

UNIVERSIDAD NACIONAL DE CÓRDOBA

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS, FÍSICAS Y NATURALES

DOCTORADO EN CIENCIAS DE LA INGENIERÍA

TESIS DOCTORAL



**ESTUDIOS DE SISTEMAS VEHICULARES
DE EMISIÓN CERO Y MODELADO DE
BATERÍAS DE ION-LITIO PARA
APLICACIONES EN SISTEMAS DE
TRANSPORTE TERRESTRE**

AUTOR: ING. PEDRO MUÑOZ

DIRECTOR: DR. GABRIEL CORREA PERELMUTER

MARZO DE 2019

ESTUDIOS DE SISTEMAS VEHICULARES DE
EMISIÓN CERO Y MODELADO DE BATERÍAS DE
ION-LITIO PARA APLICACIONES EN SISTEMAS
DE TRANSPORTE TERRESTRE

por

ING. PEDRO MUÑOZ

DR. GABRIEL CORREA PERELMUTER
DIRECTOR

COMISIÓN ASESORA

DR. GABRIEL CORREA PERELMUTER
FACEN-UNCA

DR. CARLOS RAMIRO RODRIGUEZ
FCEFYN-UNC

DR. OSVALDO CÁMARA
INFIQC-CONICET

*Esta Tesis fue enviada a la Facultad de Ciencias Exactas Físicas y Naturales de la
Universidad Nacional de Córdoba para cumplimentar los requerimientos de
obtención del grado académico de Doctor en Ciencias de la Ingeniería.*

CÓRDOBA, ARGENTINA
MARZO DE 2019



UNIVERSIDAD NACIONAL DE CORDOBA
Facultad de Cs. Exactas, Físicas y Naturales

ACTA DE EXAMENES

Libro: 00001 Acta: 04662 Hoja 01/01
LLAMADO: 1 28/03/2019
CATEDRA - MESA:

D1002 TESIS DOCTORADO EN CIENCIAS DE LA INGENIERIA

NUMERO	APELLIDO Y NOMBRE	DOCUMENTO INGRESO COND.	NOTA	FIRMA
33899512	MUÑOZ, PEDRO MATIAS	DNI: 33899512 2014 T	Aprobado	

FASOLI, Héctor - LEIVA, Ezequiel Pedro M. - LUQUE, Guillermina - OVIEDO, Oscar -

Observaciones:

Córdoba, ___/___/___.

Certifico que la/s firma/s que ha/n sido puesta/s en la presente Acta pertenece/n a: Guillermina Luque

1	0	1	0	1
Inscriptos	Ausentes	Examinados	Reprobados	Aprobados

21/03/2019 11:00:43 Libro/Acta: 0000104662 Hoja: 01/01

Agradecimientos

Quiero agradecer en primer lugar a mi compañera Paula, quien fue mi soporte emocional durante estos 5 años de trabajo.

Al apoyo y estímulo de mi Director de Tesis, Gabriel Correa, cuyos consejos y seguimiento hicieron posible esta Tesis.

A Ramiro Rodríguez, Damián Fernández y Marcos Gaudiano, cuyo trabajo y contribuciones aportaron enormemente a esta Tesis.

A Rita Humana, gracias a quien la campaña experimental fue posible de desarrollar.

A mis padres y a Tomás Falagüerra quienes me impulsaron a seguir adelante cuando tuve dudas acerca de las posibilidades de finalizar este proyecto.

Resumen

Palabras clave: *Baterías de ion-litio - Modelado multifísico - Movilidad eléctrica - Análisis well-to-wheel - Gestión de la energía.*

La presente tesis se enmarca en el cambio de paradigma mundial hacía una movilidad sustentable, dentro de la cual se estudian la gestión de la energía en un vehículo híbrido, los caminos de la energía desde su producción hasta su uso en diversos vehículos y las baterías como componentes esenciales en el desarrollo de este nuevo paradigma.

En primer lugar se desarrolló un modelo pseudo bidimensional basado en la física para modelar una celda cilíndrica y luego el modelo fue escalado a un paquete de baterías. Se estudió la selección de los parámetros adecuados para el modelo y se llevó a cabo una optimización de parámetros para los cuales no se contaba con información. Se presentó la validación del modelo para la celda y el paquete de baterías y se estudiaron diferentes condiciones de refrigeración para el paquete de baterías. La ventaja del enfoque de modelado usado en esta tesis es que permite simulaciones para cualquier cambio de diseño en el modelo. Se pueden realizar cambios en cualquier nivel de modelado, ya sea química de la batería, al nivel de partícula, o espesor de cualquier capa de la batería (o cualquier otra dimensión), o la cantidad de baterías en un módulo, o el diseño del paquete, o el diseño del método de refrigeración. También se pueden simular diferentes condiciones ambientales u operativas para ver su efecto en el rendimiento del paquete completo.

A continuación se presenta un método novedoso para comparar los rendimientos energéticos y ambientales de cuatro tipos de trenes de propulsión de autobuses de pasajeros urbanos utilizando un índice multifísico basado en un análisis del pozo a rueda. El paso del pozo al tanque se realizó para escenarios presentes y futuros (año 2030) de Argentina utilizando diferentes supuestos para los próximos años y obteniendo diversos parámetros energéticos y ambientales. Además, el análisis del tanque a la rueda se realizó utilizando modelos dinámicos de vehículos, dos ciclos de conducción diferentes y cuatro rangos. Posteriormente, ambas etapas se integraron en una etapa de pozo a rueda donde se propusieron y discutieron índices relevantes. Con el fin de evaluar adecuadamente las diferentes hipótesis para sistemas,

rango, ciclos y escenarios; se utilizó un indicador multifísico (Índice integrado), valorado entre cero y uno. Por último el estudio enmarcado en Argentina fue replicado para los países vecinos Brasil y Chile.

Por último se propuso un sistema de gestión de energía de aplicación en tiempo real para un vehículo híbrido de celda de combustible y baterías de ion litio, diseñado para funcionar en una amplia gama de tipos de estilo de conducción. El controlador fue diseñado utilizando redes neuronales, que fueron entrenadas con la distribución óptima del flujo de potencia entre un sistema de celda de combustible y un sistema de batería, que minimiza el consumo de energía equivalente total. La solución óptima se obtuvo llevando a cabo un método de minimización basado en gradiente a lo largo de ocho ciclos de conducción diferentes y utilizando un modelo matemático de parámetros dinámicos concentrados de un vehículo híbrido, alimentado por hidrógeno, con celdas de combustible y baterías de ion litio. Se realizó un análisis cuantitativo y cualitativo que muestra los rendimientos de las neuronales en diferentes tipos de ciclos. A través de este análisis se proporciona una clasificación adecuada en dos categorías de ciclo, que cubre la mayoría de los estilos de conducción posibles con dos de los controladores desarrollados.

Abstract

Palavras-chave: *Li-ion batteries - Multiphysical modeling - Electric mobility - Well-to-wheel analysis - Energy management.*

This thesis is framed under the shifting global paradigm towards sustainable mobility, and within it, the management of energy in a hybrid vehicle, the paths of energy from its production to its use in various vehicles, and batteries are studied as essential components in the development of this new paradigm.

First, a pseudo-two-dimensional model based on physics was developed to model a cylindrical cell and then the model was scaled to a battery pack. The selection of parameters suitable for the model was studied and an optimization of parameters for which there was no information was carried out. Validation of the model for the cell and the battery pack was presented and different cooling conditions for the battery pack were studied. The advantage of the modeling approach used in this thesis is that it allows simulations for any design change in the model. Changes can be made at any level of modeling, be it battery chemistry, particle level, or thickness of any battery layer (or any other dimension), or the number of batteries in a module, or the design of the battery package, or the design of the refrigeration method. Also, different environmental or operational conditions can be simulated to see their effect on the performance of the complete package.

Later, a new method to compare energy and environmental performances of four types of urban passenger buses powertrains using a multiphysic index on the basis of a well to wheel analysis is presented. The well to tank step was made for present and future (year 2030) scenarios of Argentina using different assumptions for the years to come and obtaining various energy and environmental parameters. Additionally, the tank to wheel analysis was performed using dynamic models of vehicles, two different driving cycles and four ranges. Later both stages were integrated in a well to wheel stage where relevant indexes were proposed and discussed. In order to properly assess the different hypotheses for systems, range, cycles and scenarios; a multiphysics indicator (Integrated Index), valued between zero and one was used. Finally, the study framed in Argentina was replicated for neighboring countries Brazil and Chile.

Finally, an online Energy Management System controller was developed for a fuel cell and Li-ion batteries hybrid vehicle, designed to work over a wide range of driving styles. The controller was designed by using neural networks, which were trained with the optimal power flux distribution between a fuel cell system and a battery system that minimizes the overall equivalent energy consumption. The optimal solution was obtained by carrying out a gradient-based method minimization over eight different driving cycles, and using a dynamic lumped parameter mathematical model of a fuel cell and li-ion batteries hybrid vehicle fed by hydrogen. A quantitative and qualitative analysis was made showing the networks performances over different type of cycles. Through this analysis, a suitable classification into two cycle categories is provided, covering most of the possible driving styles with two of the developed controllers.

Resumo

Key words: *Baterias de íons de lítio - Modelagem multifísica - Mobilidade elétrica - Análise well-to-wheel - Gerenciamento de energia.*

Esta tese se enquadra na mudança de paradigma global de mobilidade sustentável e, dentro dela, a gestão da energia em um veículo híbrido, os caminhos da energia desde a sua produção até o seu uso em vários veículos, e as baterias são estudadas como componentes essenciais no desenvolvimento deste novo paradigma.

Primeiro, um modelo pseudo-bidimensional baseado em física foi desenvolvido para modelar uma célula cilíndrica e, em seguida, o modelo foi escalonado para uma bateria. A seleção dos parâmetros adequados para o modelo foi estudada e uma otimização dos parâmetros para os quais não houve informação foi realizada. A validação do modelo para a célula e a bateria foi apresentada e diferentes condições de resfriamento para a bateria foram estudadas. A vantagem da abordagem de modelagem usada nesta tese é que ela permite simulações para qualquer alteração de projeto no modelo. Alterações podem ser feitas em qualquer nível de modelagem, seja química de bateria, nível de partícula ou espessura de qualquer camada de bateria (ou qualquer outra dimensão), ou o número de baterias em um módulo, ou o desenho do pacote de bateria, ou o desenho do método de refrigeração. Além disso, diferentes condições ambientais ou operacionais podem ser simuladas para ver seu efeito no desempenho do pacote completo.

Posteriormente, é apresentado um novo método para comparar o desempenho energético e ambiental de quatro tipos de trens de força de ônibus urbanos para passageiros, usando um índice multifísico com base na análise do poço para a roda. A etapa de poço para tanque foi feita para os cenários presente e futuro (ano 2030) da Argentina, usando diferentes premissas para os próximos anos e obtendo vários parâmetros energéticos e ambientais. Além disso, a análise de tanque para roda foi realizada usando modelos dinâmicos de veículos, dois ciclos de condução diferentes e quatro distâncias. Posteriormente, ambos os estágios foram integrados em um estágio de poço a roda, onde índices relevantes foram propostos e discutidos. A fim de avaliar adequadamente as diferentes hipóteses de sistemas, alcance, ciclos e cenários; Utilizou-se um indicador multifísico (Índice Integrado), com valor

entre zero e um. Por fim, o estudo enquadrado na Argentina foi replicado para os países vizinhos Brasil e Chile.

Finalmente, um controlador aplicável em tempo real do Sistema de Gerenciamento de Energia foi desenvolvido para um veículo híbrido de célula de combustível e baterias de íons de lítio, projetado para funcionar em uma ampla gama de estilos de condução. O controlador foi projetado usando redes neurais, que foram treinadas com a distribuição de fluxo de energia ideal entre um sistema de célula de combustível e um sistema de bateria que minimiza o consumo total de energia equivalente. A solução ótima foi obtida por meio da minimização de um método baseado em gradiente em oito diferentes ciclos de condução, e usando um modelo matemático com parâmetros concentrados dinâmicos de um veículo híbrido de célula de combustível e baterias de íons de lítio alimentado por hidrogênio. Uma análise quantitativa e qualitativa foi feita mostrando os desempenhos das redes em diferentes tipos de ciclos. Através desta análise, é fornecida uma classificação adequada em duas categorias de ciclo, cobrindo a maioria dos possíveis estilos de condução com dois dos controladores desenvolvidos.

Abreviaturas

Símbolos latinos

A	Área [m^2]
A_x	Concentración de emisiones en ambiente cercano [$\mu\text{g h}/\text{km}$]
A_{cell}	Superficie activa de la celda [cm^2]
$A_{x,st}$	Calidad de aire ambiente standard por cada gas emitido [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]
C_D	Coefficiente aerodinámico de drag
E_0	Tensión de circuito abierto [V]
En	Energía [J]
F	Constante de Faraday [C/mol]
G	Flujo másico [kg/s]
I	Corriente [A]
M	Masa Molar [kg/mol]
N_C	Número de celdas en serie en PEMFC stack
P	Potencia [kW]
R	Constante universal de los gases [$\text{J}/(\text{mol}^\circ\text{K})$]
T	Temperatura [K]
V	Velocidad [m/s]
W_{EI_i}	Pesos ponderado de cada contaminante (i) para índice de emisión
f_0	Factor de rodadura
g	Constante Gravitacional [m/s^2]
h	Entalpía másica específica del caudal [J/kg]
i	Densidad de corriente [A/cm^2]
m	Masa [kg]
p	Presión [bar]
r	Resistencia [Ωm^2]

t_m Espesor de la Membrana[cm]

Símbolos griegos

Φ Transferencia de calor [W]
 α inclinación de ruta [rad]
 δ_m Contenido de agua promedio en Membrana
 η Sobre voltaje [V] / Eficiencia
 ϕ Tiempo de residencia de cada gas contaminante [h]
 ρ Densidad [kg/m³]
 τ Cantidad de cada gas contaminante por km [$\mu\text{g}/\text{km}$]
 $\Delta\bar{s}$ Entropía molar de reacción [J/molK]

Subíndices

EM Motor eléctrico
Mem Membrana
a Anódico
act Activación
amb Ambiente
an Ánodo
aux Auxiliares de la celda de combustible
c Catódico
ca Cátodo
elec Electrónica
eq Equilibrio
irr Irreversible
l Fase líquida
mec Mecánica
ohm Óhmico
r Reversible
s Fase sólida
st Stack

Abreviaciones y acrónimos

ADS Velocidad promedio (Average driving speed)

ARMA	Modelo autorregresivo de media móvil (Autoregressive–moving-average model)
AUX VEH	Auxiliares de vehículo (Vehicle auxiliaries)
BAT	Batería (Battery)
BEV	Vehículo eléctrico a batería (Battery electric vehicle)
BSE	Energía del sistema de energía (Battery system energy)
CI	Encendido por compresión (Compression ignition)
CNG	Gas natural comprimido (Compressed natural gas)
CT	Tiempo de carga (Charging time)
DC/AC	Convertidor (Booster buck converter)
DC/DC	Inversor (Inverter)
DIFF	Diferencial y transmisión final
DOD	Profundidad de descarga (Depth of discharge)
DP	Programación dinámica (Dynamic programming)
DV	Vehículo diesel (Diesel vehicle)
EI	Índice de emisión (Emission index)
EM	Motor eléctrico (Electric motor)
EMS	Sistema de manejo de la energía (Energy management system)
EV	Vehículo eléctrico (Electric vehicle)
FC	Celda de combustible (Fuel cell)
FC AUX	Auxiliares de Celda de combustible (Fuel cell auxiliaries)
FCHEV	Vehículo híbrido de celdas de combustible (Fuel cell hybrid electric vehicle)
FCS	Sistema de celdas de combustible (Fuel cell system)
GB	Caja de cambios (Gear box)
GHG	Gas de efecto invernadero (Green house gases)
HCNG	Gas natural comprimido enriquecido con hidrógeno (Hydrogen enriched compressed natural gas)
HEV	Vehículo eléctrico híbrido (Hybrid electric vehicle)
H ₂	Hidrógeno gaseoso comprimido (Compressed gaseous hydrogen)
ICE	Motor de combustión interna (Internal combustion engine)
ISI	Índice integral de sustentabilidad (Integrated sustainability index)
LCA	Análisis de ciclo de vida (Life cycle analysis)
LHV	Poder calorífico inferior (Low heating value)
MC	Acoplamiento mecánico (Mechanical coupling)
NG	Gas natural (Natural gas)
NN	Redes neuronales (Neural networks)
PEMFC	Celda de combustible de membrana PEM (PEM fuel cell)

PKE	Energía cinética positiva (Positive kinetic energy)
PT	Tren de potencias (Powertrain)
RB	Frenado regenerativo (Regenerative braking)
FE	Economía del combustible (Fuel economy)
SI	Encendido por chispa (Spark ignition)
SoD	Estado de descarga (State of discharge)
TEE	Eficiencia energética total (Total energy efficiency)
TTW	Tanque a la rueda (Tank to wheel)
VGE	Densidad de energía gravimétrica del vehículo (Vehicle gravimetric energy density)
WTT	Pozo al tanque (Well to tank)
WTW	Pozo a la rueda (Well to wheel)
ZEV	Vehículo de emisiones cero (zero-emissions vehicle)
coef.	Coefficiente
nro.	Número

Índice general

Agradecimientos	VI
Resumen	VIII
Abstract	XI
Resumo	XIII
Abreviaturas	XV
1. Introducción	1
1.1. Panorama energético mundial	1
1.2. Almacenamiento de la energía	3
1.3. Almacenamiento electroquímico	4
1.4. Transporte sostenible	7
1.5. Sistemas vehiculares alternativos	9
1.6. Vehículos híbridos	12
1.7. Motivación y estructura de la tesis	13
2. Modelado matemático de baterías de ion-litio	15
2.1. Aspectos básicos de las baterías de iones de litio	15
2.2. Diferentes composiciones químicas de baterías	17
2.3. Geometría y formatos de celda	18
2.4. Modelos matemáticos de baterías de ion litio	19
2.4.1. Modelado semi-empírico	21

2.4.2.	Modelado P2D	22
2.4.3.	Ecuaciones del modelo P2D	23
2.4.4.	Modelado térmico y ecuaciones	27
2.5.	Parametrización del modelo	29
2.5.1.	Trabajo experimental	30
2.5.2.	Parámetros del modelo	31
2.6.	Validación experimental del modelo P2D	42
2.6.1.	Modelo térmico de una celda	43
2.6.2.	Modelo térmico del paquete de baterías	46
2.7.	Conclusión	50
3.	Aplicaciones del modelo matemático de baterías de litio	51
3.1.	Condiciones de refrigeración	52
3.1.1.	Flujo de aire de 5 cm/s	52
3.1.2.	Flujo de aire de 10 cm/s	53
3.1.3.	Flujo de aire de 50 cm/s	56
3.2.	Conclusión	58
4.	Análisis del pozo a la rueda de cuatro tipos de buses	61
4.1.	Método	66
4.1.1.	Etapa del pozo al tanque (WTT)	68
4.1.2.	Etapa del tanque a la rueda (TTW)	70
4.1.3.	Índices relevantes	78
4.1.4.	Integración de los índices	82
4.2.	Resultados	82
4.2.1.	Escenario 2017	83
4.2.2.	Escenario 2030	87
4.3.	Extensión del estudio a Brasil y Chile	88
4.3.1.	Brasil WTT	88
4.3.2.	Chile WTT	89

4.3.3. Resultados Brasil 2017	90
4.3.4. Resultados Brasil 2030	90
4.3.5. Resultados Chile 2017	92
4.3.6. Resultados Chile 2030	93
4.4. Discusión	93
4.5. Conclusión	94
5. Optimización del manejo de la energía en un vehículo híbrido	99
5.1. Estado del arte	100
5.2. Objetivos	101
5.3. Modelo del vehículo y descripción del tren de potencia	102
5.3.1. Modelo de celda de combustible	104
5.3.2. Modelo de batería	106
5.3.3. Simplificación del modelo de celda de combustible	106
5.4. Ciclos de manejo	107
5.5. Método de optimización	109
5.5.1. Descripción del método	110
5.6. Resultados de optimización	112
5.7. Sistema de manejo de energía con redes neuronales	114
5.8. Resultados	118
5.9. Clasificación de los ciclos de conducción	119
5.10. Resultados comparativos	121
5.11. Conclusión	122
6. Comentarios finales	125
Bibliografía	129

Índice de figuras

1.1. Impacto de las energías renovables en la matriz eléctrica global en 2017	2
1.2. Evolución de la capacidad global de energía renovable 2007-2017 . . .	2
1.3. Energía primaria en Argentina en 2016	4
1.4. Comparación de tecnologías de almacenamiento por densidad volumétrica de energía y potencia	5
1.5. Comparación de tecnologías de almacenamiento por densidad gravimétrica de energía y potencia	6
1.6. Emisiones globales y de América Latina de dióxido de carbono provenientes del uso de combustibles.	8
1.7. Densidad urbana y consumo energético relacionado con el transporte.	9
1.8. Evolución del stock mundial de vehículos eléctricos, 2013-2017	11
2.1. Esquema de una celda electroquímica de iones de litio.	16
2.2. Comparación de las diferentes químicas de electrodo positivo. (a) Cuota de mercado de las químicas de electrodo positivo dominantes. (b) Comparación cualitativa de propiedades importantes para diferentes químicas de baterías.	18
2.3. Diferentes formatos de baterías. (a) Celda botón o moneda. (b) Batería cilíndrica. (c) Celda pouch. (d) Batería prismática.	19
2.4. Tipos de modelos de baterías de ion-litio.	19
2.5. Diagrama del funcionamiento del modelo de batería.	22
2.6. Esquema de una celda elemental de ion litio y su modelado P2D. . .	24
2.7. Procedimiento de carga a corriente constante (CC) y voltaje constante (CV).	30

2.8. Setup experimental.	31
2.9. Desarme de la Batería.	32
2.10. Potenciales de equilibrio vs. Li/Li ⁺ . (a) Electrodo negativo. (b) Electrodo positivo.	33
2.11. Número de transferencia en el electrolito.	34
2.12. Coeficiente de dependencia de actividad en el electrolito.	35
2.13. Coeficiente de conductividad del electrolito.	35
2.14. Coeficiente de difusión en el electrolito.	36
2.15. Coeficiente entrópico para ambos electrodos.	37
2.16. Mallado de modelos térmicos.	43
2.17. Paquete de batería de 24 celdas.	44
2.18. Perfil de potencial y temperatura de la batería para una descarga a 0,2C. 45	
2.19. Perfil de potencial y temperatura de la batería para una descarga a 0,5C. 45	
2.20. Perfil de potencial y temperatura de la batería para una descarga a 1C. 45	
2.21. Perfil de potencial y temperatura de la batería para una descarga a 2C. 46	
2.22. Ubicación de la termocupla.	47
2.23. Perfil de corriente usado para la comprobación experimental y la simulación.	47
2.24. Modelo 3D del paquete de baterías con la ubicación de la termocupla. 48	
2.25. Perfil de potencial obtenido en test experimental y en la simulación. . 48	
2.26. Perfil de temperatura obtenido en test experimental y en la simulación. 48	
2.27. Perfil de temperaturas sobre corte transversal del paquete de la batería. 49	
2.28. Perfil de temperaturas sobre la superficie del paquete de baterías. . . 49	
3.1. Líneas de corriente (en m/s) del flujo de aire y temperatura superficial (en K) sobre el paquete de baterías a flujo de 5 cm/s. Vista del plano xy.	53
3.2. Líneas de corriente (en m/s) del flujo de aire y temperatura superficial (en K) sobre el paquete de baterías a flujo de 5 cm/s. Vista del plano yz.	53

3.3. Temperatura en el pack de baterías a flujo de 5 cm/s. Vista en corte sobre la mitad de la altura de las celdas.	54
3.4. Temperatura en el pack de baterías a flujo de 5 cm/s. Perfil de temperatura máxima y mínima en el material activo.	54
3.5. Líneas de corriente (en m/s) del flujo de aire y temperatura superficial (en K) sobre el paquete de baterías a flujo de 10 cm/s. Vista del plano xy.	55
3.6. Líneas de corriente (en m/s) del flujo de aire y temperatura superficial (en K) sobre el paquete de baterías a flujo de 10 cm/s. Vista del plano yz.	55
3.7. Temperatura en el pack de baterías a flujo de 10 cm/s. Vista en corte sobre la mitad de la altura de las celdas.	56
3.8. Temperatura en el pack de baterías a flujo de 10 cm/s. Perfil de temperatura máxima y mínima en el material activo.	56
3.9. Líneas de corriente (en m/s) del flujo de aire y temperatura superficial (en K) sobre el paquete de baterías a flujo de 50 cm/s. Vista del plano xy.	57
3.10. Líneas de corriente (en m/s) del flujo de aire y temperatura superficial (en K) sobre el paquete de baterías a flujo de 50 cm/s. Vista del plano yz.	57
3.11. Temperatura en el pack de baterías a flujo de 50 cm/s. Vista en corte sobre la mitad de la altura de las celdas.	58
3.12. Temperatura en el pack de baterías a flujo de 50 cm/s. Perfil de temperatura máxima y mínima en el material activo.	58
4.1. Esquema gráfico del método propuesto.	65
4.2. Fuentes de energía, procesos de transporte y distribución, y combustibles y vectores energéticos de interés.	67
4.3. Método de análisis TTW.	68
4.4. Tecnologías y tasa de participación en la generación de energía eléctrica en Argentina.	69
4.5. Diagrama de componentes para los distintos trenes de potencia.	71
4.6. Ciclos de manejo.	78

4.7. Eficiencia total (TEE) en el escenario 2017.	84
4.8. Resultados de eficiencia del consumo para las etapas TTW y WTW.	84
4.9. Resultado de emisiones de CO en la etapa WTW.	85
4.10. Resultado de emisiones de NOx en la etapa WTW.	85
4.11. Gráficos de araña para el escenario de Argentina 2017.	86
4.12. Gráficos de araña para el escenario de Argentina 2030.	87
4.13. Matriz eléctrica de Brasil.	88
4.14. Matriz eléctrica de Chile.	90
4.15. Gráficos de araña para el escenario de Brasil 2017.	91
4.16. Gráficos de araña para el escenario de Brasil 2030.	91
4.17. Gráficos de araña para el escenario de Chile 2017.	92
4.18. Gráficos de araña para el escenario de Chile 2030.	93
4.19. Índice Integrado para Argentina en los escenarios 2017 & 2030, para todos los ciclos y todas las autonomías.	95
4.20. Índice Integrado para Brasil en los escenarios 2017 & 2030, para todos los ciclos y todas las autonomías.	95
4.21. Índice Integrado para Chile en los escenarios 2017 & 2030, para todos los ciclos y todas las autonomías.	96
5.1. Esquema del tren de potencia.	102
5.2. Fuerzas actuantes sobre el vehículo.	103
5.3. Validación del modelo ARX.	107
5.4. Perfil de velocidad de los ciclos de manejo.	108
5.5. Frecuencia de potencias para los casos óptimos.	113
5.6. Esquema Sankey del flujo de energías en el FCHEV (no a escala).	115
5.7. Resultados de la función de costo.	116
5.8. Diagrama de bloques de la red neuronal.	117
5.9. Flujo de hidrógeno (g/s) y <i>SoD</i> para el caso óptimo y para la gestión con EMS.	120
5.10. Comparación del consumo equivalente por kilómetro (g/km) y la diferencia porcentual con respecto al caso base.	122

Índice de tablas

2.1. Medidas obtenidas en el laboratorio.	32
2.2. Fracciones volumétricas.	36
2.3. Parámetros a optimizar y valores usados durante la optimización. . .	39
4.1. Parámetros del Bus.	67
4.2. Peso de todos los sistemas en todos los ciclos, en kg.	73
4.3. Parámetros usados en el modelo de la batería.	74
4.4. Parámetros del FCS.	75
4.5. Ecuaciones claves electro-química, balance de masa y de planta, y modelo térmico de celda de combustible.	77
4.6. Índices relevantes.	78
4.7. Parámetros del índice de emisión.	81
4.8. Pesos ponderados para el índice II.	82
5.1. Parámetros del vehículo.	105
5.2. Principales características de los ciclos de manejo.	109
5.3. Análisis de los datos del manejo óptimo de la energía.	113
5.4. Error relativo entre el caso óptimo y la respuesta del EMS para el consumo equivalente.	118
5.5. H ₂ consumido y <i>SoD</i> para el caso base, caso óptimo y estrategia basada en NN.	121

Capítulo 1

Introducción

1.1. Panorama energético mundial

El año 2017 fue otro récord para el sector de generación de energía renovable, caracterizado por el mayor aumento en la capacidad de energía renovable, así como por la disminución de los costos, el aumento de la inversión y los avances en las tecnologías habilitadoras. Muchos desarrollos durante el año afectaron el despliegue de energía renovable, incluidas las ofertas más bajas de energía solar y eólica en varios países del mundo, la mayor atención a la electrificación del transporte, una serie de jurisdicciones que se comprometen a reducir sus emisiones de dióxido de carbono, etc. Varias tecnologías de energía renovable, como la energía hidroeléctrica, los biocombustibles y la energía geotérmica, se han establecido desde hace mucho tiempo como fuentes de energía convencionales y rentables (ver figura 1.1). La energía solar fotovoltaica y la energía eólica se unen a ellas: ambas son ahora competitivos en un número cada vez mayor de lugares, y se están acercando a ser competitivos con la generación de energía nuclear y combustible fósil existente [1].

