. Technol.*, 4(1):80–93.
- Rolf Findeisen, Allgöwer, B. (2006). *Assessment and Future Directions of Nonlinear Model Predictive Control*. Lecture Notes in Control and Information Sciences 26. Springer.
- Schalenbach, M., Lueke, W., and Stolten, D. (2016a). *Hydrogen diffusivity and electrolyte permeability of the zirfon perl separator for alkaline water electrolysis*. Journal of the Electrochemical Society. 14:1480-1488.

- Schalenbach, M., Tjarks, G., Carmo, M., Lueke, W., Mueller, M., and Stolten, D. (2016b). *Acidic or alkaline? towards a new perspective on the efficiency of water electrolysis*. Journal of the Electrochemical Society. 11:3197-3208.
- Schalenbach, M., Zeradjanin, A. R., Kasian, O., Cherevko, S., and Mayrhofer, K. J. (2018). *A perspective on low-temperature water electrolysis challenges in alkaline and acidic technology*. Journal of the Electrochemical Society. 13:1173-1226.
- Schiebahn, S., Grube, T., Robinius, M., Tietze, V., Kumar, B., and Stolten, D. (2015). *Power to gas: Technological overview, systems analysis and economic assessment for a case study in Germany*. International Journal of Hydrogen Energy. 40:4285-4294.
- Schmidt, O., Gambhir, A., Staffell, I., Hawkes, A., Nelson, J., and Few, S. (2017). *Future cost and performance of water electrolysis: An expert elicitation study*. International Journal of Hydrogen Energy. 42:30470-30492.
- Schug, C. A. (1998). *Operational characteristics of high-pressure, high-efficiency water-hydrogenelectrolysis*. International Journal of Electrochemical Science. 23:1113-1120.
- Shaaban, A. H. (1994). *Pulsed DC and anode depolarization in water electrolysis for hydrogen generation*. Technical report, Air Force Civil Engineering Support Agency.
- Sánchez, M., Amores, E., Abad, D., Rodríguez, L., and Clemente-Jul, C. (2013). *Pressurized pem water electrolysis: Efficiency and gas crossover*. International Journal of Hydrogen Energy. 38:14921-14933.
- Sánchez, M., Amores, E., Abad, D., Rodríguez, L., and Clemente-Jul, C. (2018). *Semi-empirical model and experimental validation for the performance evaluation of a 15 kw alkaline water electrolyzer*. International Journal of Hydrogen Energy. 43:20332-20345.
- Sánchez, M., Amores, E., Abad, D., Rodríguez, L., and Clemente-Jul, C. (2020). *Aspen plus model of an alkaline electrolysis system for hydrogen production*. International Journal of Hydrogen Energy. 45:3916-3929.
- Ulleberg, O. (2003). *Modeling of advanced alkaline electrolyzers: a system simulation approach*. International Journal of Hydrogen Energy. 28:21-33.
- Ursúa, A. (2012). *Hydrogen production from water electrolysis: Current status and future trends*. Proceedings of the IEEE. 100:410-426.
- Vivas, F., las Heras, F. D., Segura, A., and Andújar, J. (2018). *A review of energy management strategies for renewable hybrid energy systems with hydrogen backup*. 82. Renew. Sustain. Energy Rev. 126–155.
- Yalmip® (2016). Model predictive control - basics. <https://yalmip.github.io/example/standardmpc/>. 01/09/2016.
- Yanes, J. (2009). Freedomcar & fuel partnership. hydrogen production: Overview of technology options. [https://www1.eere.energy.gov/hydrogenandfuelcells/pdfs/h2\\_tech\\_roadmap.pdf](https://www1.eere.energy.gov/hydrogenandfuelcells/pdfs/h2_tech_roadmap.pdf).
- Yanes, J. (2021). Hidrógeno, el gas de doble filo en el cambio climático. <https://www.bbvaopenmind.com/ciencia/medioambiente/hidrogeno-gas-doble-filo-cambio-climatico/>. 30/11/2021.
- Zheng, A. (2000). *Nonlinear model predictive control*. Progress in Systems Theory 26. Birkhauser.