El crecimiento en el despliegue y la producción de energía renovable continuó en 2017, en particular en el sector eléctrico, gracias a varios factores, entre los que se incluyen: el aumento del acceso a la financiación, preocupaciones por la seguridad energética, el medio ambiente y la salud humana, la creciente demanda de energía en las economías en desarrollo y emergentes, la necesidad de acceso a electricidad e instalaciones de cocina limpias; e iniciativas políticas dedicadas y objetivos ambiciosos.

La capacidad de generación de energía renovable registró su mayor incremento anual en 2017, aumentando la capacidad total instalada en casi un 9% en comparación con 2016. Como se puede ver en la figura 1.2, la capacidad total de energía

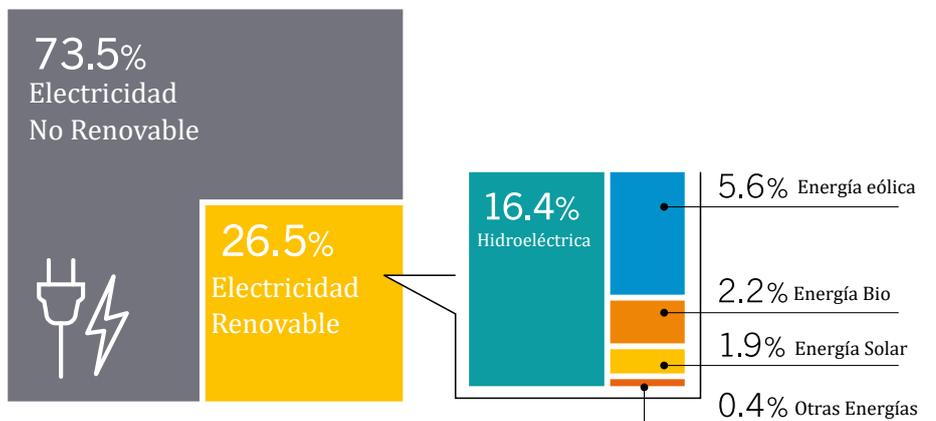


Figura 1.1: Impacto de las energías renovables en la matriz eléctrica global en 2017

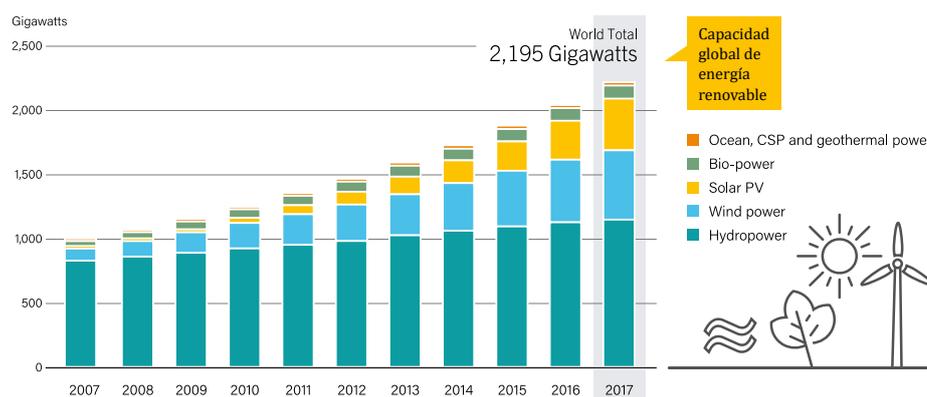


Figura 1.2: Evolución de la capacidad global de energía renovable 2007-2017

renovable se duplicó con creces en la década 2007-2017, y la capacidad de las energías renovables no hidroeléctricas aumentó más de seis veces. Las energías renovables representaron aproximadamente 70 % de las adiciones netas a la capacidad de energía global en 2017, debido en gran parte a las continuas mejoras en el costo-competitividad de la energía solar fotovoltaica y la energía eólica. La energía solar fotovoltaica lideró el camino, representando casi 55 % de la capacidad de energía renovable instalada en 2017. Se agregó más capacidad de energía solar fotovoltaica que las adiciones netas de combustibles fósiles y energía nuclear combinadas. La energía eólica y la energía hidroeléctrica representaron la mayor parte de las adiciones de capacidad restantes, aportando más de 29 % y casi 11 %, respectivamente. Al final del año 2017, la capacidad global de energía renovable totalizaba alrededor de 2195 GW, suficiente para suministrar aproximadamente 26,5 % de la electricidad global, y la energía hidroeléctrica proveía aproximadamente el 16,4 % (ver figura 1.1)

1.2. Almacenamiento de la energía

Las tecnologías de almacenamiento de energía eléctrica (EES por su sigla en inglés: Electrical Energy Storage) son vitales para la descarbonización de la economía global, la cual implica un proceso de reducción de emisiones de carbono, sobre todo en forma de dióxido de carbono. Se las considera como la tecnología habilitadora mediante la cual las fuentes de energía renovables intermitentes pueden brindar una mayor contribución a la producción total de electricidad de lo que es posible con las redes convencionales.

Como se muestra en la figura 1.3, en 2016 la producción primaria de energía renovable en Argentina representó el 11 % del consumo bruto de energía primaria y llegó a los 8056 miles de toneladas equivalentes de petróleo (toe). Entre las energías renovables, la fuente más importante fue la biomasa (biocombustibles sólidos) y los residuos renovables (por ejemplo biogás), que representan aproximadamente 57 % del total. La energía hidroeléctrica fue el otro contribuyente principal del mix de energía renovable (41 % del total). Las “nuevas” energías renovables como la solar y la eólica representaron, respectivamente, 2,2 % y >0.01 % del total para Argentina. Por lo tanto, la escena todavía está muy dominada por las “viejas” (convencionales) energías renovables. Sin embargo, para alcanzar los objetivos posteriores a 2020, se requiere la penetración de “nuevas” energías renovables como la solar y la eólica. Estas fuentes tienen una densidad de potencia más alta que la biomasa, por lo que podrían ajustarse mejor a nuestras necesidades. Sin embargo, debe resolverse el

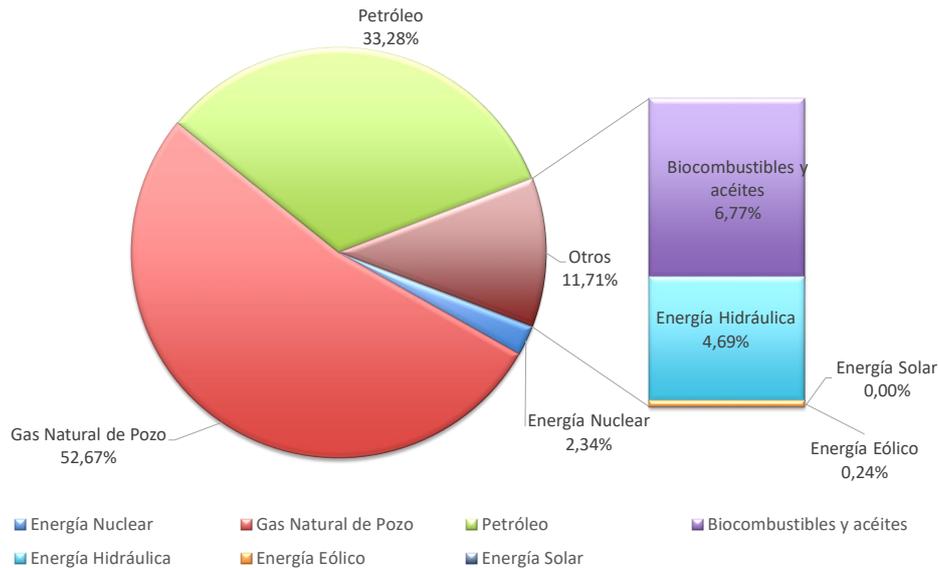


Figura 1.3: Energía primaria en Argentina en 2016

problema de la intermitencia, para esto la alternativa más alentadora es desarrollar soluciones de almacenamiento de energía eléctrica a granel para que sean rentables, de alta densidad energética y confiables. Múltiples motivos, como las preocupaciones por el cambio climático, la calidad del aire, el alto costo de las importaciones de energía, etc. provocan estos objetivos y políticas de la región. Las tecnologías de EES pueden proporcionar una gama de servicios para compensar muchas preocupaciones que surgen en tal situación. En pocas palabras, el papel de EES es desacoplar el equilibrio instantáneo entre la oferta y la demanda, que es un requisito de un sistema de energía estable.

1.3. Almacenamiento electroquímico

El eficaz aprovechamiento de estas fuentes de energías alternativas y renovables requiere, casi indefectiblemente, del desarrollo de vectores energéticos adecuados, prácticos y robustos. El almacenamiento de energía es posible a través de diversos medios, tales como el almacenamiento mecánico, eléctrico, químico y electroquímico. Durante más de un siglo, el almacenamiento de energía en el sector eléctrico ha estado dominado por el almacenamiento de energía hidroeléctrica bombeada (PHES). En las últimas décadas, se han desarrollado muchas tecnologías nuevas de EES como el almacenamiento de energía de aire comprimido (CAES), volantes, superconductores de almacenamiento de energía magnética (SMES), supercondensadores, baterías recargables, celdas de combustible, etc.

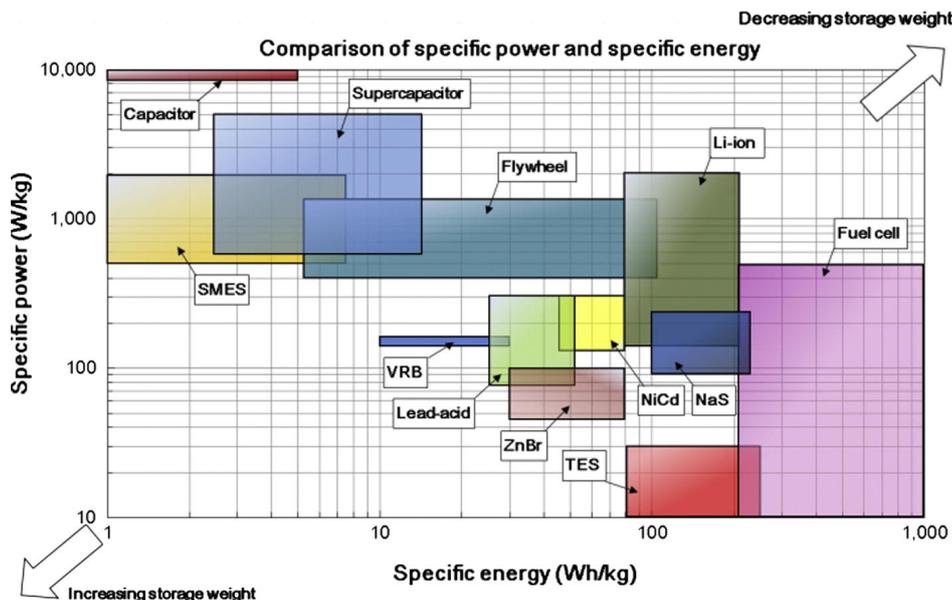


Figura 1.4: Comparación de tecnologías de almacenamiento¹ densidad volumétrica de energía y potencia [2]

Estas tecnologías EES tienen características muy diversas. Una forma común de comparar las tecnologías de almacenamiento es usar un diagrama de Ragone como el de la figuras 1.4 y 1.5 las cuales se usan para comparar diferentes sistemas de almacenamiento de energía. Mientras que la figura 1.4 compara las tecnologías en función del peso o densidad gravimétrica, el gráfico de la figura 1.4 las compara en función del volumen o densidad volumétrica. Estos gráficos muestran en abscisas cuanta energía tiene disponible el sistema, y en ordenadas la potencia que puede desarrollar, es decir cuán rápido se puede entregar esa energía. Estas dos gráficas se centran en la capacidad de almacenamiento, lo que muestra una imagen incompleta de la idoneidad de un dispositivo de almacenamiento de energía para una aplicación. Una análisis más completo debería incluir la eficiencias de cada uno de los sistemas, parámetros operacionales como tiempo de carga, costos, emisiones al medio ambiente en su ciclo de vida y disposición final.

Una batería o una celda de combustible son dispositivos que convierten energía química almacenada en corriente eléctrica y se componen de tres componen-

¹Las abreviaciones corresponden a: Flywheel: Volante de inercia, Fuel Cell: Celda de combustible, Lead-Acid: Batería de plomo ácido, Li-ion: Baterías de ión-litio, NaS: Batería de sodio-sulfuro, NiCd: Baterías de Niquel-Cadmio, SMES: Almacenamiento de energía magnética por superconducción, TES: Almacenamiento de calor, VRB: Batería redox de vanadio, ZnBr: Batería de zinc-bromuro

²Las abreviaciones corresponden a: CAES: Almacenamiento de energía de aire comprimido, Flywheel: Volante de inercia, Fuel Cell: Celda de combustible, Lead-Acid: Batería de plomo ácido, Li-ion: Baterías de ión-litio, NaS: Batería de sodio-sulfuro, NiCd: Baterías de Niquel-Cadmio, PHS: Almacenamiento hidráulico por bombeo, PBS: Batería polisulfuros de bromuro, SMES: Almacenamiento de energía magnética por superconducción, VRB: Batería redox de vanadio, ZnBr: Batería de zinc-bromuro

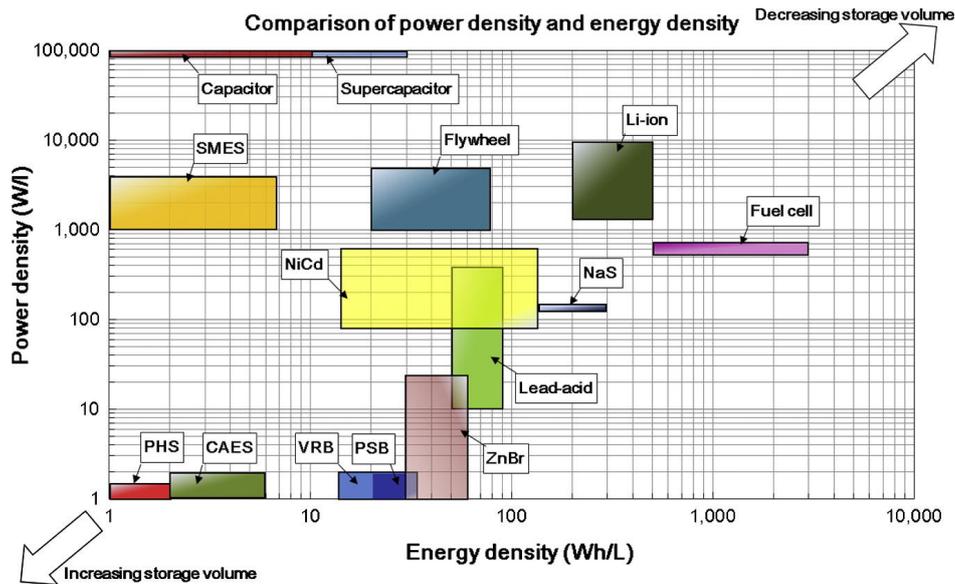


Figura 1.5: Comparación de tecnologías de almacenamiento² por densidad gravimétrica de energía y potencia [2]

tes principales: el electrodo positivo, el electrodo negativo y el electrolito. Algunas características diferencian a las baterías y celda de combustible de otras opciones de almacenamiento para muchas aplicaciones. A diferencia de PHES y CAES, las baterías y celdas son modulares e independientes de la ubicación. No tienen partes mecánicas móviles a diferencia de los volantes de inercia. En comparación con CAES, tienen un tiempo de respuesta rápido. Cuando se consideran los costos y las eficiencias, las baterías parecen ser una mejor opción que las celdas de combustible. En cuanto a la madurez del mercado, las baterías, están muy por delante de los supercondensadores o las celdas de combustible. Por sus densidades de energía y potencia combinadas con otras características favorables convierten a las baterías en una opción atractiva para el almacenamiento de energía eléctrica. En conjunto, estas propiedades también abren otras vías para su aplicación, más allá de los servicios de la red. Estos incluyen el uso en sistemas aislados, en áreas rurales, como módulos de energía de emergencia y en vehículos eléctricos. La generación electroquímica de hidrógeno y su uso en celdas de combustible del tipo PEM, también resultan muy convenientes, no solo para uso como sistemas estacionarios de producción de energía eléctrica sino para el uso en sistema de transporte (vehículos eléctricos).

Las baterías recargables de iones de litio, también conocidas como baterías de litio secundarias, han existido desde 1991, cuando Sony introdujo la primera batería comercial. Sin embargo, el interés y la investigación en baterías de litio son más antiguas que eso. Entre todos los metales, el litio es el más ligero, tiene el potencial de electrodo más negativo y la densidad de energía más alta, lo que lo convierte en

un material atractivo para las celdas electroquímicas. Las celdas primarias de litio ya se comercializaron en la década de 1970. Estos incluían compuestos químicos tales como dióxido de azufre y litio (Li/SO_2), cloruro de tionilo y litio (Li/SOCl_2), etc. [3]

Fue con el descubrimiento de la rápida conducción de los iones de litio en una red de conducción electrónica que contiene átomos de metales de transición en estado de valencia mixta que se pudo progresar hacia las baterías recargables. En 1970 y 1980 se intentó comercializar baterías de litio - sulfuro de titanio (Li/TiS_2) y de litio - sulfuro de molibdeno (Li/MoS_2) [3, 4]. Pero el uso de litio metálico como electrodo negativo en estas baterías limitó su éxito comercial. Estos electrodos metálicos tenían la tendencia a formar dendritas y depósitos de polvo con lo cual los fenómenos de cortocircuito eran comunes. La atención pronto cambió al uso de material de intercalación de litio como electrodo negativo en lugar de litio metálico. H. Ikeda de Sanyo patentó el grafito como material de intercalación en un solvente orgánico en junio de 1981 (Patente japonesa N°1769661). Esto fue seguido muy de cerca por S. Basu de Bell Laboratories, quien presentó la patente de EE. UU. N°4423125 en 1982 basándose en la intercalación de litio en grafito a temperatura ambiente [4].

Los óxidos metálicos (Li_xMO_2) donde $M = \text{Ni}, \text{Mn}, \text{Co}$ se descubrieron casi al mismo tiempo, su uso como electrodos positivos conduce a voltajes más altos en estas baterías. Goodenough presentó la patente para usar LiCoO_2 como un material de electrodo positivo de intercalación en 1980. Estos esfuerzos de investigación sobre electrodos positivos y negativos culminaron en la primera batería comercial de iones de litio lanzada en 1991 por Sony, que se basó en un electrodo negativo de grafito y un electrodo positivo de LiCoO_2 [5].

1.4. Transporte sostenible

Como muestra la figura 1.6, las emisiones de gases de efecto invernadero (GEI o GHG por sus siglas en inglés) en muchos países latinoamericanos han aumentado en forma significativa durante los últimos años (imagen de la derecha) y representan un porcentaje significativamente más grandes que las globales (imagen de la izquierda). El transporte contribuye con una porción sustancial de las emisiones antropogénicas de GEI y, por lo tanto, podría desempeñar un papel significativo en su reducción. Ya sea por tierra, aire, agua u otras modalidades, representó 15 % de las emisiones globales de GEI, y 23 % de las emisiones de GEI provenientes de combustibles fósiles en 2009, como se muestra en la figura 1.6.

No obstante, la contribución del sector del transporte podría alcanzar hasta 21 %

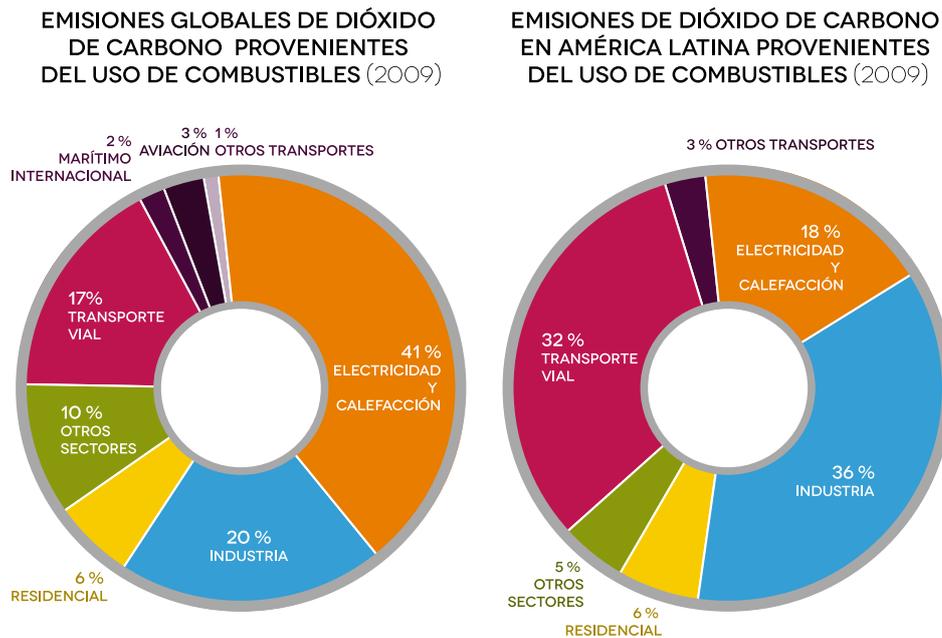


Figura 1.6: Emisiones globales y de América Latina de dióxido de carbono provenientes del uso de combustibles [6].

de las emisiones globales de GEI cuando se incluye el impacto del ciclo de vida completo o “del pozo a la rueda” (well-to-wheel) de los vehículos automotores. Este ciclo incluye las emisiones de GEI relacionadas con la producción y distribución de combustibles, y con la fabricación, el mantenimiento y el desmantelamiento de vehículos automotores. Si se incluye la producción y el mantenimiento de la infraestructura de transporte, con su contenido material derivado, su participación habrá de aumentar más. La mayoría de las metodologías existentes no explican los impactos de GEI del ciclo de vida completo de los proyectos y programas de transporte además de la combustión, aunque algunas de ellas se han desarrollado para analizar específicamente el impacto producido por la construcción de infraestructura, y algunas podrían agregar emisiones de “ciclo completo de combustible” para explicar la producción y distribución de combustibles.

El sector del transporte presenta importantes oportunidades para mitigar el cambio climático, al tiempo que promueve el desarrollo social de una manera económicamente eficiente. Los proyectos para reducir las emisiones de GEI en el sector del transporte – especialmente el transporte masivo, el transporte no motorizado– pueden no solamente reducir las emisiones de dichos gases en comparación con las tendencias habituales (business as usual o BAU) de rápida motorización y desarrollo urbano disperso, sino también mejorar la salud pública, disminuir la desigualdad social y optimizar la competitividad económica de las ciudades [7]. Como muestra la figura 1.7, hay una relación significativa entre la densidad urbana y el consumo

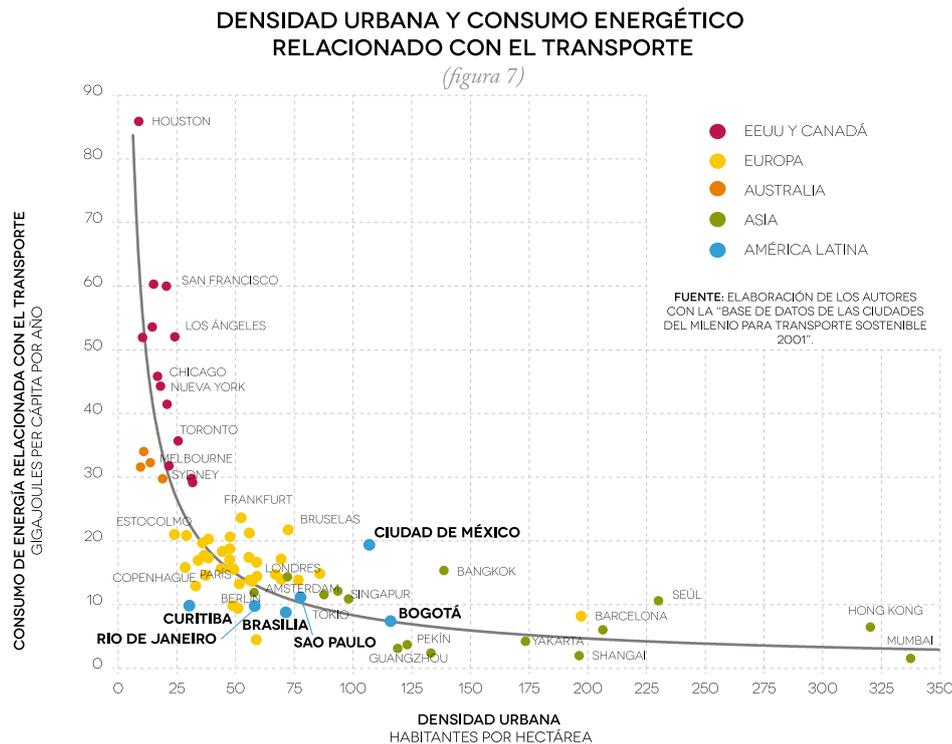


Figura 1.7: Densidad urbana y consumo energético relacionado con el transporte [6].

energético relacionado con el transporte, pero las ciudades con densidad general comparable como Ciudad de México y Bogotá, pueden alcanzar un consumo energético bastante diferente en virtud de muchos factores, entre ellos: la inversión en transporte y las políticas de gestión.

1.5. Sistemas vehiculares alternativos

El siguiente desafío tecnológico para los productores de baterías y celdas de combustible es su implementación en los vehículos eléctricos. Estos vehículos funcionan con motores eléctricos que no contaminan el ambiente durante su funcionamiento y presentan una eficiencia hasta tres veces mayor que los motores a combustión. Sumado a esto, la utilización de electricidad como fuerza impulsora permite independizarse de los combustibles fósiles y recurrir a fuentes renovables de energía, disminuyendo notablemente el impacto ambiental generado por el transporte. El mayor limitante de los vehículos eléctricos es su autonomía, que viene determinada por la densidad de energía del vector energético utilizado. Si bien los primeros vehículos eléctricos surgieron en la década de 1880, fueron reemplazados rápidamente por los vehículos a combustión interna debido al bajo costo de producción de estos últimos. Con el aumento del precio del combustible y el notorio efecto negati-

vo que tiene su uso en el medio ambiente, los vehículos eléctricos volvieron a ser de interés para el mercado. Hace ya más de dos décadas se empezaron a producir en serie los vehículos híbridos que combinan un motor a combustión interna con uno o más motores eléctricos.

Se estima que el tráfico vehicular insume 18 millones de barriles de petróleo por día [8]. Nuestros vehículos emiten 2,7 millones de toneladas de dióxido de carbono por año, sin embargo, en los últimos años, de los sectores de uso final, el sector del transporte logró la mayor reducción de emisiones, obtenida mediante el endurecimiento de los estándares de ahorro de combustible. No obstante, la participación de este sector en las emisiones sigue siendo muy alta y también es uno de los principales consumidores de recursos fósiles (en 2016 representó 64,8 % del consumo mundial de petróleo [9]), siendo uno de los principales contribuyentes al consumo mundial de energía. El empleo de sistemas de propulsión innovadores, como los vehículos eléctricos a batería (BEV por su sigla en inglés), los vehículos eléctricos híbridos de celda de combustible (FCHEV por su sigla en inglés) y los vehículos eléctricos híbridos (HEV por su sigla en inglés) parecen ser un paso muy prometedor hacia la reducción de la energía, la protección del medio ambiente global y local, y un crecimiento económico más sostenible. [10].

En la actualidad, en el sector del transporte, los vehículos con motor de combustión interna (ICEV por su sigla en inglés) son los más usados, pero es inevitable que una nueva tecnología los reemplace y todo parece indicar que la tecnología será el vehículo eléctrico [11, 12]. El interés en los vehículos eléctricos ha aumentado rápidamente en los últimos años. Los vehículos eléctricos alimentados por baterías son la principal tecnología utilizada (ver figura 1.8) y en menor medida los vehículos híbridos a baterías enchufables (PHEV por su sigla en inglés). Los vehículos de celdas de combustible son los menos utilizados debido a la falta de infraestructura para el reabastecimiento del hidrógeno [13]. Aun así los sistemas de celdas de combustible (FCS) podrían convertirse en la principal fuente de energía de los vehículos eléctricos en las próximas décadas, no solo en sistemas terrestres sino también en sistemas aéreos y navales [14, 15]. El registro de automóviles eléctricos (incluyendo los híbridos plug-in y eléctricos) aumentaron 70 % entre 2014 y 2015, con más de 550.000 vehículos vendidos en todo el mundo en 2015[16].

La flota mundial de autobuses es de aproximadamente 3 millones, de los cuales, 385.000 son eléctricos o híbridos eléctricos, lo cual representa 13 % del total [17].

El stock global de vehículos eléctricos de celda de combustible (FCEV) alcanzó las 8.000 unidades en 2018, y Estados Unidos y Japón representaron casi 90 % de la flota mundial. Estados Unidos representa la flota más grande con 4.500 de FCEV,

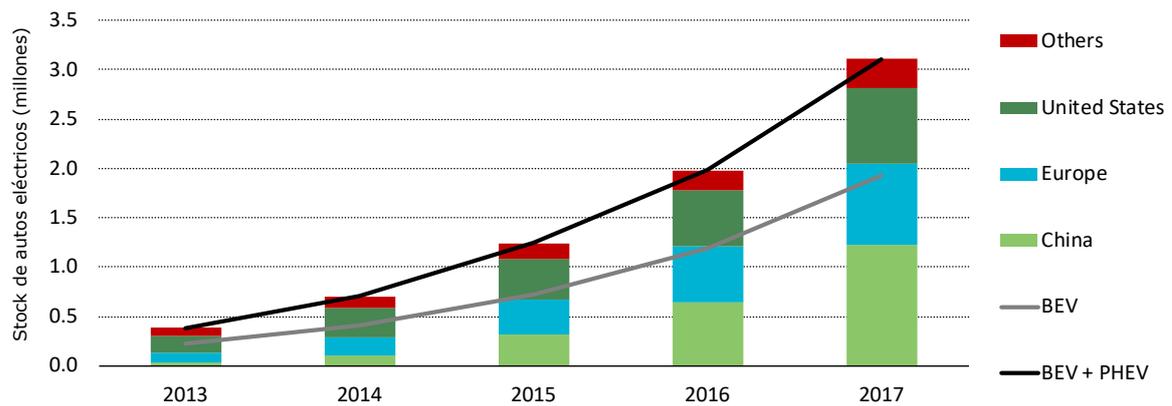


Figura 1.8: Evolución del stock mundial de vehículos eléctricos, 2013-2017 [13]

principalmente registrada en California, donde el Programa de Vehículos de Emisión Cero ha impulsado las ventas. Japón tiene el segundo mayor stock de FCEV con 2.400 unidades, seguido de Alemania y Francia. Además, se han introducido 150 autobuses FC en China y 60 autobuses FC en Alemania [18].

Los autobuses con celdas de combustible y los eléctricos con batería tienen algunas ventajas claves sobre los ICEV, ya que no producen emisiones contaminantes directamente de su funcionamiento, son silenciosos y altamente eficientes [19]. Sus emisiones son relacionadas con la producción de electricidad e hidrógeno. Esto es especialmente ventajoso en los centros urbanos donde normalmente hay mucho tráfico y la calidad del aire puede ser deficiente [20].

El uso de celdas de combustible para el tránsito reduce la dependencia del petróleo y los efectos adversos de las fluctuaciones de los precios. Por estas razones, los vehículos eléctricos de celda de combustible están avanzando hacia la comercialización y el número de fabricantes de FCEB y de FC aumenta de manera constante [21].

Desde el punto de vista del costo del servicio de transporte, Lin et al. [22] estudiaron la disposición de la gente a pagar más por la adopción de nuevos autobuses de energía en las cuatro ciudades más desarrolladas de China. Los resultados muestran que aproximadamente 80 % de los encuestados en las cuatro ciudades les gustaría pagar una tarifa más alta para apoyar la adopción de autobuses propulsados con energías renovables.

Sin embargo, existen importantes barreras tecnológicas, como el rango de conducción limitado de esos vehículos y la falta de infraestructura de carga de hidrógeno y de baterías, que aún impiden el uso generalizado de EVs [23]. Para los BEV, las barreras técnicas se asocian principalmente con la tecnología de la batería [24]. Un desafío importante es la relativamente baja densidad de energía de las baterías,

lo que significa que, para que un vehículo tenga una autonomía similar a la de un ICEV, tienen que ser grandes, pesadas y caras. Por ejemplo, con la tecnología actual, un rango de 200 km en un vehículo sedán requiere aproximadamente 150 kg de celdas de ión litio o más de 500 kg de baterías de plomo ácido.

Con los FCHEV, el problema de la infraestructura es realmente importante [25], hay muy poca infraestructura comercial de reabastecimiento de hidrógeno en el mundo y solo existe en áreas muy localizadas [26]. Esto significa que incluso si una persona desea comprar un FCHEV le será imposible usarlo con normalidad debido a la falta de infraestructura [27]. Por otro lado, los autobuses urbanos híbridos diésel se estiman en alrededor de 30-50 % más caros que los autobuses diésel convencionales [20]. La variación puede explicarse en parte por las diferentes tecnologías híbridas [28].

1.6. Vehículos híbridos

Los principales fabricantes de vehículos, entre ellos Toyota, Renault, BMW, Peugeot y Nissan, han dado un primer paso hacia el vehículo limpio y energéticamente eficiente introduciendo en el mercado vehículos híbridos que combinan motores de combustión interna con baterías, como son los automóviles ActiveHybrid5, 3008 Hybrid4 y Toyota Prius, y vehículos eléctricos propulsados únicamente por baterías como pueden ser el Twizy, Fluence Ze, iOn, o Leaf. A pesar de que se estima una creciente cuota de mercado en ventas de vehículos eléctricos, aún quedan barreras tecnológicas por vencer que impiden la sustitución definitiva de los vehículos de combustión interna. Los vehículos propulsados por celdas de combustible empiezan a ser considerados como una alternativa firme a los vehículos puramente eléctricos, a pesar de la necesidad de mejorar aspectos tecnológicos relacionados con el almacenamiento del hidrógeno, la creación de redes de distribución de hidrógeno, reducción de costes del vehículo, etc.

El sistema de distribución de potencia de un vehículo eléctrico propulsado por celdas de combustible está formado por celdas de combustible como fuente de energía principal, un conjunto de convertidores de potencia, unidireccionales o bidireccionales, y por sistemas acumuladores de energía, que suelen ser baterías y/o supercondensadores [29]. En función del número, ubicación y naturaleza de los convertidores de potencia y de los sistemas acumuladores de energía, existen multitud de posibilidades en cuanto al diseño de una arquitectura de distribución de potencia, aún más si se tienen en cuenta la estrategia de control, la gestión de la potencia

y el almacenamiento de la energía procedente del frenado regenerativo. Debido a la complejidad inherente a este tipo de sistemas, es necesario el uso de herramientas de simulación que permitan llevar a cabo un diseño y análisis óptimos del sistema de distribución de potencia eléctrica completo, para lo que resulta imprescindible disponer de modelos dinámicos de todos los subsistemas que integran una arquitectura de distribución de potencia, desde las celdas de combustible hasta el propio vehículo.

Por otro lado, tanto el dimensionamiento como la selección del sistema de distribución de potencia eléctrica más adecuado para un vehículo es una tarea compleja y con grandes repercusiones sobre la masa, volumen, coste, eficiencia, consumo y autonomía del vehículo. La gestión de los sistemas híbridos de generación involucra tanto el control de las diferentes fuentes y almacenadores como así también la gestión óptima de los flujos de potencia con el objetivo de reducir el consumo de hidrógeno de las celdas de combustible satisfaciendo el balance de potencia. De esta manera se podrá conseguir un sistema de generación eficiente y confiable al menor costo posible.

1.7. Motivación y estructura de la tesis

La presente tesis tiene como objetivo fundamental desarrollar herramientas prácticas que puedan ser útiles para el estudio, aplicación y toma de decisiones en el marco de la movilidad sustentable. Dentro de esta tesis se estudia con detenimiento la incorporación de las baterías de ion litio como parte fundamental de los vehículos de emisión cero. La investigación presentada en esta tesis está inspirada en la búsqueda para aprovechar al máximo la batería de ion-litio para su uso en vehículos eléctricos, pero de una manera segura y que cause su menor degradación posible. Para operar las baterías de manera segura es importante comprender su comportamiento en diferentes condiciones de descarga. Los modelos precisos que pueden predecir el comportamiento electroquímico y térmico de las baterías en condiciones de funcionamiento amplias son necesarios para rastrear estos índices de rendimiento y seguridad. Por lo tanto, uno de los principales objetivos de éste trabajo fue desarrollar modelos computacionales de estas baterías, que permitan su acoplamiento con estudios teóricos sobre materiales, haciendo simulaciones que posibiliten prever el funcionamiento de las mismas en diversas condiciones de trabajo. Además este trabajo de investigación estuvo motivado en la aplicación práctica de las baterías de ion litio en los sistemas de movilidad sustentables. Debido a la gran variedad de tecnologías de sistemas de propulsión alternativos para vehículos eléctricos, se

buscó brindar herramientas prácticas que ayuden a los decisores, sean privados o públicos, a tomar decisiones estratégicas con una mirada global; comprendiendo con mayor profundidad, cómo inciden diversos factores energéticos, de uso y ambientales en el desempeño de los diferentes sistemas de propulsión.

En el capítulo 1 se presenta una introducción general sobre el problema de la energía.

En el capítulo 2 se presentan dos modelos de baterías de ion litio. Uno es un modelo empírico que precisa poco poder computacional y es aplicado a estudios a nivel de sistema vehicular en los capítulos siguientes. El segundo es un modelo basado en la Física utilizado para modelar el comportamiento electroquímico y térmico de una celda comercial y se escaló el modelo a un paquete de baterías.

En el capítulo 3 el modelo de paquete de baterías desarrollado anteriormente se simula para diferentes condiciones de enfriamiento.

En el capítulo 4 se realiza un estudio "well to wheel" que permite analizar 4 sistemas diferentes de propulsión teniendo en cuenta los costos energéticos involucrado en la generación y uso de los combustibles y las emisiones generadas,. Este estudio es aplicado en primera instancia a Argentina para el escenario presente y un escenario futuro y luego es extendido a los países vecinos Chile y Brasil.

En el capítulo 5 se presenta la optimización del consumo de hidrógeno para un vehículo de pasajeros propulsado con celdas de combustible y baterías de ion-litio y a partir de esta se propone un algoritmo de control para conseguir un sistema de manejo de la energía aplicable al vehículo en tiempo real.

Capítulo 2

Modelado matemático de baterías de ion-litio

En este capítulo se presentan dos modelos de baterías de ion litio: El primero es un modelo semi-empírico que precisa poco esfuerzo computacional y es aplicado a estudios a nivel sistemas vehicular en los capítulos 4 y 5. El segundo es un modelo pseudo bidimensional (P2D) basado en la física electroquímico acoplado con un modelo térmico tridimensional para una celda cilíndrica comercial con electrodo positivo de LiFePO_4 y posteriormente se escaló el modelo a un paquete de baterías.

2.1. Aspectos básicos de las baterías de iones de litio

Es necesario aclarar las definiciones de celda electroquímica, celda y batería. Una celda electroquímica es una unidad básica que consiste en dos electrodos, un ánodo y un cátodo, electrolito y separador, y exhibe un voltaje entre sus dos terminales. Las celdas y las baterías se han usado indistintamente en este trabajo y se refieren a una o más celdas electroquímicas conectadas eléctricamente.

Una batería que consta de celdas electroquímicas con compuestos de inserción de litio como electrodos tanto negativos como positivos se denomina batería de iones de litio. Estos dos electrodos están aislados eléctricamente entre sí por un separador. Un electrolito impregna los dos electrodos y el separador proporciona un medio conductor para los iones de litio pero no para los electrones. Los iones de litio se mueven entre los dos electrodos, mientras que los electrones se conducen al conectar los dos electrodos externamente. La dirección del movimiento de los iones de litio depende de si la celda se está cargando o descargando. Se puede ver una representación de una unidad electroquímica de una celda de iones de litio en la

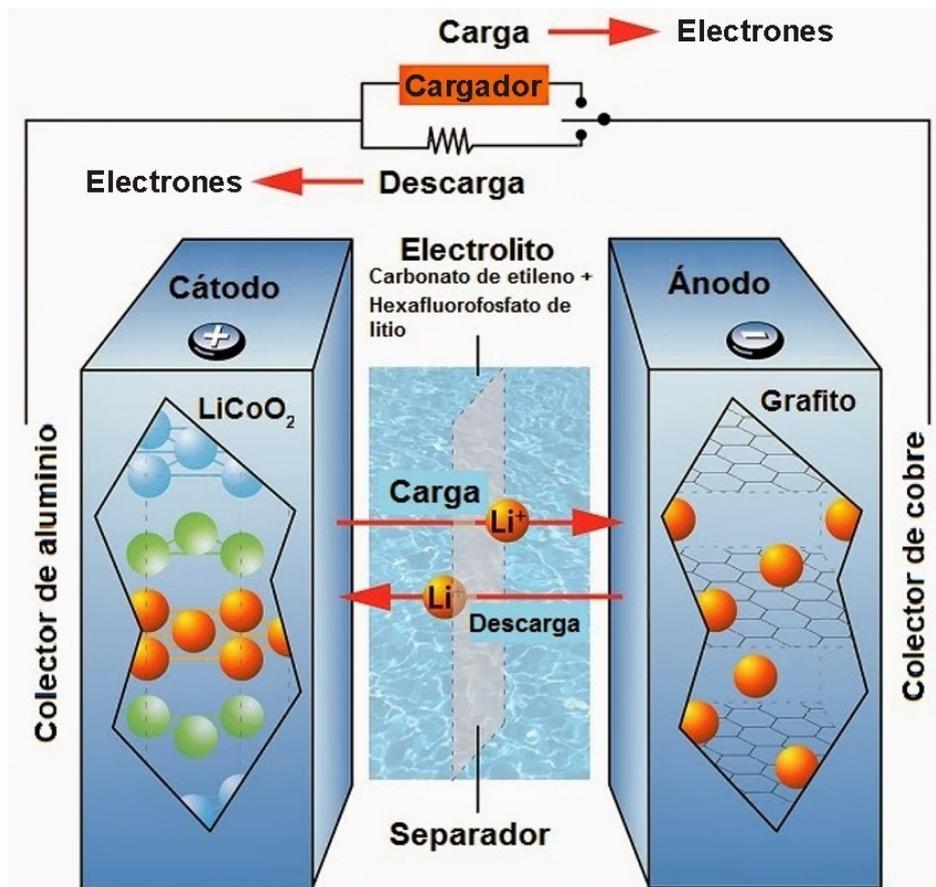


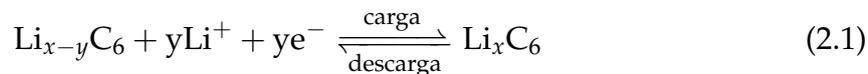
Figura 2.1: Esquema de una celda electroquímica de iones de litio.

figura 2.1.

Ánodo y cátodo son términos más comúnmente usados que electrodo negativo y positivo. El ánodo es el electrodo donde se produce la oxidación durante la descarga de la batería. De esta manera, durante la descarga, el electrodo negativo es el ánodo y el electrodo positivo es el cátodo. Ánodo y cátodo se cambian durante el proceso de carga. Considerando la posible confusión que podría resultar de esto, en este trabajo se ha adoptado la terminología de los electrodos positivos y negativos, donde el electrodo negativo es el electrodo de grafito.

Durante la carga, se insertan iones de litio en el electrodo negativo. La elección del electrodo negativo es tal que la inserción tiene lugar a un voltaje más alto que la deposición de litio metálico, evitando así este problema. La deposición de litio fue la causa del retraso de la llegada comercial de estas baterías y aún no está completamente resuelto. La deposición de litio es un factor importante que afecta la vida útil de la batería. El grafito es el electrodo negativo más común utilizado en las baterías comerciales de iones de litio que representa más de 90 % de los electrodos negativos en 2015 [30].

La reacción en el electrodo de grafito (como el electrodo negativo) es:



La misma cantidad de iones de litio que se intercalan en el grafito se extraen del electrodo positivo durante la carga. Los óxidos lamelares de metales de transición litiados, espinelas de manganeso o fosfatos de hierro se utilizan generalmente como materiales de electrodos positivos. Estas diferencias en la composición química del electrodo positivo son la razón principal de la variación observada en las propiedades de las diferentes baterías de iones de litio. Debido a esta razón, a estas baterías a menudo se les conoce por la composición química del electrodo positivo, como las baterías de óxido de litio, níquel, cobalto y aluminio o NCA (LiNiCoAlO_2), las baterías de fosfato de hierro litio o LFP (LiFePO_4), las baterías de óxido de litio, níquel, manganeso y cobalto o NMC (LiNiMnCoO_2), etc. Idealmente, se prefieren los electrodos positivos con un alto potencial vs. Li/Li^+ , sin embargo, en realidad, los potenciales de trabajo a menudo están limitados por la estabilidad del electrolito.

La reacción en el electrodo positivo (considerando un material de electrodo positivo genérico Mp) es:



Los dos electrodos tienen una morfología porosa y están impregnados de electrolito líquido. Normalmente se utilizan como electrolito compuestos orgánicos apróticos, tales como carbonato de etileno (EC), carbonato de dimetilo (DMC), carbonato de dietilo (DEC) o sus combinaciones, en la que se disuelve una sal de litio. La sal más utilizada es el LiPF_6 .

2.2. Diferentes composiciones químicas de baterías

Hay muchos tipos de baterías de iones de litio. Las diferencias surgen principalmente debido a las composiciones químicas del electrodo positivo y negativo, que a su vez causan diferencias en las características de rendimiento, costo y seguridad. El electrodo negativo comercial más utilizado es el grafito, por lo cual de ahora en adelante se referirá a las baterías en función del material activo del cátodo, asumiendo que el material activo del ánodo es el grafito. La cuota de mercado de las baterías de iones de litio actualmente está dominada por las baterías de litio y óxido de cobalto

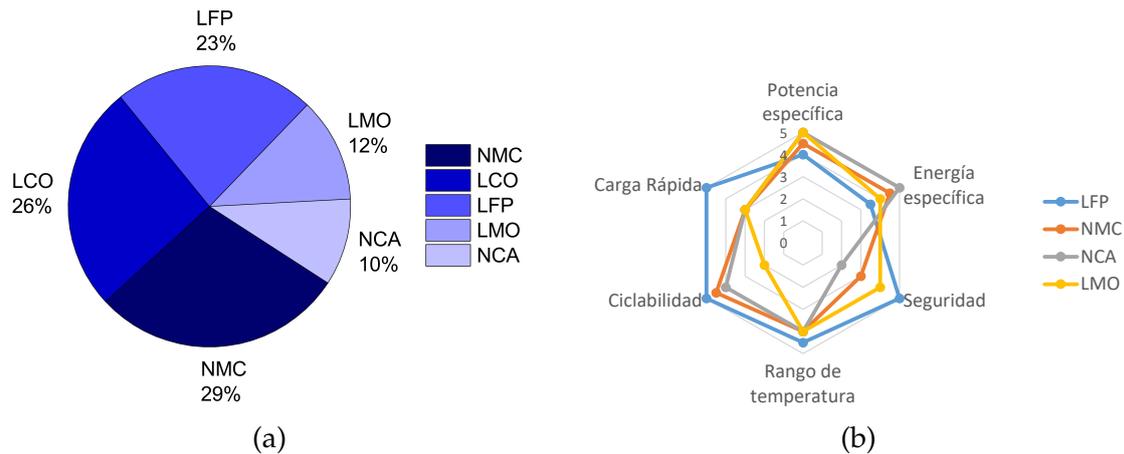


Figura 2.2: Comparación de las diferentes químicas de electrodo positivo. (a) Cuota de mercado de las químicas de electrodo positivo dominantes [30]. (b) Comparación cualitativa de propiedades importantes para diferentes químicas de baterías [4].

(LCO), las de litio y óxido de manganeso (LMO/LMS), las NCA, las NMC y las LFP. Sus cuotas de mercado relativas se pueden ver en la figura 2.2a. En la figura 2.2b se puede ver una comparación cualitativa de los diferentes parámetros de desempeño para diversas químicas de baterías. En este trabajo, se llevan a cabo modelos y experimentos con baterías de LFP.

El fosfato de hierro-litio (LFP) entró en la escena de las baterías en 1997 [31] cuando se mostró como un material de electrodo positivo viable. Sin embargo, difería de otros materiales de electrodos positivos debido a su estructura olivina y al cambio de fase que sufre. Las ventajas de las baterías LFP son que tienen una buena estabilidad térmica, vida útil de ciclado y capacidad de cargado rápido. Al estar basados en hierro, también tienen menores costos. La desventaja es que tienen una menor densidad energética. El voltaje nominal de estas baterías es de 3,2V y normalmente ciclan entre los 2,5V y los 4V.

2.3. Geometría y formatos de celda

Las baterías de iones de litio pueden adaptarse a diferentes dispositivos y aplicaciones variando la geometría y el formato de la celda. La geometría de celda se refiere al dimensionamiento interno (longitud, ancho y grosor) de las diferentes capas, como los electrodos positivos y negativos. Formato de celda se refiere al empaquetado general de las diferentes capas. Estos incluyen formatos cilíndricos, de botones, prismáticos y de bolsa o pouch (ver la figura 2.3). Para cada formato, existen unidades de diferentes dimensiones basadas en la geometría interna.

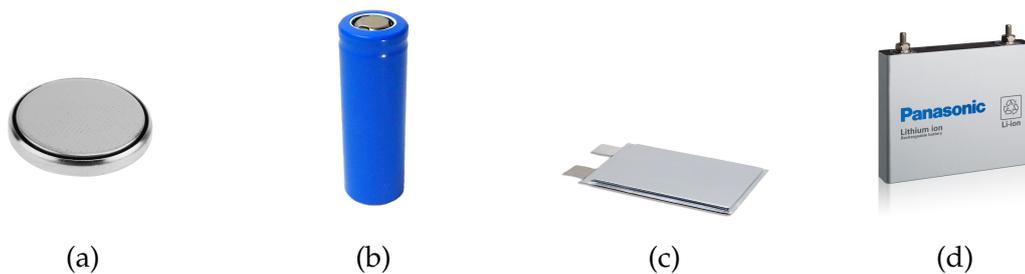


Figura 2.3: Diferentes formatos de baterías. (a) Celda botón o moneda. (b) Batería cilíndrica. (c) Celda pouch. (d) Batería prismática.

2.4. Modelos matemáticos de baterías de ion litio

Al igual que los primeros modelos de baterías de iones de litio, los objetivos actuales del modelado de baterías son ayudar a comprender, a diseñar y habilitar la aplicación de estas baterías. Los principios del desarrollo de modelos suelen comenzar con un modelo simple y agregar progresivamente más detalles hasta que las predicciones del modelo sean lo suficientemente precisas para el objetivo del modelado. En los últimos años se han desarrollado varios tipos de modelos matemáticos para baterías de iones de litio y en la figura 2.4 se puede ver un resumen de ellos, que destaca el compromiso entre los requisitos computacionales y la precisión de la predicción. Un tercer eje, el del esfuerzo de modelado también se puede agregar a la figura 2.4, pero en general, un modelo que requiere más esfuerzo de modelado también es computacionalmente más exigente. Este esfuerzo de modelado proviene de determinar el valor de los parámetros en el modelo.

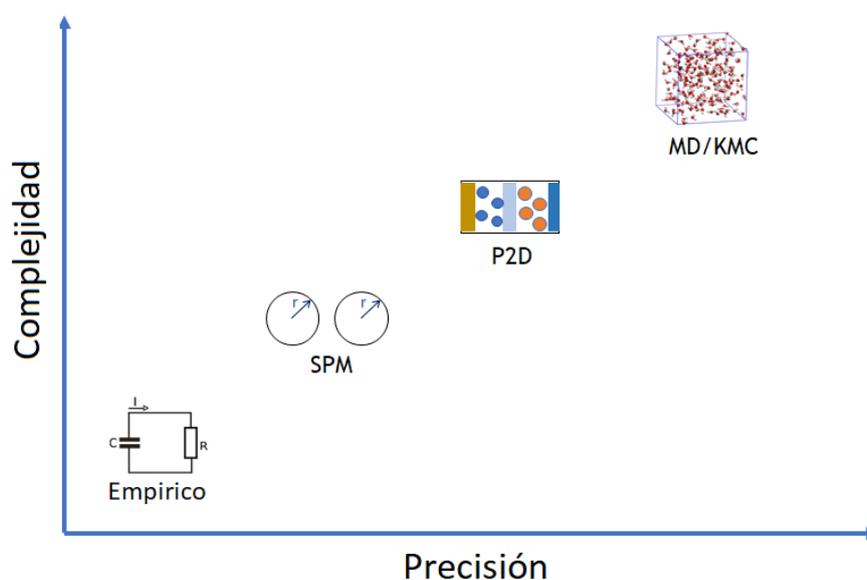


Figura 2.4: Tipos de modelos de baterías de ion-litio.

Los modelos empíricos son los más simples y los menos precisos y emplean datos experimentales para predecir el comportamiento futuro de las baterías de iones de litio sin tener en cuenta los principios fisicoquímicos. Las funciones polinomiales, exponenciales, logarítmicas y trigonométricas se usan comúnmente como modelos empíricos. La simplicidad computacional de los modelos empíricos permite cálculos muy rápidos y estos modelos son los más adecuados para aplicaciones del mundo real, como en los sistemas de administración de baterías (BMS). Como estos modelos se basan en el ajuste de datos experimentales para un conjunto específico de condiciones operativas, las predicciones pueden ser muy malas para otras condiciones operativas de la batería. Tales modelos de baterías no son útiles para el diseño de nuevos materiales para baterías o combinación de químicas [32].

Los siguientes dos niveles de modelado incluyen el modelo de partícula única (SPM) y el modelo poroso pseudo bidimensional (P2D). Estos dos modelos incorporan fenómenos cinéticos y de difusión en el electrolito y los electrodos utilizando ecuaciones en derivadas parciales (EDP). El análisis de elementos finitos (FEA) generalmente se lleva a cabo para resolver estas EDP acopladas. En el SPM, cada electrodo se considera como una sola partícula con la misma área de superficie que el electrodo. Las cinéticas de difusión e inserción se consideran en el modelo, pero no se consideran variaciones en la concentración o el potencial en la fase de solución. El modelo SPM simula razonablemente bien las condiciones de electrodo delgado y baja corriente, pero falla en condiciones de alta corriente. El modelo P2D tiene en cuenta la difusión tanto en el electrolito como en el electrodo sólido. La cinética de inserción/extracción de litio dentro del electrodo se describe utilizando las ecuaciones de Butler-Volmer [3]. Este modelo es más preciso que el SPM a costa de un mayor esfuerzo de parametrización y más requisitos de recursos informáticos, además es, en general, el más utilizado por los investigadores [33], y resuelve la concentración de electrolito y el potencial de electrolito en el electrodo estado sólido, la concentración y el potencial en el estado sólido dentro de los electrodos porosos y la concentración de electrolito y el potencial de electrolito en el separador. Tanto el modelo P2D como el SPM pueden simular ciclos completos de carga y descarga en baterías de iones de litio en cuestión de segundos.

Los modelos más avanzados simulan el comportamiento de la batería a nivel molecular / atómico. El método cinético de Monte Carlo (KMC) puede ayudar a predecir las propiedades termodinámicas de los materiales, la movilidad del litio dentro de la estructura cristalina, etc. La dinámica molecular proporciona información sobre fenómenos a escala molecular, como el crecimiento de la película de pasivación en el electrodo de grafito. El uso de estos modelos avanzados se limita a

estudiar un proceso específico que se realiza en una fracción muy pequeña de un segundo.

Además de la parametrización, un aspecto importante del modelado es validar experimentalmente el modelo para garantizar que los datos experimentales puedan representarse razonablemente a través del mismo. Cuanto mayor es el número de variables que se validan, mayor es la confianza en el modelo.

2.4.1. Modelado semi-empírico

Para los capítulos 4 y 5 se utilizó un modelo de baterías previamente validado y publicado en [34], que incluye el efecto de la temperatura en el voltaje y la corriente utilizando un modelo térmico concentrado para la generación y disipación de calor. El modelo es semi-empírico y cuasi-estático, y usa los resultados experimentales de una batería nueva y no considera los procesos de envejecimiento de la batería.

Dentro del modelo, el código implementado en Matlab[®] define una superficie de puntos de trabajo en el espacio definido por los ejes de tensión, corriente y estado de descarga (SoD por su sigla en inglés). Esta superficie viene dada por datos experimentales de descarga de la batería, a diferentes corrientes y a diferentes temperaturas. El voltaje y la corriente se obtienen de forma iterativa utilizando la superficie para satisfacer la condición de que el voltaje multiplicado por la corriente, para el SoD actual, sea igual a la potencia solicitada. La iteración se detiene cuando la corriente alcanza los límites máximos definidos por el fabricante o el cambio de valor de la corriente es menor a $0,1 \mu\text{A}$. Si la tensión cae por debajo de la tensión de corte, el código se detiene y muestra un mensaje de error. Una vez que se obtienen la tensión y la corriente de trabajo, la temperatura se define mediante la ecuación de intercambio de calor adimensional. El estado de descarga se obtiene por conteo coulombico, es decir, se toma como el integral de la corriente que pasa por la batería dividido la capacidad nominal de la misma. Las pérdidas de la batería se calculan utilizando la tensión de circuito abierto de la batería (OCV). La figura 2.5 muestra el flujo de trabajo del modelo de batería.

El modelo necesita como entradas la corriente o potencia requeridas y la temperatura ambiente, como valores iniciales necesita el estado de descarga y la temperatura de la batería. Como salida se obtienen el potencial, el SoD, las pérdidas en carga y descarga, el calor intercambiado con el ambiente y la temperatura de la batería.

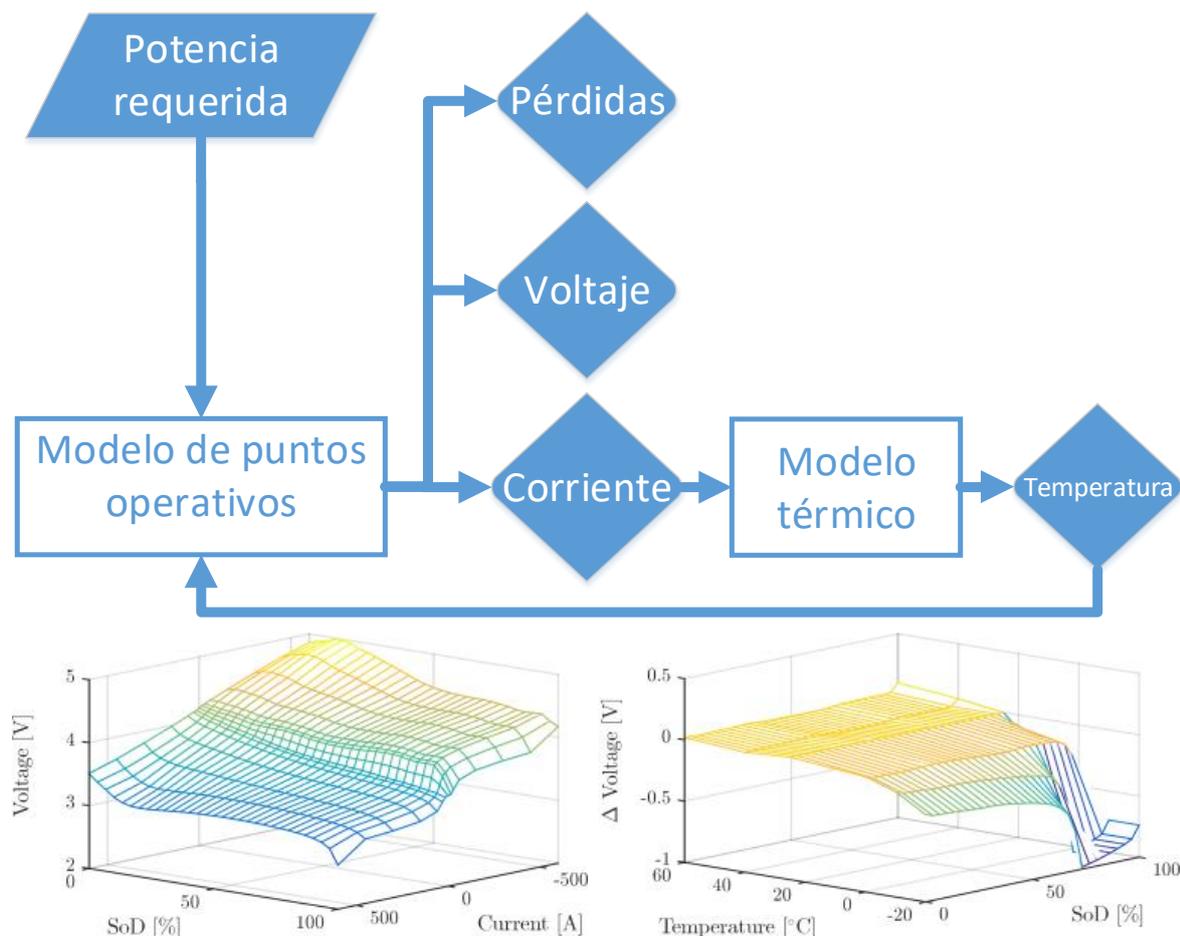


Figura 2.5: Diagrama del funcionamiento del modelo de batería.

2.4.2. Modelado P2D

En esta tesis, además, se ha seguido un enfoque de modelado pseudo bidimensional (P2D). Este enfoque permite una buena predicción del comportamiento electroquímico de las baterías para completar los ciclos de carga y descarga en diferentes condiciones operativas dentro de un tiempo de cálculo razonable. Si bien la parametrización es un desafío, la ventaja de un modelo P2D radica en su precisión, precisamente debido a la inclusión de fenómenos físicos dominantes junto con los detalles de la capa sándwich, la cual comprende a los colectores de corriente, los electrodos porosos, el separador y el electrolito, y la geometría de las partículas. El modelo P2D también es flexible y otros fenómenos como el comportamiento térmico, la tensión en los componentes, etc. se pueden acoplar a este modelo.

El modelo P2D consta de dos dominios 1D conectados (por lo tanto, pseudo 2D). Un dominio 1D modela procesos a lo largo del grosor de la celda y el otro dominio 1D modela las partículas del material activo. El primer dominio modela el transporte de masa y carga en los electrodos porosos y el electrolito, junto con las reacciones

electro-químicas que ocurren en la interfaz entre el electrodo y el electrolito. Los colectores de corriente también se modelan para lograr mayor precisión. El otro dominio modela el transporte de litio basado en la difusión unidimensional dentro de la partícula. Estos dos dominios están acoplados en base a la ley de conservación de especies.

El primer modelo pseudo-2D de una batería de litio utilizando la teoría de los electrodos porosos [35], la difusión de partículas y la teoría de la solución concentrada [3] se desarrolló en 1993 tomando en cuenta los enfoques de modelado desarrollados para baterías no basadas en litio. En la teoría de los electrodos porosos, no se especifican las posiciones y formas exactas de todas las partículas y poros en el electrodo, sino que se promedian las propiedades. Las partículas son generalmente consideradas como esferas perfectas. Si bien los modelos P2D han sufrido grandes cambios en términos de complejidad y son más los fenómenos que se modelan en comparación con los primeros modelos, el enfoque y la estructura básicos todavía toman mucho de los primeros modelos hechos por Newman y sus colaboradores [36–38].

2.4.3. Ecuaciones del modelo P2D

Como se puede ver en la figura 2.6, hay una dimensión x perpendicular al sándwich elemental (dominio "macro") y cada punto de x tiene definida una dimensión radial r a lo largo de las partículas de material activo, que se asumen esféricas, isotrópicas y del mismo radio (dominio "micro"). El modelo se basa en la teoría de los electrodos porosos, lo cual significa que cada capa del sándwich se trata como la superposición de dos continuos, uno que representa el electrolito y otro que representa el electrodo poroso. Cada continuo se caracteriza por su fracción de volumen y su área de contacto específica con otros continuos. Otras propiedades de los continuos, como la conductividad, se promedian sobre un elemento de volumen que es pequeño en comparación con la dimensión de la capa, pero grande en comparación con la dimensión de los poros.

Existe una densidad de corriente electrónica \vec{i}_s que fluye a través de los electrodos porosos en la fase sólida a lo largo de la dimensión x , y una densidad de corriente iónica \vec{i}_l fluye de manera similar en la fase líquida. La suma de estas dos densidades de corriente es uniforme en todo el electrodo, lo que significa que cualquier aumento en \vec{i}_l se compensa con una disminución en \vec{i}_s . Estas dos densidades de corriente están vinculadas a través del llamado flujo de la pared del poro j_n en la interfaz sólido/electrolito, de acuerdo con la ecuación 2.3.

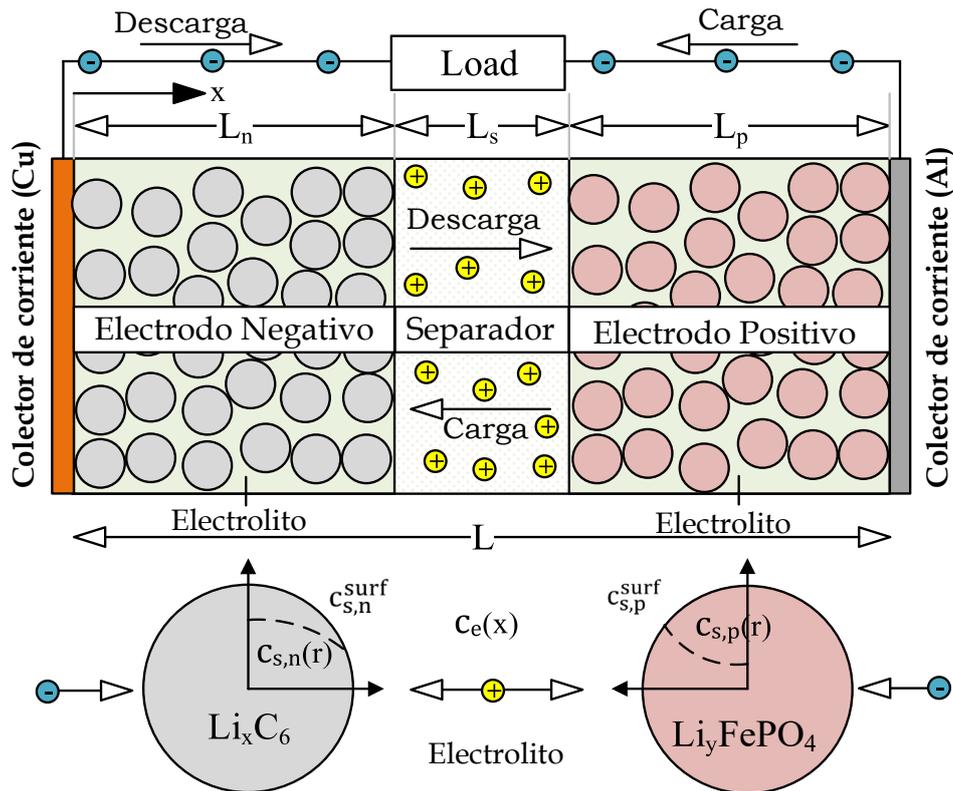


Figura 2.6: Esquema de una celda elemental de ion litio y su modelado P2D.

$$\nabla \cdot \vec{i}_l = a_v F j_n \quad (2.3)$$

donde:

a_v Área de la interfase solido/liquido por unidad de volumen del electrodo [m^2/m^3]

F Constante de Faraday (96,487 C/mol)

j_n Flujo de litio en la pared del poro [$\text{mol}/(\text{m}^2 \text{ s})$].

La densidad de corriente iónica \vec{i}_l es cero en los colectores de corriente de ambos electrodos, mientras que la densidad de corriente electrónica \vec{i}_s es cero en la interfaz electrodo/separador (toda la corriente es transportada por iones a través del separador). La densidad de corriente electrónica \vec{i}_s en la matriz sólida de los electrodos se expresa mediante la ley de Ohm:

$$\vec{i}_s = -\sigma_s \cdot \nabla \phi_s \quad (2.4)$$

donde:

σ_s Conductividad electrónica de la fase sólida del electrodo [S/m]

ϕ_s Potencial eléctrico en la fase sólida [V]

En cambio, la densidad de la corriente iónica \vec{i}_l se expresa mediante una ley de

Ohm extendida que se deriva de la teoría de solución concentrada y tiene en cuenta el efecto del gradiente de concentración de sal en la fase líquida e introduce dos nuevos parámetros de transporte dependientes de la concentración, el coeficiente de actividad molar media f_{\pm} y el número de transferencia (t_+).

$$i_l = -\sigma_l \cdot \nabla \phi_l + \frac{2 \cdot \sigma_l \cdot R \cdot T}{F} \cdot \left(1 + \frac{\partial \ln f_{\pm}}{\partial \ln c_l} \right) \cdot (1 - t_+) \cdot \nabla \ln c_l \quad (2.5)$$

donde:

σ_l Conductividad iónica efectiva del electrolito [S/m]

ϕ_l Potencial eléctrico de la fase líquida [V]

R Constante de gas ideal [J/(mol K)]

T Temperatura absoluta [K]

F Constante de Faraday [C/mol]

t_+ Número de transferencia

f_{\pm} Coeficiente de actividad molar media del electrolito

c_l Concentración de sal en el electrolito [mol/m³]

El término $\left(1 + \frac{\partial \ln f_{\pm}}{\partial \ln c_l} \right)$ se denomina factor termodinámico y se puede determinar a partir del coeficiente de actividad molar media f_{\pm} . El número de transferencia t_+ , también llamado número de transporte, tiene en cuenta los gradientes de concentración que se forman bajo carga.

Para resolver la concentración de sal (c_l), se utiliza un balance de masa del electrolito:

$$\epsilon_l \cdot \frac{\partial c_l}{\partial t} = -\nabla \cdot \left(-D_l \cdot \nabla c_l - (1 - t_+) \frac{i_l}{F} \right) \quad (2.6)$$

donde:

t Tiempo [s]

ϵ_l Fracción volumétrica de la fase líquida

D_l Difusión de la Sal en el electrolito

Cualquier cambio en la concentración de litio en el electrolito (c_l) se debe a la difusión, migración y convección. Se puede suponer que la contribución de la convección es cero en la batería, ya que la velocidad de las moléculas del disolvente no es significativa en las baterías de iones de litio. El primer término dentro del paréntesis en el lado derecho de la ecuación (2.6) explica la contribución de la difusión, el segundo el de la migración.

Las ecuaciones anteriores constituyen el modelo "macro", definido en la escala

del sándwich. El macro-modelo se conecta con el micro-modelo (a escala de partículas) a través del flujo de la pared del poro j_n , que se relaciona con la velocidad de la reacción electro-química (es decir, la reacción de transferencia de carga) de acuerdo con la ecuación de Butler-Volmer:

$$j_n = \frac{i_0}{F} \left[\exp\left(\frac{\alpha_a \cdot F \cdot \eta}{R \cdot T}\right) - \exp\left(\frac{-\alpha_c \cdot F \cdot \eta}{R \cdot T}\right) \right] \quad (2.7)$$

donde:

i_0 Densidad de corriente de intercambio [A/m²]

α Coeficiente de transferencia de carga

η Sobrepotencial en la superficie del electrodo [V]

En la ecuación (2.7) i_0 es la densidad de corriente de intercambio y se expresa como:

$$i_0 = F \cdot k_c^{\alpha_a} \cdot k_a^{\alpha_c} \cdot (c_{s,max} - c_s)^{\alpha_a} \cdot c_s^{\alpha_c} \cdot \left(\frac{c_l}{c_{l,ref}}\right)^{\alpha_a} \quad (2.8)$$

donde:

k Constante de velocidad de la reacción electro-química [m/s]

$c_{s,max}$ Concentración máxima de litio en el electrodo [mol/m³]

c_s Concentración de litio en el electrodo [mol/m³]

c_l Concentración de litio en el electrolito [mol/m³]

$c_{l,ref}$ Concentración de referencia en el electrolito [mol/m³]

La diferencia ($c_{s,max} - c_s$) es la concentración de sitios desocupados en el material del electrodo. Cuando c_s es 0, o c_s es $c_{s,max}$, la densidad de corriente de intercambio se convierte en 0. Los coeficientes de transferencia anódica y catódica dados por α_a y α_c deciden la preferencia del potencial aplicado hacia las direcciones anódica y catódica de la reacción.

El sobrepotencial de superficie η , es la desviación de la diferencia de potencial real entre el sólido y la solución, del potencial de equilibrio del sólido determinado con respecto al electrodo de litio de referencia y se expresa como:

$$\eta = \phi_s - \phi_l - E_{eq} \quad (2.9)$$

donde:

E_{eq} Potencial de equilibrio del material de electrodo [V]

El efecto de la resistencia del film se tiene en cuenta en el sobrepotencial modifi-

cando la ecuación (2.9) de la siguiente manera:

$$\eta = \phi_s - \phi_l - E_{eq} - R_{film} \cdot i \quad (2.10)$$

donde R_{film} es la resistencia de film. Esta resistencia se debe principalmente a la formación de la Interfase de Electrolito Sólido (SEI). La formación de esta capa es un fenómeno importante que tiene una profunda influencia no solo en el rendimiento, sino también en la seguridad y la vida útil de la batería.

Se asume que el material del electrodo activo está formado por partículas esféricas de radio rp . El transporte de litio dentro y fuera de la partícula de material activo se realiza a través del mecanismo de difusión. El balance de masa se expresa como

$$\frac{\partial c_s}{\partial t} = \nabla \cdot (D_s \cdot \nabla c_s) = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(D_s r^2 \frac{\partial c_s}{\partial r} \right) \quad (2.11)$$

donde:

D_s Coeficiente de difusión del Litio en el electrodo [m^2/s]

Se requieren dos condiciones de contorno al resolver la ecuación (2.11), la densidad del flujo de litio se establece igual al flujo de la pared del poro j_n en la superficie de la partícula y se establece en cero en el centro de la partícula.

Las condiciones de contorno aseguran que los cálculos del balance de masa en el sólido se acoplen a la tasa de reacción, conectando los dos dominios 1D del modelo P2D. Las correcciones en la difusión y la conductividad para incluir el efecto de la tortuosidad se efectúan a través del coeficiente de Bruggeman [39]. Se supone que el material activo es un buen conductor electrónico y que los cambios de volumen en el sólido son despreciables. No se ha asumido ninguna interacción entre las partículas, lo que está justificado por las distancias mucho más grandes entre las partículas en comparación con la escala de longitud dentro de las partículas.

2.4.4. Modelado térmico y ecuaciones

La inserción-extracción y el transporte de litio durante la carga y la descarga provocan invariablemente que se produzca calor debido a procesos irreversibles en las celdas. Además, los cambios en el orden de la estructura del cristal debido a la inserción/extracción de litio en cualquiera de los electrodos también pueden causar que se genere o absorba calor. El primer tipo de calor se denomina calor irreversible y se genera en la celda debido a las limitaciones en los procesos físicos, como las pérdi-

das óhmicas, el potencial de activación y las limitaciones de transporte de masa. El segundo tipo, debido a los cambios en el orden de los cristales, se denomina calor reversible. El calor total generado en la celda se puede calcular considerando todas las fuentes/sumideros reversibles y las fuentes irreversibles de calor en la celda. Se pueden encontrar más detalles sobre el comportamiento térmico de las baterías de iones de litio en [40–42].

La generación de calor por unidad de volumen viene dada por:

$$Q = Q_{irr} + Q_r \quad (2.12)$$

Donde el calor irreversible Q_{irr} viene dado por:

$$Q_{irr} = i_l \cdot \nabla \phi_l + i_s \cdot \nabla \phi_s + (\nabla \cdot i_l) \cdot \eta \quad (2.13)$$

donde los dos primeros términos denotan el calor generado debido a las pérdidas óhmicas en las fases sólida y del electrolito, mientras que el último término corresponde al calor de polarización.

El calor reversible Q_r viene dado por:

$$Q_r = (\nabla \cdot i_l) \cdot T \cdot \frac{dE_{eq}}{dT} \quad (2.14)$$

Una batería se compone de regiones activas e inactivas. El calor se genera solo en las regiones activas, como en los electrodos y el electrolito. Sin embargo, el calor puede conducirse hacia y desde la región activa a las regiones inactivas entre las cuales se encuentran el separador, el material de revestimiento, etc. También una batería puede ganar o perder calor por conducción, convección y radiación con el entorno en el que se encuentra. La ecuación general para el balance de calor de la celda en cada punto, considerando el intercambio de calor con el entorno puede escribirse como:

$$\rho \cdot C_p \cdot \frac{\partial T}{\partial t} = Q + \nabla \cdot (k_T \cdot \nabla T) - \nabla \cdot (h \cdot (T - T_a)) \quad (2.15)$$

donde:

ρ Densidad [kg/m^3]

C_p Capacidad calorífica específica [$\text{J}/(\text{kg K})$]

k_T Conductividad térmica [$\text{W}/(\text{m K})$]

h Coeficiente de intercambio de calor [$\text{W}/(\text{m}^3 \text{K})$]

T_a Temperatura ambiente [K]

Todos estos parámetros tomarán valores diferentes dependiendo del dominio en donde se plantee puntualmente. En este trabajo, el intercambio de calor debido a la radiación no se tiene en cuenta.

El primer término del lado derecho de la ecuación (2.15) es la generación de calor por unidad de volumen, el segundo término es la transferencia de calor por unidad de volumen por conducción, y el tercero es la transferencia de calor por unidad de volumen por convección.

Hay dos razones fundamentales para desarrollar el modelo térmico junto con el modelo electroquímico P2D. Primero, la seguridad de la batería es en gran medida un problema térmico y es necesario estudiar el comportamiento de la generación de calor y el aumento de la temperatura para garantizar que la celda se mantenga en su rango de temperatura operativo. En segundo lugar, existe una fuerte dependencia de algunos parámetros físico-químicos de los materiales con la temperatura. Estos incluyen el factor termodinámico, la conductividad iónica del electrolito, la difusión de los electrodos y el electrolito y las constantes de velocidad de reacción. Los potenciales de los electrodos también dependen de la temperatura. Por lo tanto, las simulaciones precisas del comportamiento de la batería requieren la inclusión de la dependencia de la temperatura en estas propiedades. También se considera la generación de calor en los colectores de corriente.

2.5. Parametrización del modelo

Los enfoques basados en la física, como el modelo electroquímico P2D que se basa en leyes físicas, son más complicados y requieren más esfuerzo computacional que los modelos empíricos. La ventaja es una mayor flexibilidad, confiabilidad y precisión de predicción en una amplia gama de condiciones de operación y aplicaciones. Sin embargo, para garantizar la precisión de estos modelos, es imperativo conocer los diferentes parámetros electroquímicos y geométricos de la batería. Se necesitan al menos 30 valores diferentes de parámetros aparte de los potenciales de equilibrio de los electrodos como entrada solo para un modelo P2D. Además, el modelo térmico necesita conocer otras propiedades como la densidad, la capacidad

térmica y las conductividades térmicas de las capas activas y no activas de la celda.

2.5.1. Trabajo experimental

La campaña de test experimentales se llevó a cabo en el Laboratorio de Sistemas de Hidrógeno y Litio (LABSHyL) perteneciente al Centro de Energía de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales (FACEN) de la Universidad Nacional de Catamarca (UNCA) y al Centro de Investigaciones y Transferencia de Catamarca (CITCA). Para este trabajo se utilizaron celdas del tipo cilíndricas en el formato 26650 (26 mm de diámetro y 65 mm de altura), las mismas fueron testeadas para obtener datos experimentales para el modelado. Las celdas son del fabricante DAILAN CBAK POWER BATTERY CO, LTD y fueron facilitadas por la empresa Sol.Ar en el marco de un proyecto financiado por la Secretaría de Políticas Universitarias. Las celdas tienen grafito como electrodo negativo y LFP como electrodo positivo. Su voltaje operativo es de 2,00 V a 3,65 V con una capacidad nominal de 3 Ah.

Las baterías fueron cargadas con una fuente programable DC B&K Precisión 9117 a temperatura ambiente siguiendo el protocolo de corriente constante voltaje constante (CC-CV) con una corriente de 1,5 A (0,5C) hasta los 3,65 V y una corriente de corte de 6 mA (0,02C). En la figura 2.7 se puede ver el procedimiento de carga descrito anteriormente. Luego de la carga se dejó reposar la batería 30 min para que la celda se estabilizara, evitando así problemas de seguridad debido a los cambios de corriente (ver figura 2.8).

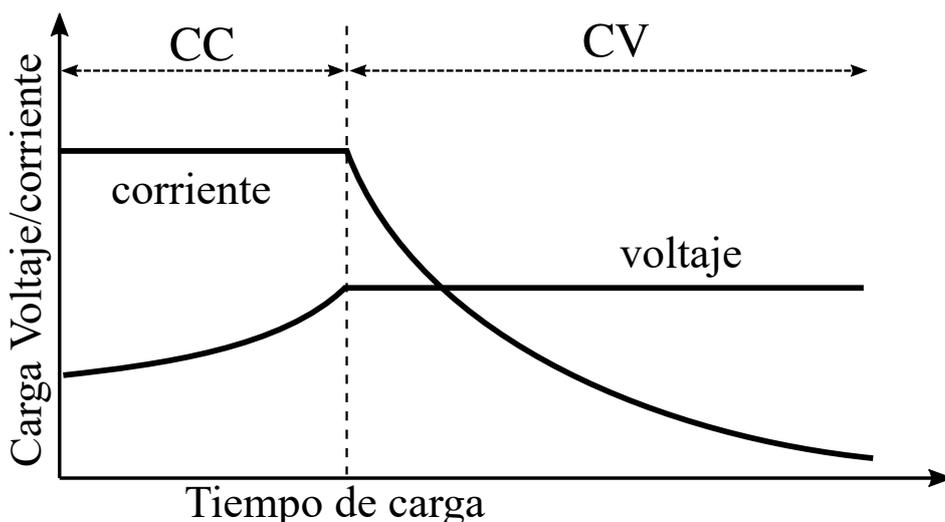


Figura 2.7: Procedimiento de carga a corriente constante (CC) y voltaje constante (CV).

Para conseguir datos experimentales que permitieran obtener parámetros de la



Figura 2.8: Setup experimental.

batería, se realizaron las descargas de la batería dentro de la cámara de temperatura controlada del laboratorio a corriente constante de 0.2C, 0.5C, 1C y 2C con una carga electrónica programable B&K Precisión 8520. La temperatura de la batería se midió durante toda la prueba de descarga por medio de un termocupla tipo K colocada en contacto con la superficie de la celda a la mitad de su altura y los datos fueron registrados con un tester Agilent U1232A (ver figura 2.8). La cámara de temperatura controlada es un equipo que permite mantener la temperatura dentro de un ambiente de control en un nivel determinado a través del enfriamiento o calentamiento del aire mediante el uso de placas peltier. Estas últimas permiten tanto la refrigeración como la calefacción del aire que se desea controlar.

2.5.2. Parámetros del modelo

2.5.2.1. Propiedades medidas

Para poder recabar datos acerca de la batería, una de ellas fue desarmada (ver figura 2.9). Con esto se pudo medir el área de los electrodos, y el espesor de los co-

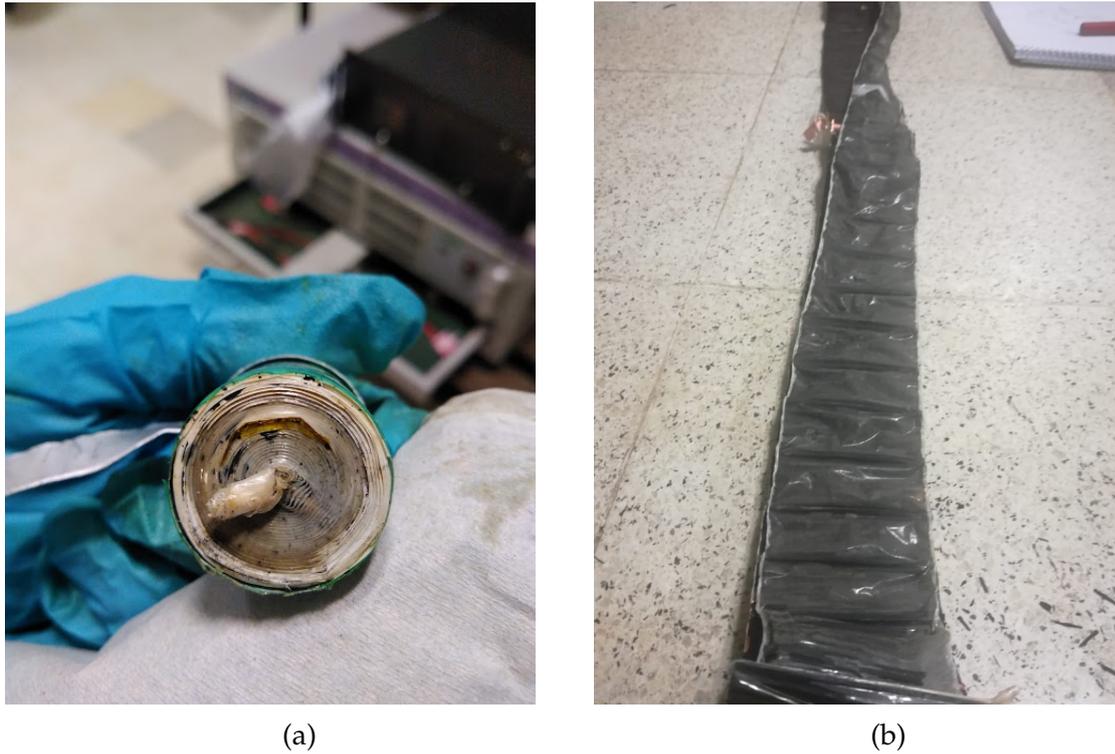


Figura 2.9: Desarme de la Batería.

lectores, los electrodos y el separador. Los datos medidos y sus valores se muestran en la tabla 2.1

2.5.2.2. Propiedades tomadas por defecto del software de modelado y simulación

Algunos parámetros del modelo fueron tomados tal como los brinda por defecto el software de modelado COMSOL[®] [43] en su biblioteca de materiales.

Parámetro	Nombre	Valor
L_{negcc}	Espesor de colector negativo	45 μm
L_{neg}	Espesor de electrodo negativo	55 μm
L_{sep}	Espesor de separador	30 μm
L_{pos}	Espesor de electrodo positivo	65 μm
L_{poscc}	Espesor de colector positivo	55 μm
W_{cell}	Ancho del electrodo	56,5 mm
L_{cell}	Longitud del electrodo	1345 mm

Tabla 2.1: Medidas obtenidas en el laboratorio.

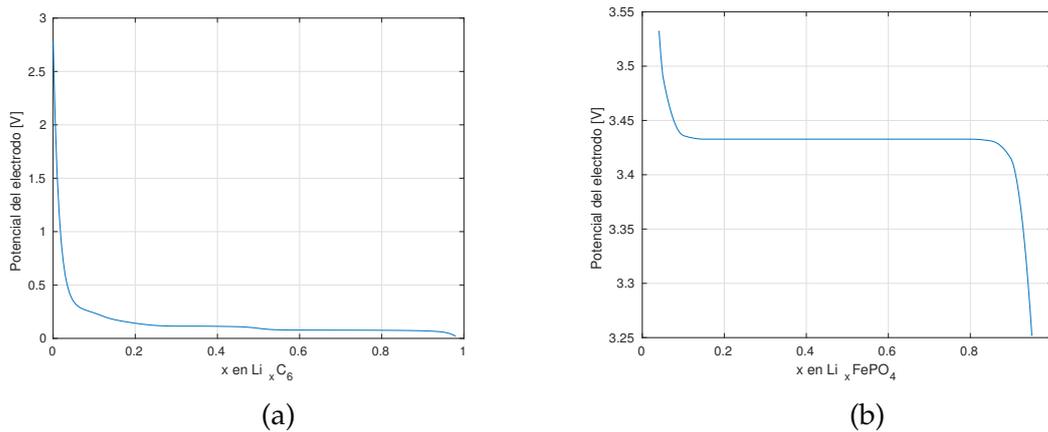


Figura 2.10: Potenciales de equilibrio vs. Li/Li^+ . (a) Electrodo negativo. (b) Electrodo positivo.

Concentración máxima de la fase sólida: La concentración máxima de litio para el electrodo positivo se tomó como $31\,507 \text{ mol/m}^3$. Para el electrodo negativo se tomó la concentración como $21\,190 \text{ mol/m}^3$. Valores similares pueden encontrarse en [44, 45].

Potencial de equilibrio: El potencial de equilibrio con respecto a Li/Li^+ del electrodo negativo se tomó por defecto de la biblioteca de materiales de COMSOL®. En cambio el del electrodo positivo se extrajo de [44]. Los mismos pueden observarse en la figura 2.10.

Colectores de corriente: Los colectores de corriente aseguran que la distribución de corriente dentro de las capas activas sea uniforme. Son materiales con alta conductividad eléctrica que aseguran que la resistencia eléctrica sea baja. El cobre y el aluminio son los colectores de corriente utilizados para los electrodos negativo y positivo, respectivamente. Estos materiales tienen propiedades bien estudiadas y no existe ambigüedad con respecto a sus valores. Por lo tanto, las propiedades de estos materiales fueron tomadas de la biblioteca de materiales de COMSOL®.

Numero de transferencia: El número de transferencia se tomó como dependiente de la concentración de sal de litio en el electrolito y su función se muestra en la figura 2.11.

Dependencia de la actividad La dependencia de actividad, definida en la ecuación (2.5), denotada por $\frac{\partial \ln f_{\pm}}{\partial \ln c_l}$ se tomó como dependiente de la concentración y la

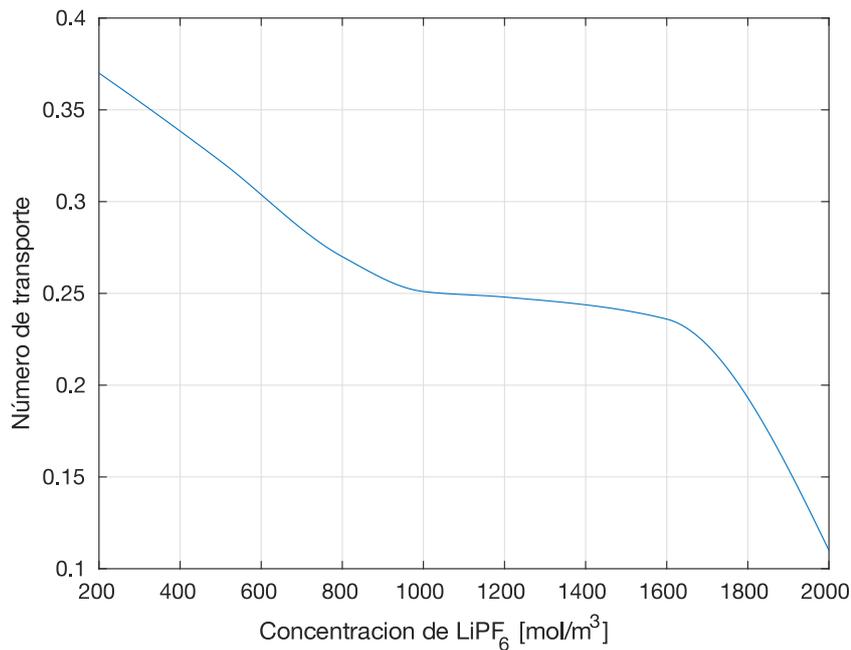


Figura 2.11: Número de transferencia en el electrolito.

temperatura de la siguiente forma:

$$\frac{\partial \ln f_{\pm}}{\partial \ln c_l} = \frac{\partial \ln f_{\pm}}{\partial \ln c_{l,0}} \cdot \exp\left(-\frac{1000}{R} \left(\frac{1}{298,15 \text{ K}} - \frac{1}{T}\right)\right) \quad (2.16)$$

El coeficiente $\frac{\partial \ln f_{\pm}}{\partial \ln c_{l,0}}$ es dependiente de la concentración y su función puede verse en la figura 2.12

Conductividad del electrolito: La conductividad del electrolito se toma como dependiente de la concentración y la temperatura según la forma:

$$\sigma_l = \sigma_{l,0} \cdot \exp\left(\frac{4000}{R} \left(\frac{1}{298,15 \text{ K}} - \frac{1}{T}\right)\right) \quad (2.17)$$

Donde $\sigma_{l,0}$ es dependiente de la concentración y su función se muestra en la figura 2.13

Difusión de la sal del electrolito: La difusión de la sal en el electrolito se toma como dependiente de la temperatura y la concentración de sal de la forma:

$$D_l = D_{l,0} \cdot \exp\left(\frac{1}{R} \left(\frac{1}{298,15 \text{ K}} - \frac{1}{T}\right)\right) \quad (2.18)$$

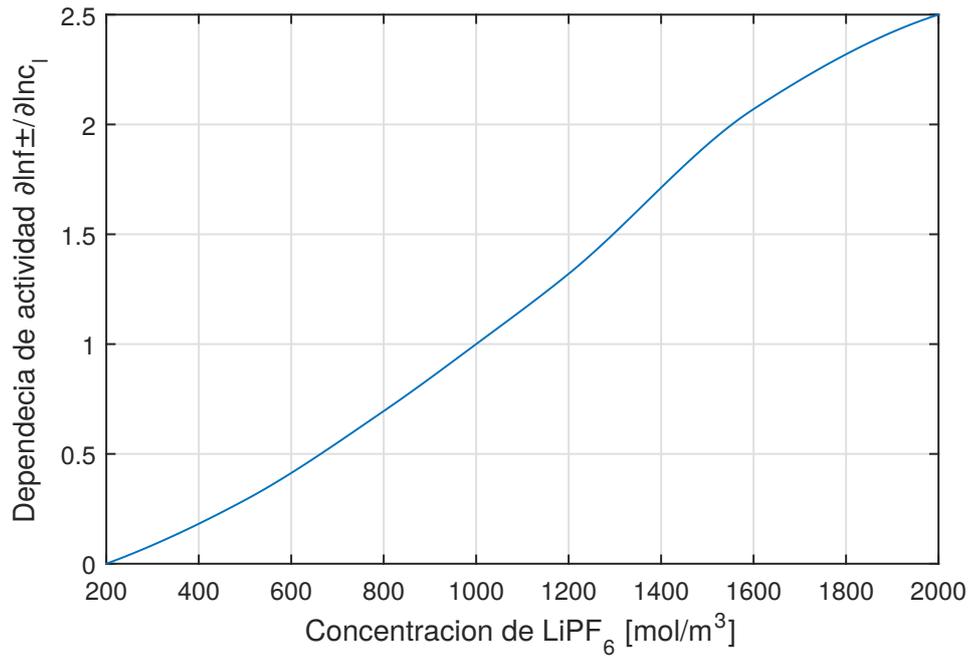


Figura 2.12: Coeficiente de dependencia de actividad en el electrolito.

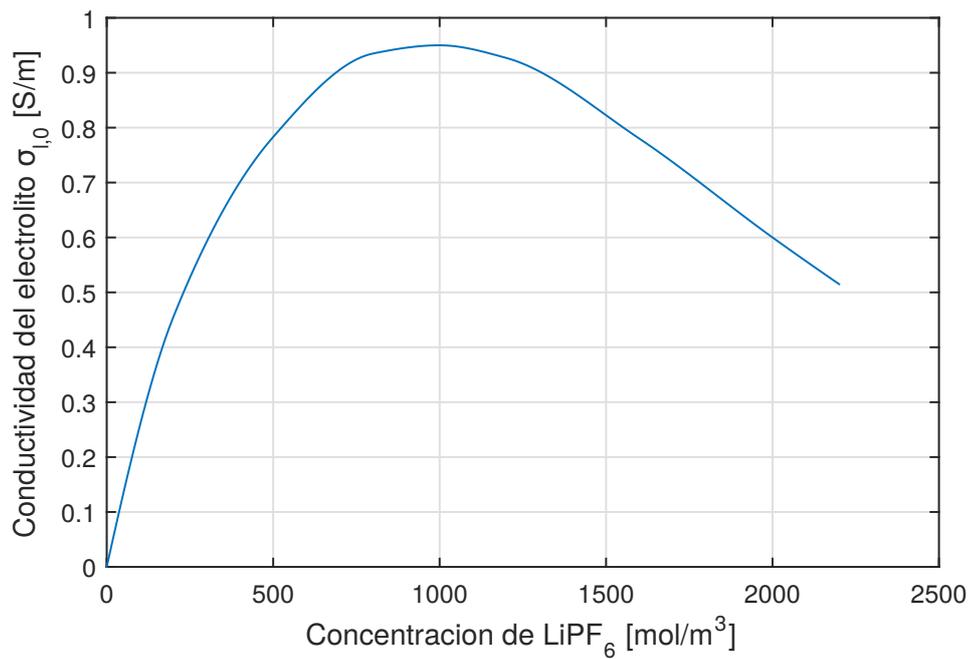


Figura 2.13: Coeficiente de conductividad del electrolito.

El término D_{10} es dependiente de la concentración, y su forma puede verse en la figura 2.14.

Fracciones volumétricas: Las fracciones volumétricas de los materiales activos y del separador se muestran en la tabla 2.2.

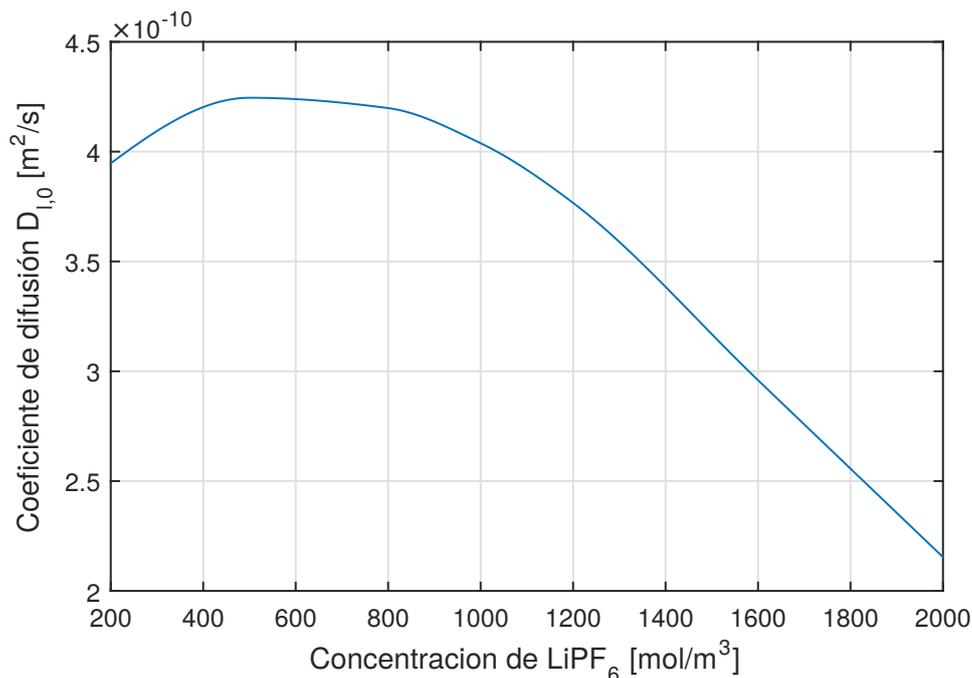


Figura 2.14: Coeficiente de difusión en el electrolito.

	Electrodo Negativo	Separador	Electrodo positivo
Fracción de material activo	0.384	-	0.43
Fracción de electrolito	0.444	0.37	0.4

Tabla 2.2: Fracciones volumétricas.

Coeficiente de Bruggeman: Para dar cuenta de la tortuosidad de estos medios porosos, se asume que su valor es 1,5 en el separador, así como en los dos electrodos. Cualquier suposición incorrecta de este coeficiente se compensa con los valores de difusión y conductividades que se estiman a partir de las curvas de descarga experimental.

2.5.2.3. Parámetros tomados de la literatura

Coeficiente entrópico: Los potenciales de los electrodos son dependientes de la temperatura, y su dependencia se expresa como:

$$E_{eq}^T = E_{eq} - (T - 298,15 \text{ K}) \frac{dE_{eq}}{dT} \quad (2.19)$$

El coeficiente entrópico $\left(\frac{dE_q}{dT}\right)$ del grafito se adoptó de [46], mientras que para el electrodo LFP se adoptó el coeficiente obtenido en [47]. Los coeficientes entrópicos son función de la concentración de litio en el electrodo y se pueden observar en la

figura 2.15.

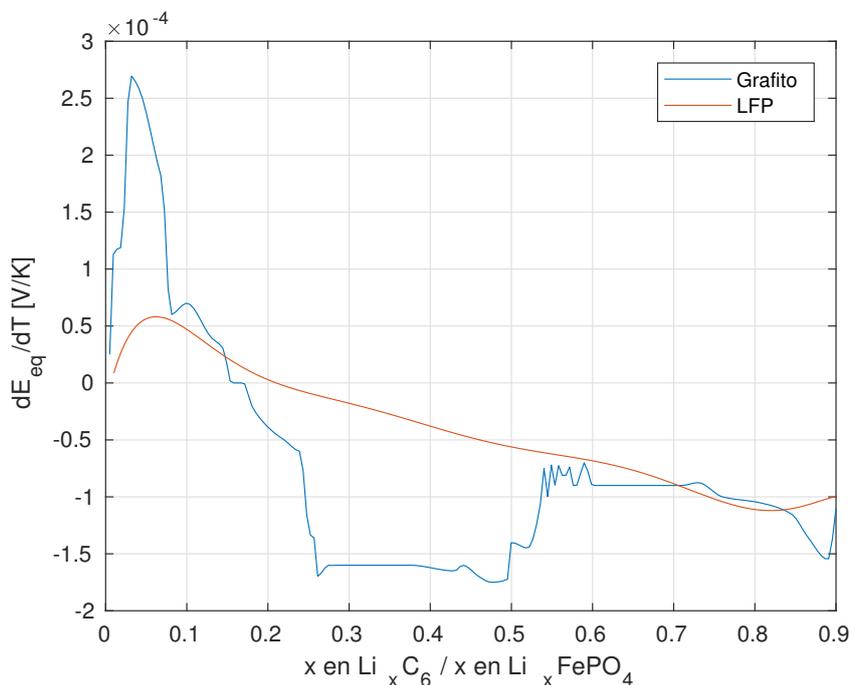


Figura 2.15: Coeficiente entrópico para ambos electrodos.

Conductividad del electrodo negativo: La conductividad electrónica del electrodo negativo se ha asumido como 100 S/m. El grafito tiene una alta conductividad electrónica, lo cual garantiza que la conductividad electrónica del electrodo negativo no sea un factor limitante. Este valor ha sido medido y utilizado en varias referencias [48–50].

2.5.2.4. Parámetros obtenidos a través optimización

Para obtener los parámetros fisico-químicos y térmicos restantes se optó por hacer una optimización de los parámetros con respecto a los datos experimentales electroquímicos y térmicos de descarga a 25 °C. Para la llevar adelante este proceso existen numerosos métodos, por lo cual se decidió consultarlo con el Doctor Damián Fernandez del Centro De Investigación Y Estudios De Matemática del CONICET, se optó por utilizar el método BOBYQA.

BOBYQA (Box Optimization BY Quadratic Aproximation): Este algoritmo fue desarrollado por el Profesor M.J.D. Powell como un paquete de subrutinas Fortran, traducida a MATLAB® en la biblioteca abierta de optimización no lineal NLOpt [51].

BOBYQA es un algoritmo de optimización sin derivadas, basado sobre un algoritmo presentado en un trabajo previo llamado NEWUOA. BOBYQA busca el menor valor de una función objetivo $F(x)$, $x \in R^n$, sujeto a los límites simples

$$a_i \leq x_i \leq b_i, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (2.20)$$

sobre los componentes de x . Las variables se restringen a conjuntos acotados con restricciones constantes ($l_i \leq x_i \leq u_i$, $i = 1, \dots, n$). El método de BOBYQA es iterativo, k y n se reservan para el número de iteración y el número de variables, respectivamente.

La construcción de cada una de las aproximaciones para la función objetivo es hecha a través de funciones cuadráticas iterativas. Cada iteración hace uso de una aproximación Q de la función objetivo F , que satisface:

$$Q_k(y_j) = F(y_j), \quad j = 1, 2, \dots, m, \quad (2.21)$$

con y_j los puntos de interpolación que se ajustan automáticamente. La cantidad de puntos considerada es un parámetro del algoritmo determinado en el método como $m = 2n + 1$. Con esta cantidad de puntos, no es posible construir una función de interpolación de F propiamente y, por lo tanto, se tiene una libertad sobre Q . Además del proceso de interpolación descrito anteriormente, BOBYQA hace uso de un método de aproximación de un subproblema de región de confianza, con una regla preestablecida de reducción del radio para mantener los puntos de interpolación lo suficientemente separados.

Es importante destacar, según lo establecido en [52, 53], que la mayor ventaja de la aplicación de este tipo de algoritmo por sobre otros métodos sin derivadas radica en la baja cantidad de evaluaciones de la función objetivo que se necesitan para construir su aproximación en cada etapa ($m = 2n + 1$). Con esto es posible reducir la complejidad del problema de interpolación desde $\mathcal{O}(n^4)$ a $\mathcal{O}(n^2)$.

Por otra parte, el parámetro de detención para la iteración de BOBYQA es de $x_{tolrel} = 10^{-4}$ y representa el nivel de tolerancia relativa.

Parámetros a optimizar: En la tabla 2.3 se muestra una lista de los veintidós (22) parámetros a optimizar, junto a sus valores iniciales, finales, límites inferiores y superiores

Parámetro	Símbolo	Limite inferior	Limite superior	valor inicial	Valor final	Unidades
Coeficiente de difusión del electrodo negativo	$D_{n,0}$	$3 \cdot 10^{-15}$	$9 \cdot 10^{-14}$	$3,9 \cdot 10^{-14}$	$3,6706 \cdot 10^{-14}$	m ² /s
Energía de activación para el coeficiente de difusión del electrodo negativo	Ea_{D_n}	10^4	10^5	65000	86774	J/mol
Coeficiente de difusión del electrodo positivo	$D_{p,0}$	$5,9 \cdot 10^{-20}$	$2,2 \cdot 10^{-14}$	$2,2 \cdot 10^{-14}$	$7,3358 \cdot 10^{-15}$	m ² /s
Energía de activación para el coeficiente de difusión del electrodo positivo	Ea_{D_p}	10^4	10^5	65000	88306	J/mol
Constante de velocidad de la reacción del electrodo negativo	$k_{n,0}$	10^{-12}	10^{-10}	$2 \cdot 10^{-11}$	$4,3812 \cdot 10^{-12}$	m/s
Energía de activación para el coeficiente de transferencia de carga del electrodo negativo	E_{k_n}	10^4	10^5	20000	19820	J/mol
Constante de velocidad de la reacción del electrodo positivo	$k_{p,0}$	10^{-12}	10^{-8}	$1 \cdot 10^{-9}$	$1,1847 \cdot 10^{-9}$	m/s
Energía de activación para el coeficiente de transferencia de carga del electrodo positivo	Ea_{k_p}	10^4	10^5	20000	20478	J/mol
Resistencia del film	R_{film}	10^{-3}	0,5	0,35	0,3381	Ω/m ²
Radio de partícula del electrodo negativo	r_n	10^{-6}	10^{-5}	$4,5 \cdot 10^{-6}$	$4,6774 \cdot 10^{-6}$	m
Radio de partícula del electrodo positivo	r_p	10^{-6}	10^{-5}	$5,75 \cdot 10^{-6}$	$7,8389 \cdot 10^{-6}$	m
Conductividad del electrodo positivo	σ_p	10^{-4}	11,8	8	8,1421	S/m
Densidad del electrodo negativo	ρ_n	1347	2500	1891	1973,3	kg/m ³
Densidad del electrodo positivo	ρ_p	1500	2310	2300	2266,1	kg/m ³
Densidad del separador	ρ_{sep}	900	1200	1043	1044,9	kg/m ³
Calor específico del electrodo negativo	C_{p_n}	641	1437	845	810,9345	J/(kg K)
Calor específico del electrodo positivo	C_{p_p}	700	800	750	739,6288	J/(kg K)
Calor específico del separador	$C_{p_{sep}}$	700	1978	1688	1215,6	J/(kg K)
Coeficiente de conductividad térmica del electrodo negativo	k_n	1,04	5	4,21	4,2147	W/(m K)
Coeficiente de conductividad térmica del electrodo positivo	k_p	0,2	5	0,27	0,2734	W/(m K)
Coeficiente de conductividad térmica del separador	k_{sep}	0,3344	1,21	1,21	1,1810	W/(m K)
Coeficiente de convección natural	h	1	10	5	9,8526	W/(m ² K)

Tabla 2.3: Parámetros a optimizar y valores usados durante la optimización.

Coefficientes de difusión: Para los coeficientes de difusión de ambos electrodos no se consideró la dependencia de la concentración pero se tuvo en cuenta la dependencia de la temperatura a través de la ecuación de Arrhenius. Para ambos electrodos, la difusión toma la forma:

$$D_x = D_{x,0} \cdot \exp\left(\frac{Ea_{D_x}}{R} \left(\frac{1}{298,15 \text{ K}} - \frac{1}{T}\right)\right) \quad (2.22)$$

Para determinar el valor del coeficiente exponencial del electrodo negativo $D_{n,0}$ se determinaron los límites inferior de $3 \times 10^{-15} \text{ m}^2/\text{s}$ y superior de $9 \times 10^{-14} \text{ m}^2/\text{s}$ según [50, 54]. Para el electrodo positivo se encuentran en la literatura valores desde $5,9 \times 10^{-20} \text{ m}^2/\text{s}$ y superior de $2,2 \times 10^{-14} \text{ m}^2/\text{s}$ [54, 55]. Para las energías de activación de la ecuación de ambos electrodos, se tomaron valores entre $10 \times 10^4 \text{ J/mol}$ y $10 \times 10^5 \text{ J/mol}$.

Constantes de velocidad de la reacción: En ninguno de los electrodos se consideró la dependencia de la concentración pero se tuvo en cuenta la dependencia de la temperatura a través de la ecuación de Arrhenius. Para ambos electrodos, las constantes toman la forma:

$$k_x = k_{x,0} \cdot \exp\left(\frac{Ea_{k_x}}{R} \left(\frac{1}{298,15 \text{ K}} - \frac{1}{T}\right)\right) \quad (2.23)$$

Para determinar el valor del coeficiente exponencial del electrodo negativo $k_{n,0}$ se determinaron los límites entre $8,9 \times 10^{-12} \text{ m/s}$ y $5 \times 10^{-11} \text{ m/s}$ según [44, 56–58]. Para el electrodo positivo se encuentran en la literatura valores fluctuantes en 7 ordenes de magnitud [55], y se tomaron como límite los valores $1 \times 10^{-12} \text{ m/s}$ y $1 \times 10^{-8} \text{ m/s}$. Para las energías de activación de la ecuación de ambos electrodos, se tomaron valores entre $10 \times 10^4 \text{ J/mol}$ y $10 \times 10^5 \text{ J/mol}$.

Resistencia total: Para tener en cuenta las resistencias de contacto y las resistencias de la película en ambos electrodos, se utiliza una resistencia adicional como parámetro de ajuste final. Esta, representa mayormente la resistencia de la película en el electrodo negativo, dado que el efecto de resistencia dominante es el crecimiento de SEI en este electrodo. Como se mencionó anteriormente, esta resistencia proporciona una caída de potencial adicional en la celda y es una fuente de calor en el modelo térmico. El valor ajustado de este parámetro se puede ver en la tabla 2.3.

Radio de partícula de los electrodos: Al no tener datos del fabricante acerca de los radios de partículas de los materiales activos de los electrodos se optó por darle una amplia variación, entre 1×10^{-6} m y 1×10^{-5} m, tomando los valores iniciales como aquellos de la biblioteca de materiales de COMSOL® (ver tabla 2.3).

Conductividad del electrodo positivo: El material positivo del electrodo, LiFePO_4 , es en sí mismo un aislante electrónico con una conductividad eléctrica pobre, del orden de 1×10^{-7} S/m. Una forma efectiva de aumentar la conductividad eléctrica es mediante el recubrimiento de carbono de las partículas, con lo cual las conductividades dependen del contenido de carbono del electrodo. Por este motivo, se tomaron límites para este valor entre 5×10^{-3} S/m y 11,8 S/m, consultando los valores expuestos en [50, 56, 59].

Propiedades térmicas: Para el modelo térmico, el sándwich de material activo es modelado como un solo material y se calculan propiedades promediadas volumétricamente.

Densidades: La densidad del material compuesto se calcula como:

$$\bar{\rho} = \frac{\sum_i \rho_i \cdot L_i}{L_{tot}} \quad (2.24)$$

En la literatura [58, 60–63] se puede encontrar un rango de 1347 kg/m^3 a 2500 kg/m^3 para el electrodo negativo, de 1500 kg/m^3 a 2300 kg/m^3 para electrodo positivo, y de 900 kg/m^3 a 1200 kg/m^3 para el separador. Estos rangos fueron tomados para definir los límites de la optimización de las densidades.

Calores específicos: Al igual que con la densidad, el calor específico del material compuesto se calcula como un promedio sobre el volumen:

$$\bar{C}_p = \frac{\sum_i C_{p,i} \cdot L_i}{L_{tot}} \quad (2.25)$$

Para definir los límites de optimización de los calores específicos, en la literatura [58, 60–63] se encontró un rango de $641 \text{ J}/(\text{kg K})$ a $1437 \text{ J}/(\text{kg K})$ para el electrodo negativo, para electrodo positivo de $700 \text{ J}/(\text{kg K})$ a $800 \text{ J}/(\text{kg K})$ y para el separador, de $700 \text{ J}/(\text{kg K})$ a $1978 \text{ J}/(\text{kg K})$

Conductividad térmica: La conductividad térmica en las capas de la celda es anisotrópica debido al efecto del apilamiento de las capas. En las direcciones paralelas a la capa, está dada por la ecuación (2.26), mientras que en la dirección perpendicular a las capas de la celda (dirección del grosor de la celda), se calcula utilizando la ecuación (2.27).

$$k_{T,\parallel}^- = \frac{\sum_i k_{T,i} \cdot L_i}{L_{tot}} \quad (2.26)$$

$$k_{T,\perp}^- = \frac{L_{tot}}{\sum_i \frac{L_i}{k_{T,i}}} \quad (2.27)$$

Los rangos de conductividad encontrados en la literatura [58, 60–63] para cada uno de los elementos de la celda fueron de entre 1,04 W/(m K) y 5 W/(m K) para el electrodo negativo, ente 0,2 W/(m K) y 5 W/(m K) para el electrodo positivo y ente 0,3344 W/(m K) y 1,21 W/(m K) para el separador.

2.6. Validación experimental del modelo P2D

Para la etapa de validación se realizaron dos modelos 3D térmicos. Ambos poseen un dominio geométrico en el cual estarían los materiales activos y el separador. En este dominio no se modelan los elementos detalladamente, sino que se considera como un dominio con propiedades térmicas promediadas como se detalló anteriormente. El acoplamiento entre el modelo térmico y el electroquímico se da de la siguiente manera:

- El modelo electroquímico calcula la generación de calor promedio en una porción del sándwich elemental.
- Esta generación de calor por unidad de volumen pasa al modelo térmico aplicándose sobre el dominio donde se encuentra el material activo.
- El modelo térmico calcula la distribución de temperatura en la celda y se calcula el promedio de temperatura en el dominio del material activo.
- Esta temperatura promedio se utiliza como entrada para el modelo electroquímico

El primero de los dos modelos térmicos modela una celda cilíndrica aislada a través de una geometría 2D de revolución. La figura 2.16a muestra el mallado utilizado para el modelo. En el segundo se modela un paquete de 24 celdas cilíndricas con sus sujetadores plásticos. La figura 2.16b muestra el mallado utilizado y la figu-

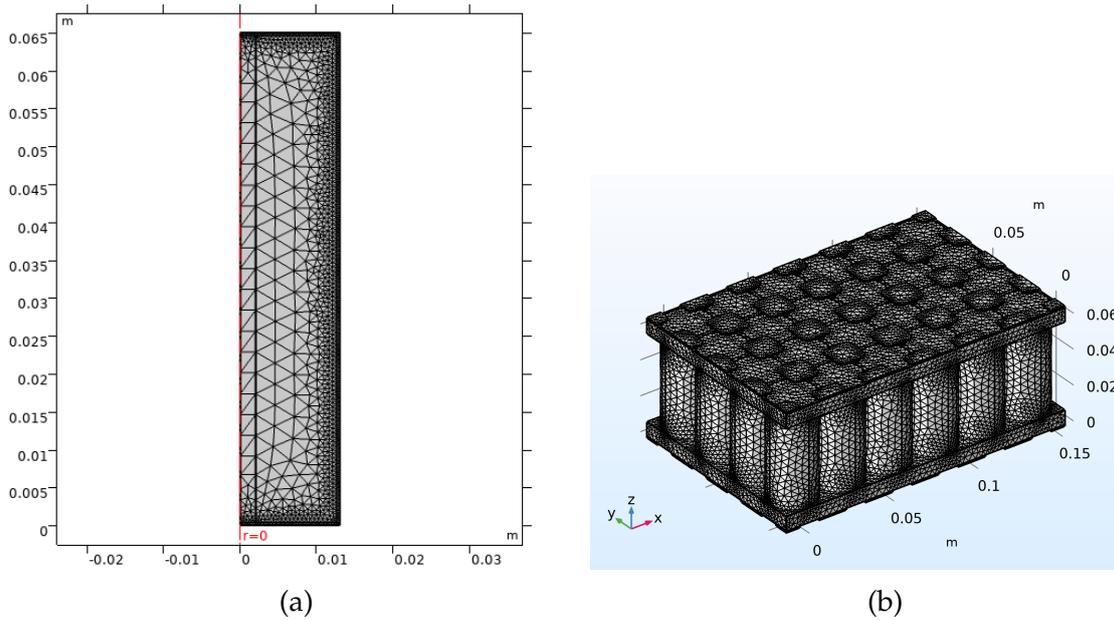


Figura 2.16: Mallado de modelos térmicos.

ra 2.17 muestra el paquete utilizado en los experimentos, y para el cual se realizó el modelado. Mediante este último modelo se busca aproximar el comportamiento electroquímico y térmico de un paquete de baterías de 12.8V y 18Ah (cuatro celdas en serie y seis en paralelo) que se utilizaron para un scooter eléctrico cuya conversión de baterías de plomo-ácido a baterías de ion-litio estuvo a cargo del grupo de trabajo [64–66].

En esta sección se presentan los resultados obtenidos al optimizar los 22 parámetros descritos en la sección 2.5.2.4. Primero se muestran los resultados obtenidos sobre el modelo de la celda unitaria y luego se brindan los resultados del modelo del paquete de baterías.

2.6.1. Modelo térmico de una celda

La celda fue descargada dentro de una cámara de temperatura constante a una temperatura ambiente de 23 °C, desde su estado de carga máxima hasta alcanzar el voltaje de corte de 2 V a corrientes constantes de 0,6 A, 1,5 A, 3 A y 6 A.

Para independizarnos de la batería y pasar las corrientes de descarga a una unidad que nos permita normalizarla con respecto a la capacidad de la batería, es conveniente introducir el concepto de tasa de descarga o tasa C'' . Esta es una medida de la tasa a la que se descarga una batería en relación con su capacidad máxima. Una velocidad de 1C significa que la corriente de descarga descargará toda la batería en 1 hora. Para una batería con una capacidad de 2 Ah, esto equivale a una corriente de



Figura 2.17: Paquete de batería de 24 celdas.

descarga de 2 A. Una tasa de 2C implica descargar la batería en media hora, y para esta batería sería de 4 A, y una tasa de 0,5C descargaría la batería en dos horas con una corriente de 1 A. De esta manera, las corrientes de descarga usadas para descargar la batería (0,6 A, 1,5 A, 3 A y 6 A) medidas en la unidad C pasan a ser corrientes de descarga de 0,2C, 0,5C, 1C y 2C.

En las figuras 2.18, 2.19, 2.20 y 2.21 se pueden observar los datos experimentales junto a los datos obtenidos de las simulaciones para las diferentes tasas de descarga, mostrándose del lado izquierdo el potencial de la batería en función de la capacidad descargada, y del lado derecho las temperaturas en función de la capacidad descargada. Como las corrientes de descarga fueron constantes, el eje de capacidad descargada se corresponde con un eje temporal.

Mediante la optimización de los parámetros desconocidos, se pudo obtener una buena aproximación al comportamiento de la celda comercial, como se puede observar en las figuras 2.18, 2.19, 2.20 y 2.21.

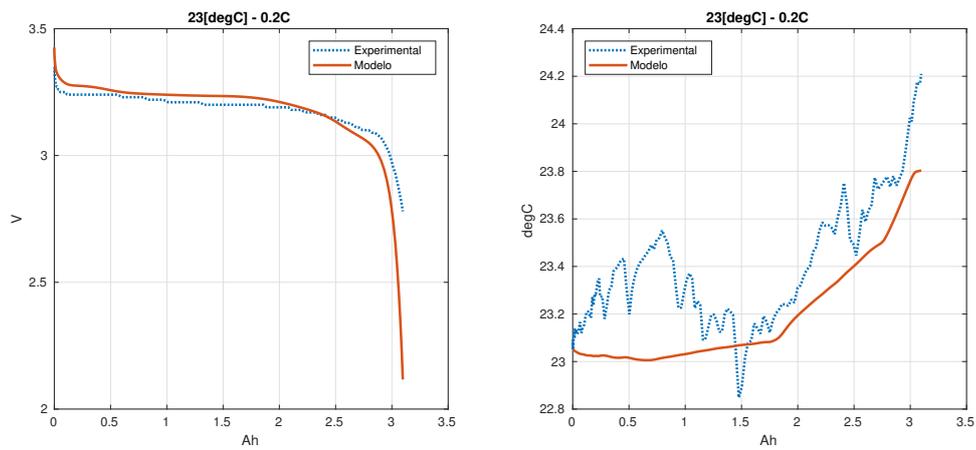


Figura 2.18: Perfil de potencial y temperatura de la batería para una descarga a 0,2C.

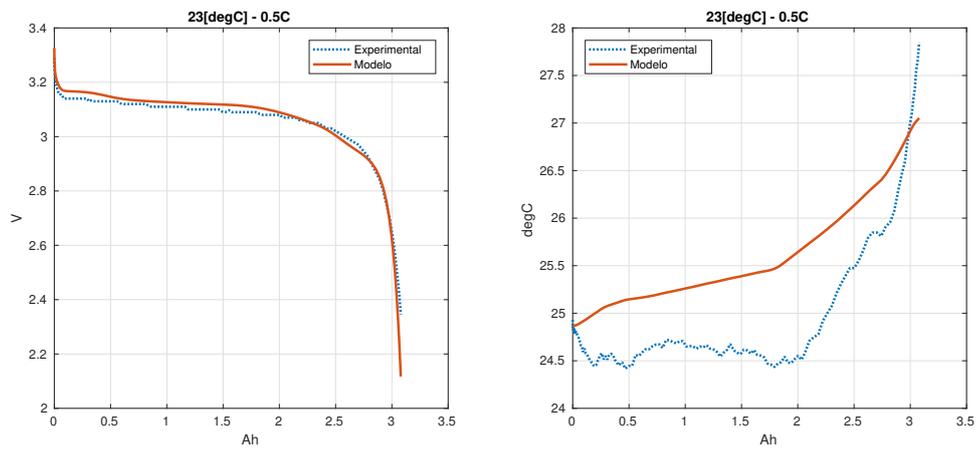


Figura 2.19: Perfil de potencial y temperatura de la batería para una descarga a 0,5C.

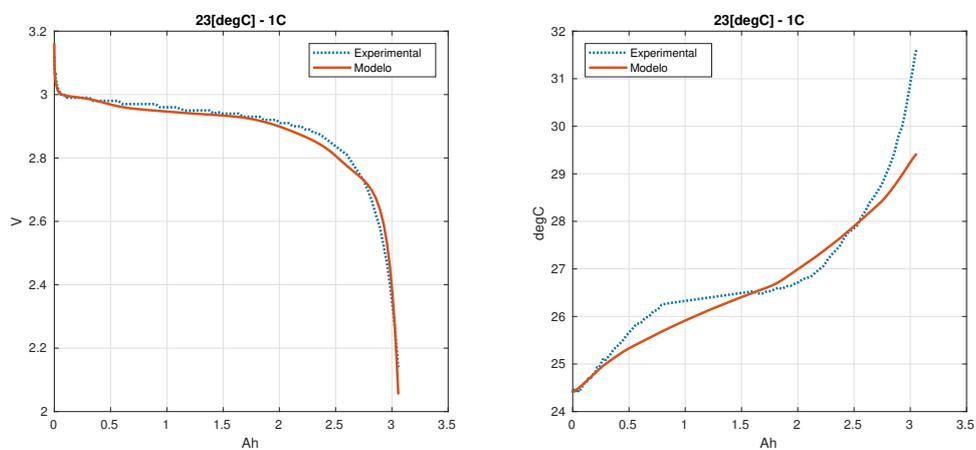


Figura 2.20: Perfil de potencial y temperatura de la batería para una descarga a 1C.

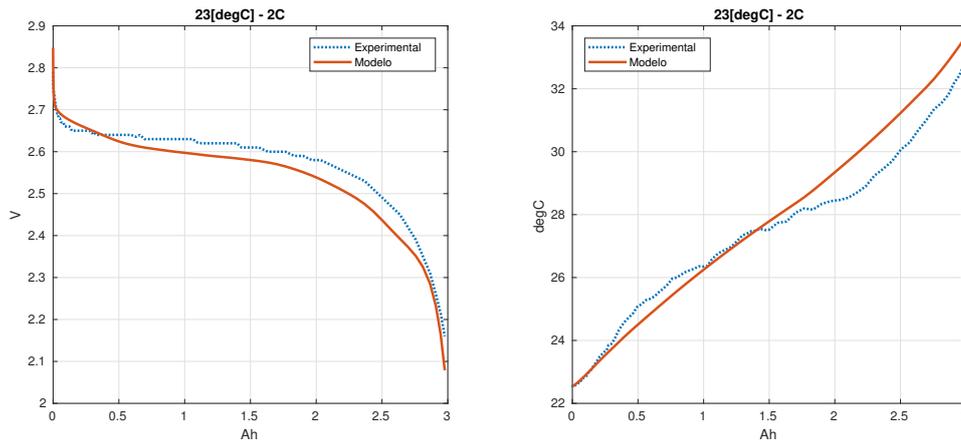


Figura 2.21: Perfil de potencial y temperatura de la batería para una descarga a 2C.

2.6.2. Modelo térmico del paquete de baterías

Con los parámetros ya optimizados y validados en una celda cilíndrica para corrientes constantes, se verificó el modelo con un ciclo de corriente variable. El ciclo de corriente se obtuvo simulando el ciclo de manejo "World Motorcycle Test Cycle" (WMTC) en un modelo matemático de un scooter, obteniendo la potencia eléctrica necesaria para impulsar el vehículo y luego usando el modelo de baterías de la sección 2.4.1 para obtener un perfil de corriente. El perfil de corriente obtenido puede verse en la figura 2.23. El paquete fue descargado en una habitación a una temperatura ambiente que permaneció constante a 29 °C.

Para medir la temperatura de las celdas, se colocó una termocupla sobre la superficie de la parte superior de la celda en el medio del terminal de una de las celdas que se encuentran en el centro del paquete (ver figura 2.22) y se midió la temperatura del modelo en el mismo punto. La figura 2.24 muestra un punto rojo en el lugar donde se evaluó la temperatura en el modelo. La razón para tomar la medición en ese punto fue colocarlo lo mas cerca del centro del paquete de baterías, donde se espera que la temperatura sea más alta que en otras regiones del paquete.

Los resultados del test experimental y de la simulación pueden verse en las figuras 2.25, 2.26 y 2.27.

Observando las figura 2.23 y 2.25 se puede ver que el modelo representa bien los potenciales durante la descarga, pero los potenciales durante los periodos donde no circula corriente varían en hasta 0,5 V. Esto puede deberse a que los valores de potenciales de equilibrio con respecto al litio tomados no modelen exactamente los materiales de la batería comercial. No obstante a ello, esta diferencia no modifica en absoluto el desempeño del modelo en cuanto a fidelizar el comportamiento de la

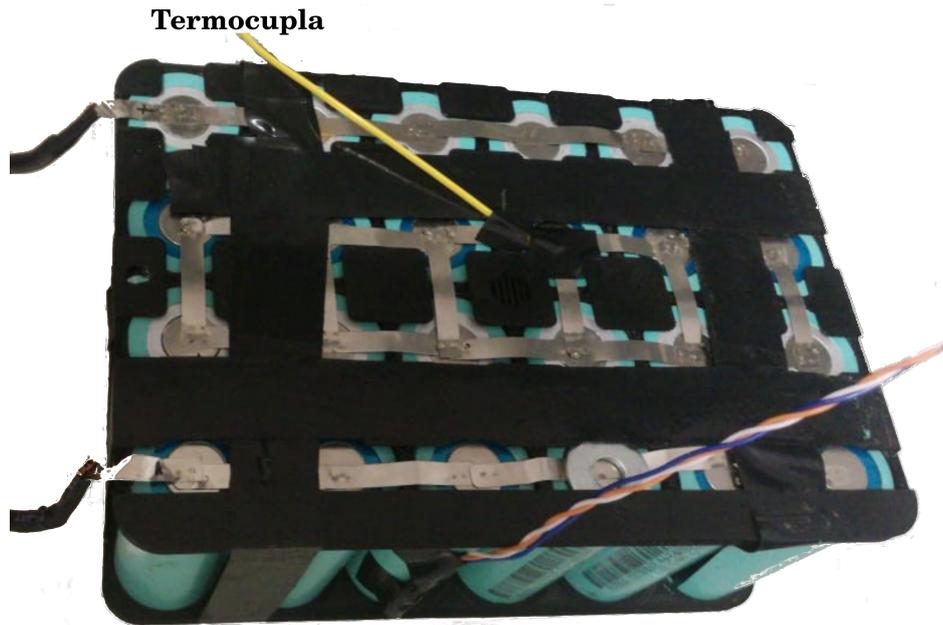


Figura 2.22: Ubicación de la termocupla.

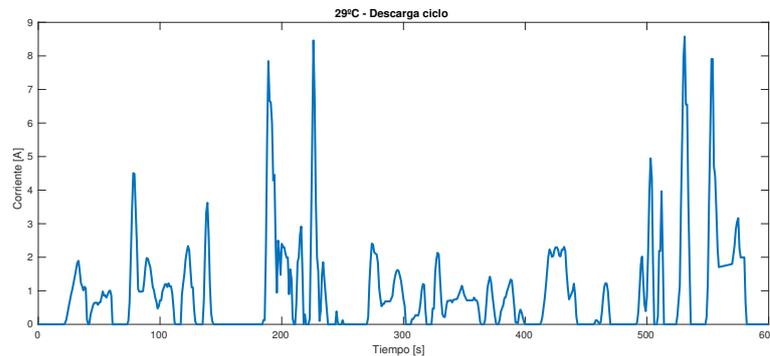


Figura 2.23: Perfil de corriente usado para la comprobación experimental y la simulación.

batería, ya que estas diferencias de potencial se dan a corriente cero y por lo tanto a potencias cero y nula descarga de energía. Aún así la optimización de los parámetros permite que se modele con cierta fidelidad el comportamiento durante la descarga.

En la figura 2.26 se observa que la curva de temperatura sigue de cerca el comportamiento experimental de la celda en el orden del error de medición del instrumento.

En las figuras 2.27 y 2.28 se muestra el perfil de temperaturas sobre el corte transversal y sobre las caras exteriores del paquete de la batería en el instante final del proceso de descarga de la misma ($t = t_f$).

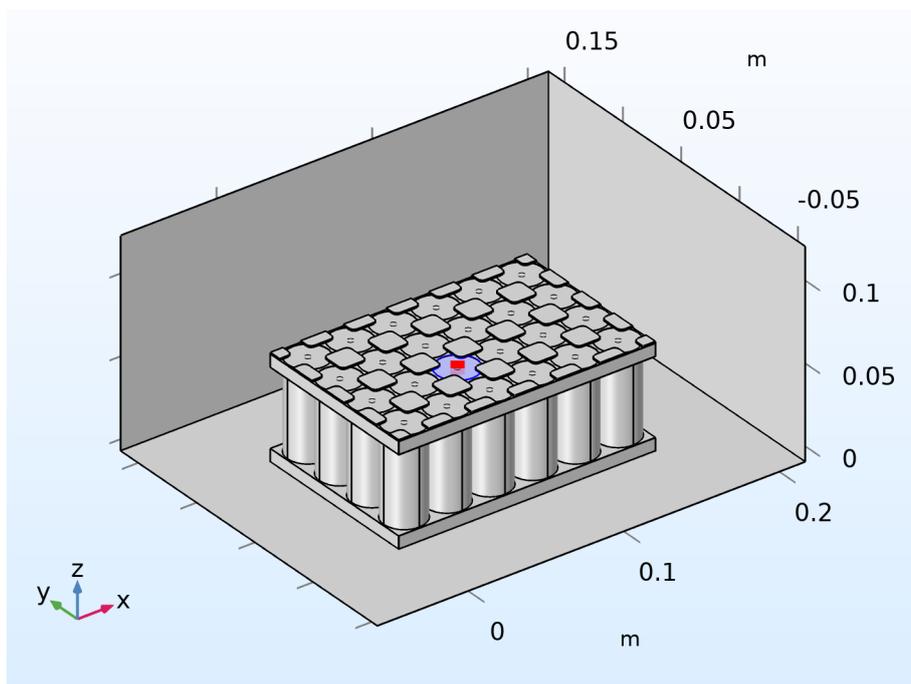


Figura 2.24: Modelo 3D del paquete de baterías con la ubicación de la termocupla.

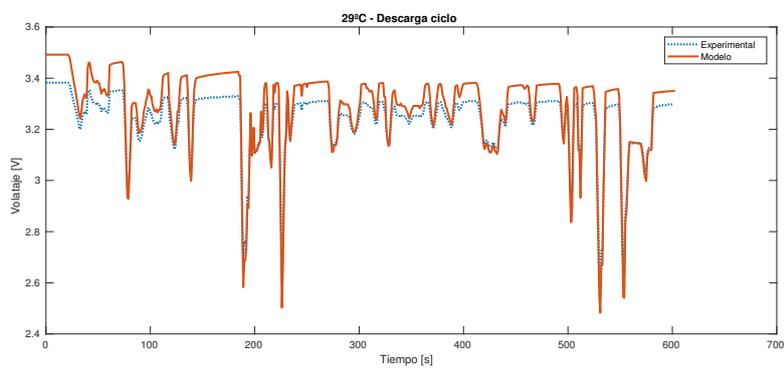


Figura 2.25: Perfil de potencial obtenido en test experimental y en la simulación.

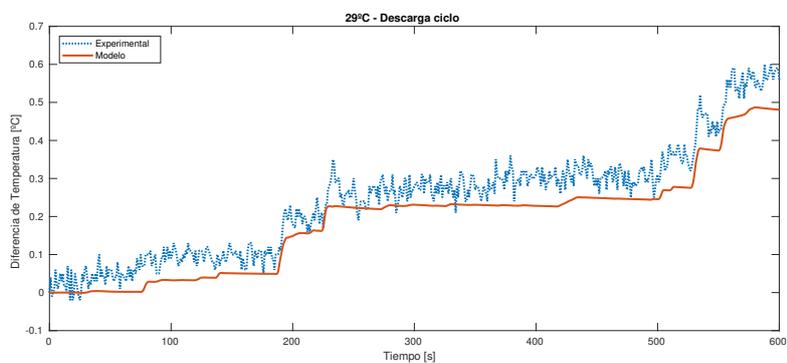


Figura 2.26: Perfil de temperatura obtenido en test experimental y en la simulación.

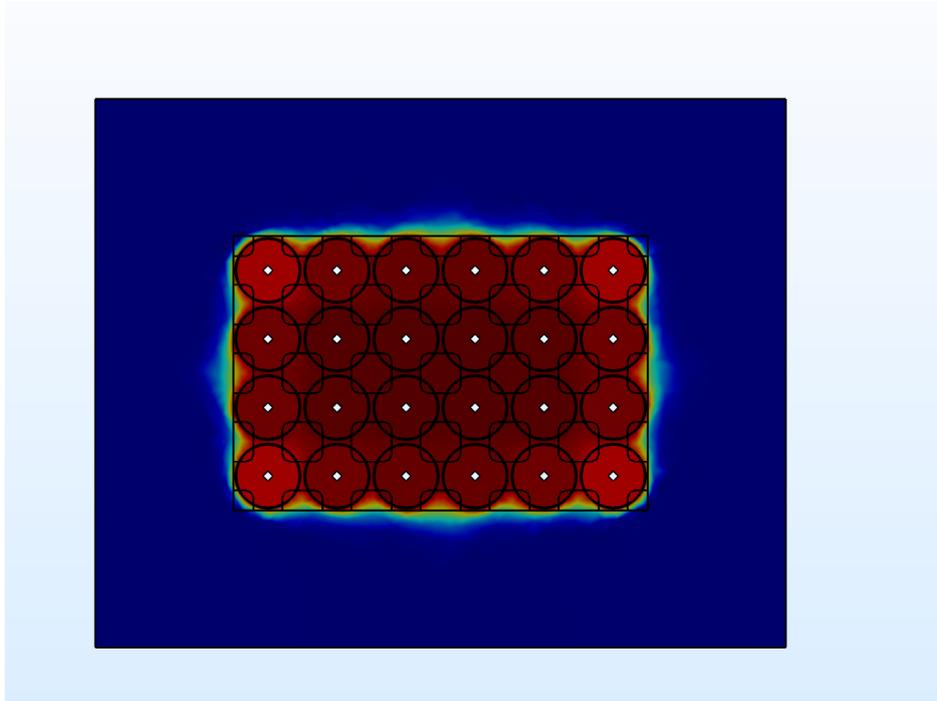


Figura 2.27: Perfil de temperaturas sobre corte transversal del paquete de la batería.

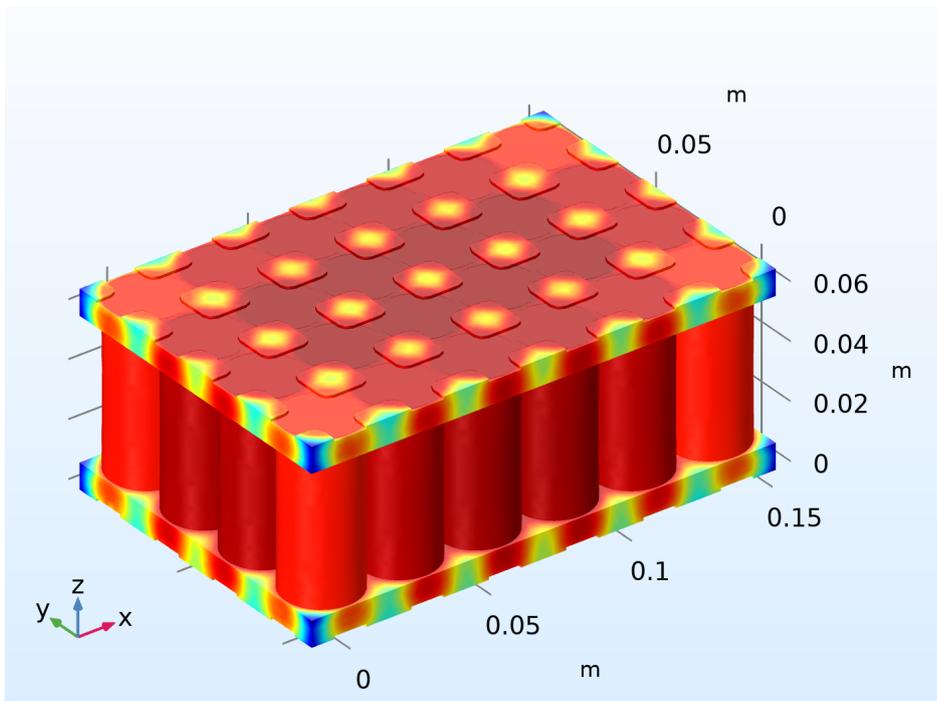


Figura 2.28: Perfil de temperaturas sobre la superficie del paquete de baterías.

2.7. Conclusión

En el desarrollo de este capítulo se presentaron dos modelos matemáticos para simular baterías de ion-litio. El primero es un modelo matemático semi-empírico y quasi-estático de bajo esfuerzo computacional que sirve para obtener resultados en simulaciones a nivel vehicular, previamente validado en [34]. Este modelo se utilizará en los capítulos 4 y 5 para modelar una batería de litio a nivel sistema para su utilización en modelos de vehículos de cero emisiones lo que permite mantener el tiempo de simulación de los modelos relativamente bajo.

Seguidamente se presentó un modelo pseudo bidimensional basado en la física acoplado con un modelo térmico de una celda y de un paquete de baterías. Los modelos fueron validados contrastando los resultados de las simulaciones con datos experimentales obtenidos bajo condiciones de trabajo controladas que fueron replicadas sobre los modelos. Se consiguió configurar modelos electroquímicos y térmicos mediante de la selección adecuada y la optimización de los valores de los parámetros. Estos modelos lograron representar adecuadamente los resultados experimentales obtenidos.

Estos modelos permiten simular el comportamiento térmico y electroquímico de una batería cilíndrica de ion-litio y permiten determinar la interacción con el medio, evaluando riesgos a la seguridad como lo son la temperatura que pueda alcanzar la batería. La escalabilidad a modelos de paquetes de baterías permite que el modelo sea útil en la evaluación de prototipos y asista al diseño de los paquetes de baterías y los sistemas de refrigeración necesarios.

Capítulo 3

Aplicaciones del modelo matemático de baterías de litio

En este capítulo se muestra la aplicación del modelo de paquete de baterías bajo diferentes condiciones de refrigeración con su máxima condición de descarga para evaluar las necesidades de evacuación térmica del paquete durante la descarga. Las baterías de iones de litio son muy sensibles a la temperatura y tienen un rango de temperatura óptimo y estrecho. A bajas temperaturas, su rendimiento se ve afectado por una velocidad más lenta de los fenómenos cinéticos y de difusión [67]. La propensión a la deposición de litio también aumenta a una temperatura más baja [68]. A altas temperaturas, aunque estas baterías tienen un mejor rendimiento, su vida útil se ve comprometida [69]. Esto se debe al aumento en la velocidad de las reacciones secundarias indeseables en la celda, así como al crecimiento más rápido de las capas superficiales, como la capa SEI [70]. A temperaturas muy altas, existe el riesgo de fuga térmica [71]. Los electrolitos orgánicos que normalmente se usan en estas baterías son inflamables.

Para garantizar la seguridad y el rendimiento a largo plazo, las baterías de iones de litio deben mantenerse dentro de su rango de temperatura óptimo. Un control de la temperatura garantiza un equilibrio entre el rendimiento y la vida útil, lo que a su vez determina los costos y la seguridad de utilizar esta tecnología.

Para muchas aplicaciones de baterías de iones de litio, como el almacenamiento de energía en una red y los vehículos eléctricos, varias celdas están conectadas en serie y en paralelo en módulos y paquetes para satisfacer las necesidades de energía de la aplicación. Los problemas térmicos pueden agravarse en el caso de módulos y paquetes donde los gradientes térmicos entre diferentes baterías también deben minimizarse, además de mantener las baterías individuales en el rango de temperatura

óptimo. Los grandes gradientes térmicos entre baterías hacen que tengan diferentes rendimientos, lo que a su vez conduce a problemas de equilibrio eléctrico y, en general, a una mayor degradación en estas celdas.

En este capítulo, el enfoque está en demostrar la utilidad del modelo P2D desarrollado en el capítulo 2 para diseñar y evaluar diferentes soluciones de sistemas de enfriamiento. El modelo electroquímico P2D desarrollado y validado en el capítulo 2 se utiliza para estimar la generación de calor y es acoplada con un modelo térmico y dinámico de fluidos para estudiar el comportamiento térmico del paquete.

3.1. Condiciones de refrigeración

En este capítulo se aplicó la refrigeración por circulación de aire. Al modelo del paquete de baterías desarrollado en la sección 2.6.2, se le aplica convección forzada con tres velocidades de entrada de flujo diferentes, 5 cm/s, 10 cm/s y 50 cm/s. El flujo de aire entra homogéneamente en la dirección del eje "y", que es transversal al cuerpo cilíndrico de las celdas, sobre el plano "xz" (ver figura 2.16b). Se simuló una descarga completa del paquete a su máxima exigencia, una corriente de 9 A o 3C por cada celda, esto equivale a descargar el paquete a 54 A (3C).

3.1.1. Flujo de aire de 5 cm/s

En las figuras 3.1 y 3.2 se puede ver el flujo de aire que circula sobre la batería y la temperatura superficial de las celdas para el último instante durante la descarga. El flujo es de 5 cm/s y el aire a la entrada está a una temperatura de 25 °C

En la figura 3.3 se puede observar la distribución de temperaturas sobre la batería y el aire que la rodea en un corte sobre el plano paralelo al plano "xy" que pasa por medio del paquete de baterías. En la figura 3.4 se puede apreciar la temperatura máxima y mínima del material activo dentro del paquete de baterías. De esta última se puede apreciar que la temperatura final máxima aumenta en 20 °C con respecto a la temperatura inicial, llegando a los 45 °C. También se puede observar que con esta condición de enfriamiento las diferencias de temperaturas dentro del material activo, llega a ser de 2 °C, lo cual es relativamente bajo.

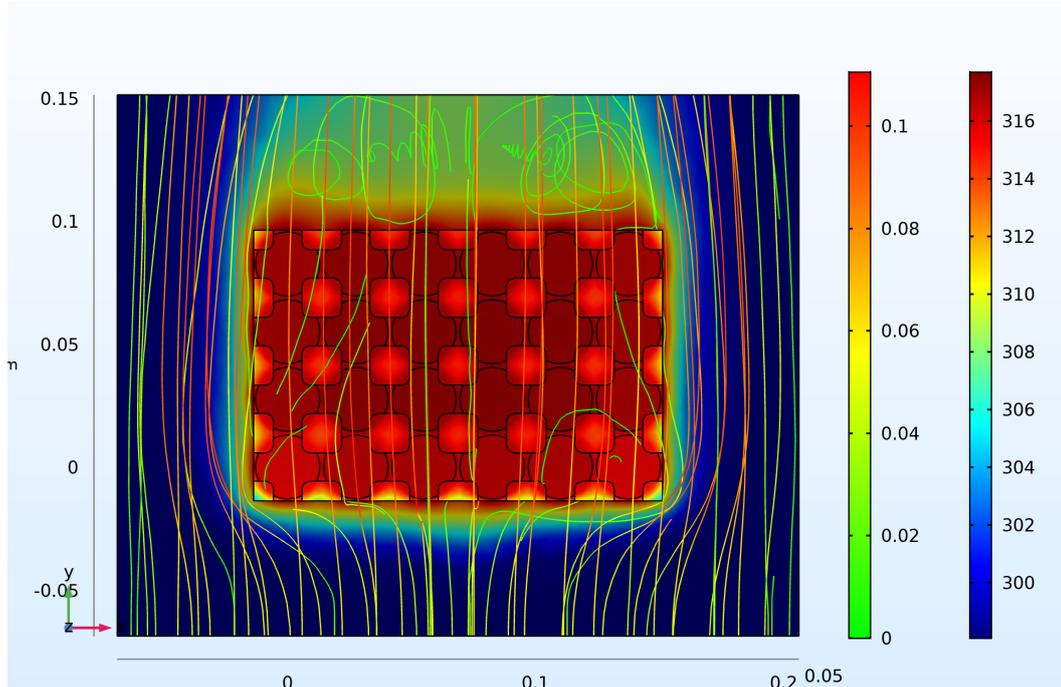


Figura 3.1: Líneas de corriente (en m/s) del flujo de aire y temperatura superficial (en K) sobre el paquete de baterías a flujo de 5 cm/s. Vista del plano xy.

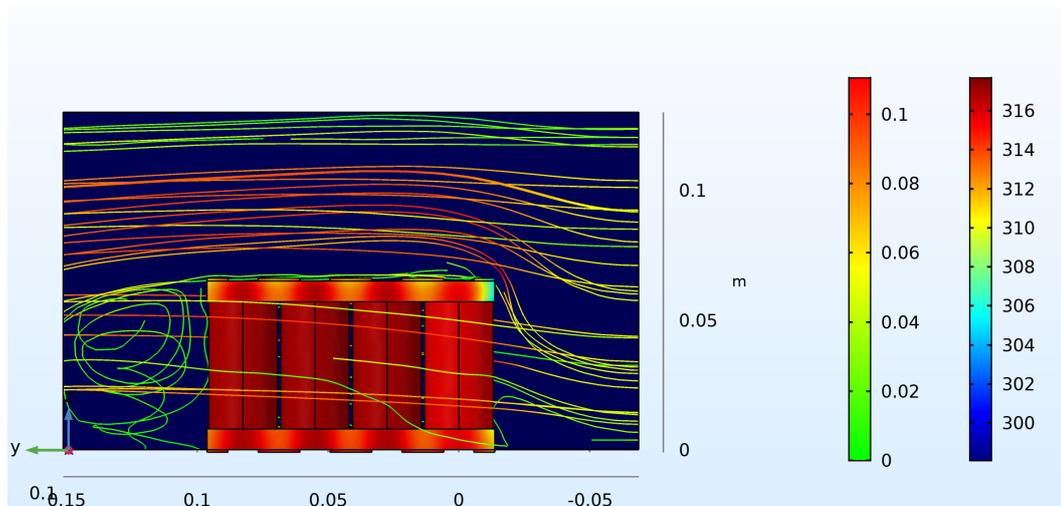


Figura 3.2: Líneas de corriente (en m/s) del flujo de aire y temperatura superficial (en K) sobre el paquete de baterías a flujo de 5 cm/s. Vista del plano yz.

3.1.2. Flujo de aire de 10 cm/s

En las figuras 3.5 y 3.6 se puede ver el flujo de aire que circula sobre la batería y la temperatura superficial de las celdas para el ultimo instante durante la descarga.

En la figura 3.7 se puede observar la distribución de temperaturas sobre la batería y el aire que la rodea en un corte sobre el plano paralelo al plano "xy" que pasa por medio del paquete de baterías. En la figura 3.8 se puede apreciar la temperatu-

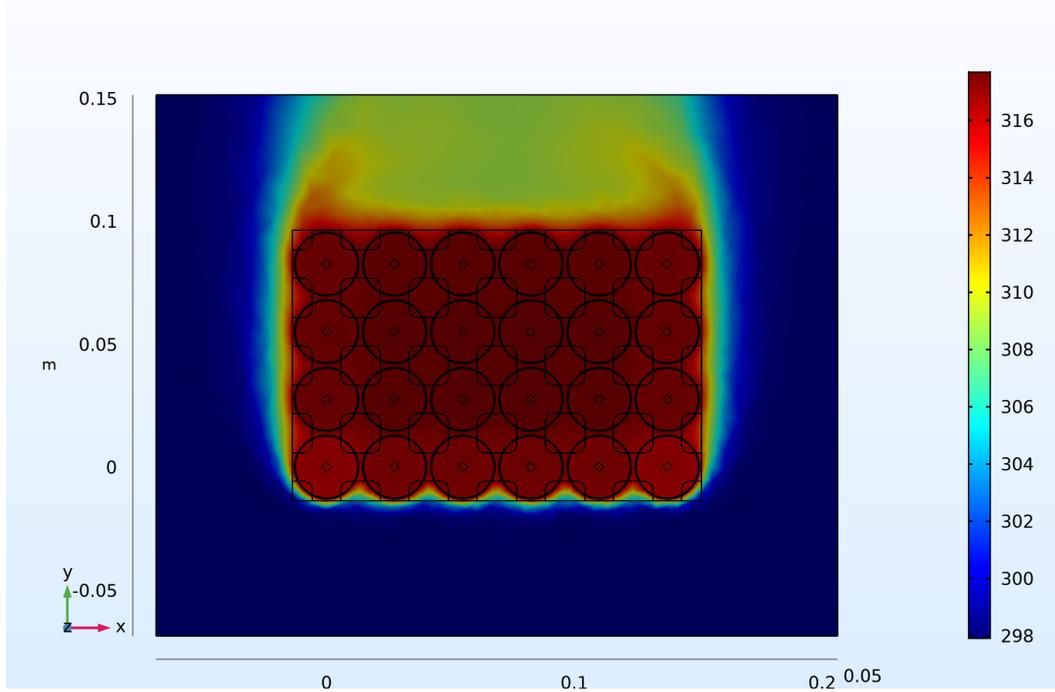


Figura 3.3: Temperatura en el pack de baterías a flujo de 5 cm/s. Vista en corte sobre la mitad de la altura de las celdas.

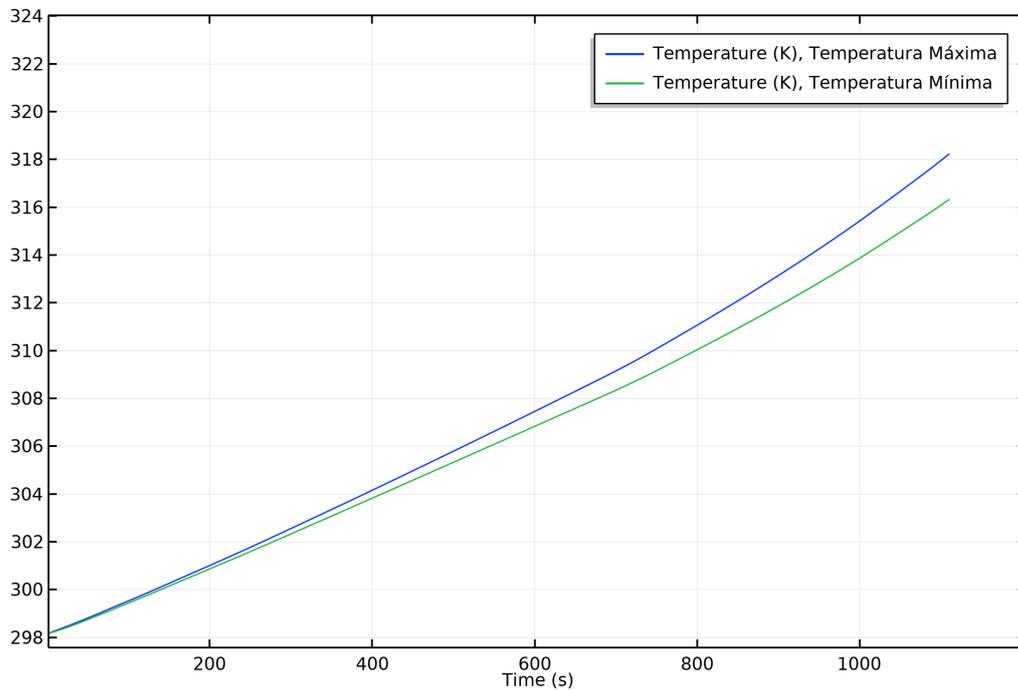


Figura 3.4: Temperatura en el pack de baterías a flujo de 5 cm/s. Perfil de temperatura máxima y mínima en el material activo.

ra máxima y mínima del material activo dentro del paquete de baterías. Se puede ver que, nuevamente, la temperatura final máxima aumenta en 20 °C llegando a los 45 °C . También se puede observar que con esta nueva condición de enfriamiento

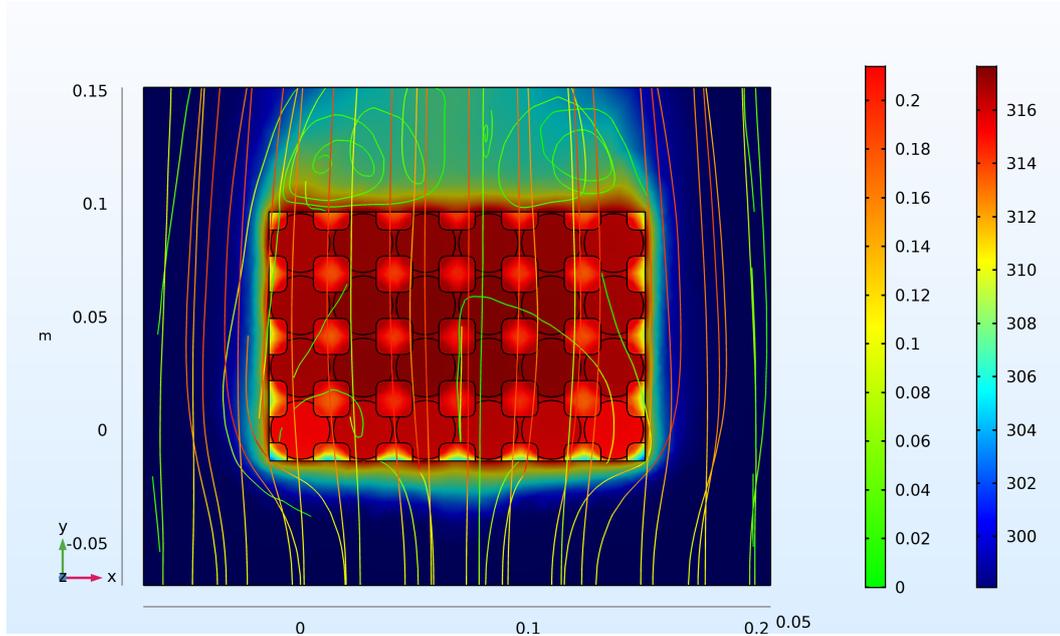


Figura 3.5: Líneas de corriente (en m/s) del flujo de aire y temperatura superficial (en K) sobre el paquete de baterías a flujo de 10 cm/s. Vista del plano xy.

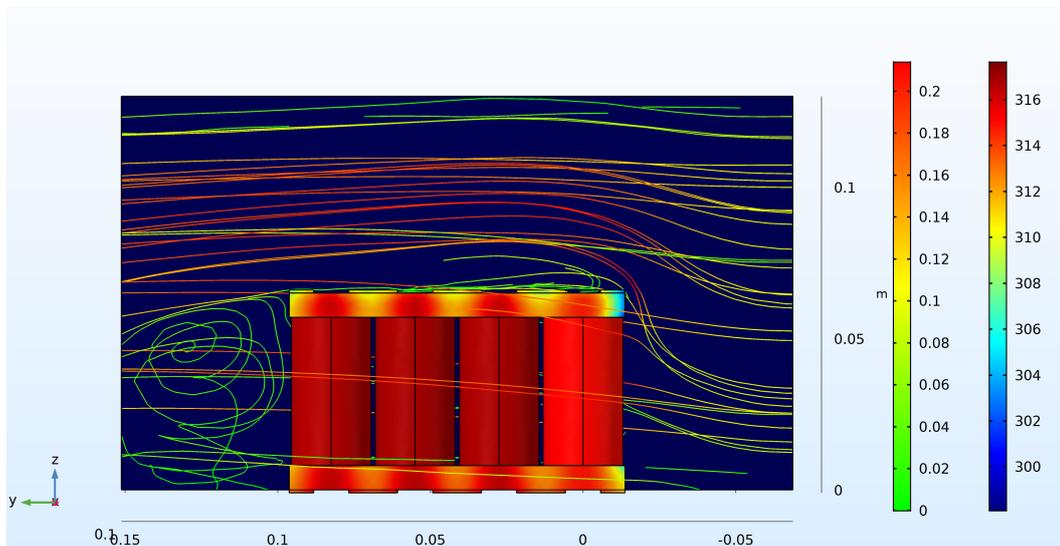


Figura 3.6: Líneas de corriente (en m/s) del flujo de aire y temperatura superficial (en K) sobre el paquete de baterías a flujo de 10 cm/s. Vista del plano yz.

las diferencias de temperaturas dentro del material activo, llega a ser de 3°C , lo cual sigue siendo relativamente bajo y no representa un cambio sustancial sobre la condición de enfriamiento del flujo de 5 cm/s.

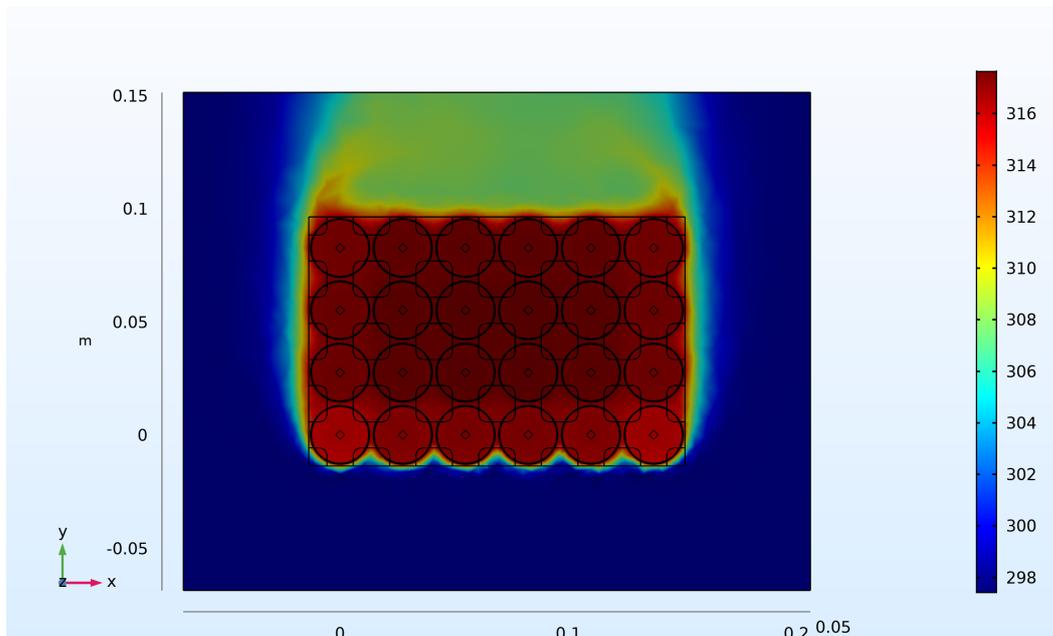


Figura 3.7: Temperatura en el pack de baterías a flujo de 10 cm/s. Vista en corte sobre la mitad de la altura de las celdas.

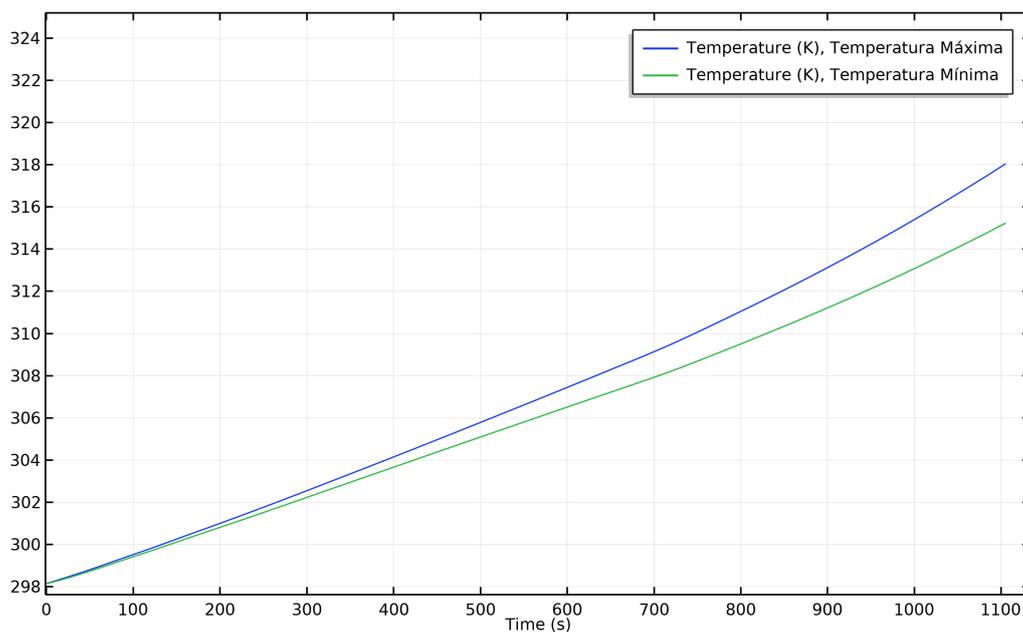


Figura 3.8: Temperatura en el pack de baterías a flujo de 10 cm/s. Perfil de temperatura máxima y mínima en el material activo.

3.1.3. Flujo de aire de 50 cm/s

En las figuras 3.9 y 3.10 se pueden ver el flujo de aire que circula sobre la batería y la temperatura superficial de las celdas para el último instante durante la descarga.

En la figura 3.11 se puede observar la distribución de temperaturas sobre la ba-

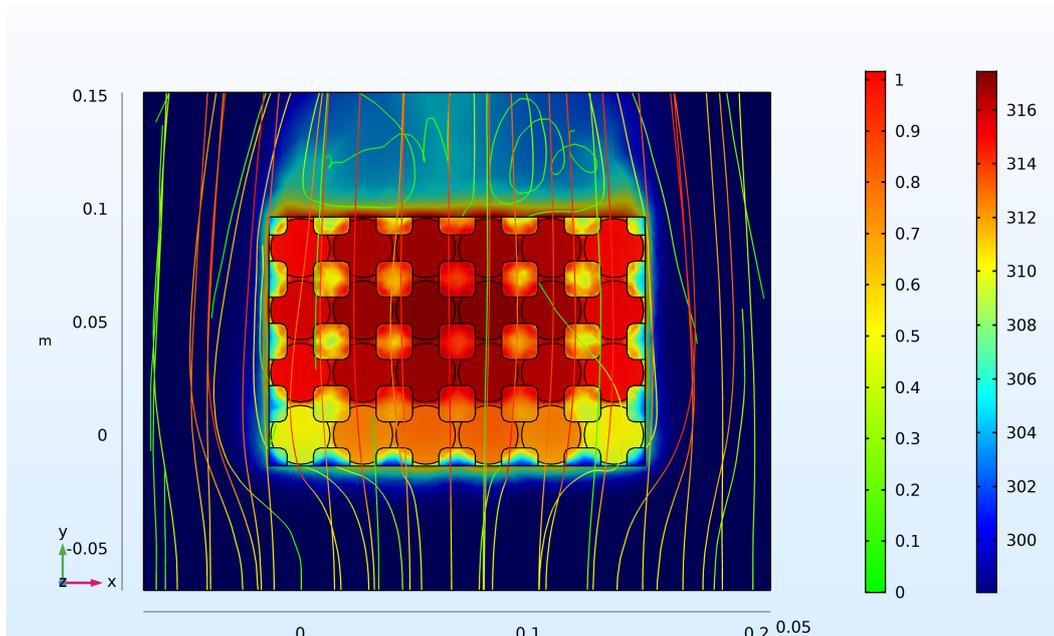


Figura 3.9: Líneas de corriente (en m/s) del flujo de aire y temperatura superficial (en K) sobre el paquete de baterías a flujo de 50 cm/s. Vista del plano xy.

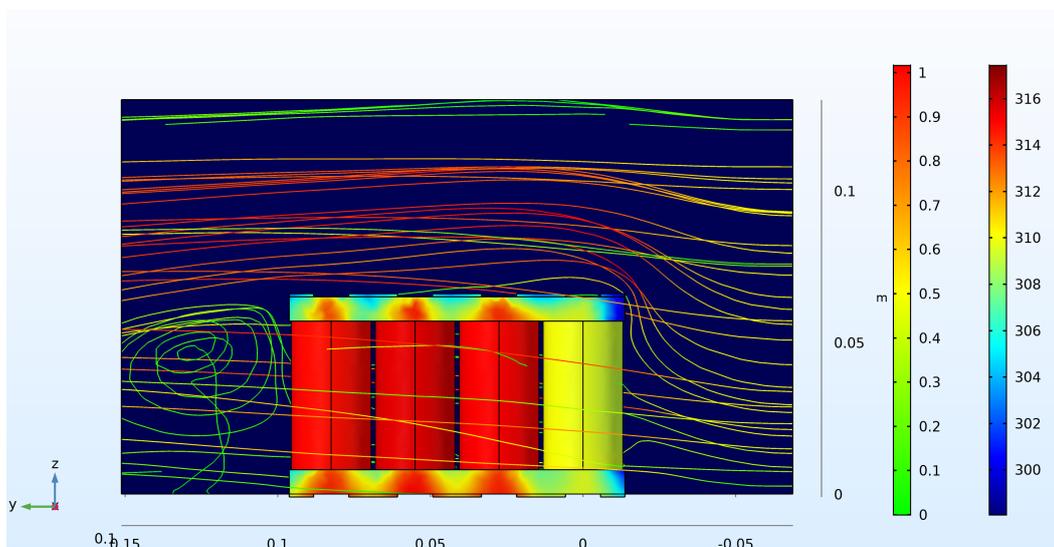


Figura 3.10: Líneas de corriente (en m/s) del flujo de aire y temperatura superficial (en K) sobre el paquete de baterías a flujo de 50 cm/s. Vista del plano yz.

tería y el aire que la rodea en un corte sobre el plano paralelo al plano "xy" que pasa por medio del paquete de baterías. En la figura 3.12 se puede apreciar la temperatura máxima y mínima del material activo dentro del paquete de baterías. Con esta condición de enfriamiento se baja la temperatura máxima final en medio grado, llegando a ser ésta última de 44,5 °C. En este caso la diferencia entre temperaturas máxima y mínima dentro del paquete de baterías llega a ser de 8,7 °C lo cual resulta poco conveniente para la vida útil del paquete.

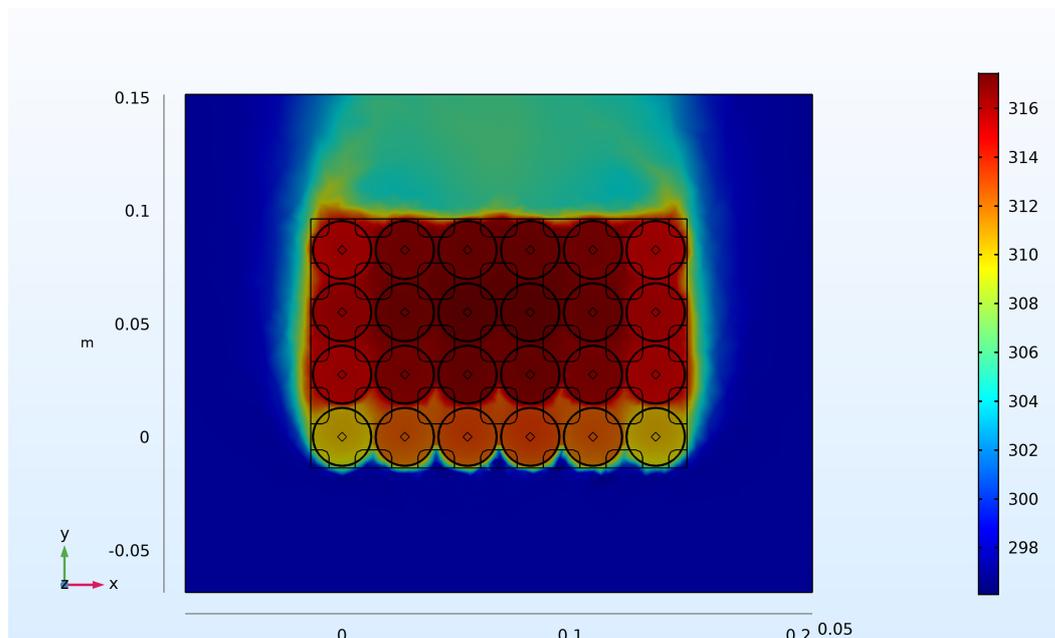


Figura 3.11: Temperatura en el pack de baterías a flujo de 50 cm/s. Vista en corte sobre la mitad de la altura de las celdas.

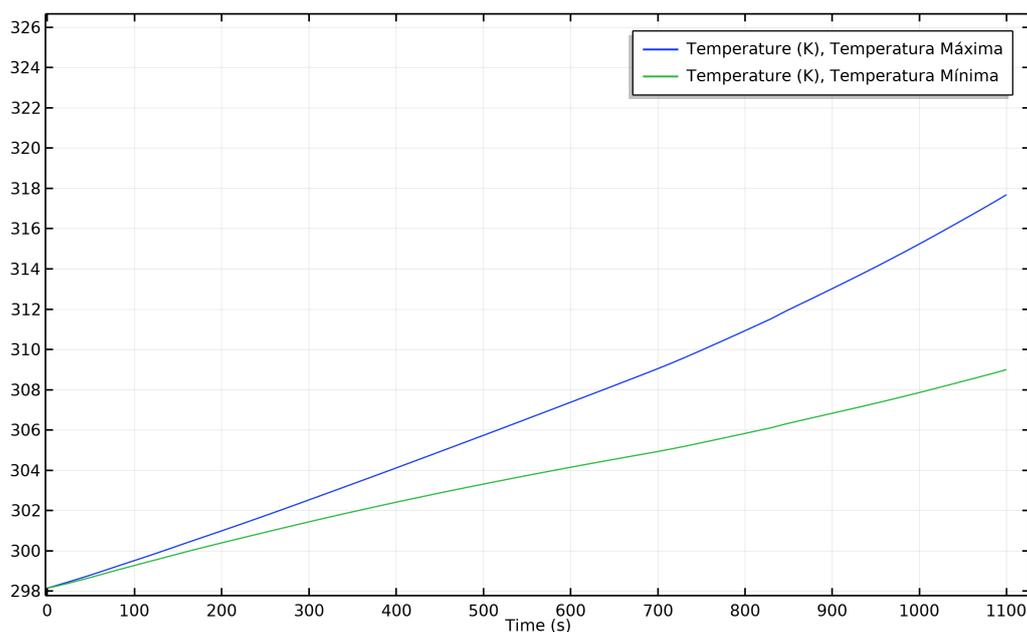


Figura 3.12: Temperatura en el pack de baterías a flujo de 50 cm/s. Perfil de temperatura máxima y mínima en el material activo.

3.2. Conclusión

Se pueden variar varios parámetros del sistema de enfriamiento para garantizar que se atienden las necesidades de la aplicación. Por ejemplo, cambiar la tasa de flujo de aire dará resultados diferentes a los que se han presentado en este trabajo.

Lo mismo es cierto para las temperaturas de entrada del aire. El uso del modelo electroquímico P2D en estas simulaciones garantiza que los datos de generación de calor sean precisos por ser un modelo basado en la física y haber sido previamente validado.

Como se pudo ver en las simulaciones, las temperaturas máximas alcanzadas estuvieron dentro del rango de operabilidad (0°C - 60°C), consiguiéndose diferencias de temperatura en las baterías desde los 2°C a los $8,7^{\circ}\text{C}$ sin presentarse gradientes de temperaturas importantes en una misma celda. Como se puede apreciar en las figuras 3.3, 3.7 y 3.11, solo las baterías del frente consiguen bajar su temperatura, apreciablemente y las baterías centrales no logran, prácticamente, refrigerarse, lo que se puede apreciar también al considerar que la temperatura máxima permanece prácticamente invariable. Se demuestra que para este tipo de enfriamiento, mayores velocidades no resultan en un mejor desempeño ya que las temperaturas máximas no varían y solo se refrigeran las celdas frontales, y en menor grado las celdas laterales. Si se quisiera mejorar la gestión térmica del paquete de baterías habría que cambiar la configuración del paquete, permitiendo un mayor espacio entre celdas para que se generen canales de flujo del aire por donde se pueda evacuar el calor, o bien desarrollar un circuito de enfriamiento con líquido refrigerante.

Capítulo 4

Análisis del pozo a la rueda de cuatro tipos de buses

Este capítulo se basa en el trabajo y los resultados desarrollados en [72] y en otra publicación enviada para su evaluación a una revista científica de nivel Q1.

El empleo de sistemas de propulsión innovadores, como los vehículos eléctricos a batería (BEV), los vehículos eléctricos híbridos de celda de combustible (FCHEV) y los vehículos eléctricos híbridos (HEV) parecen ser un paso muy prometedor hacia la reducción del consumo de la energía, la protección del medio ambiente global y local, y un crecimiento económico más sostenible. [10]. Particularmente en las ciudades y en condiciones climáticas adversas, las emisiones generadas por el tráfico están degradando la calidad del aire hasta el punto en que la salud física de la población está directamente amenazada. Varias ciudades ya han tenido que aplicar repetidas restricciones de tráfico drásticas. El vehículo eléctrico también es ideal para integrarse en nuevos conceptos de gestión de tráfico, como sistemas automáticos de alquiler de automóviles y centros de distribución de mercancías, o pequeños autobuses para servicios en el centro de la ciudad.

Sin embargo debido a la gran variedad de tecnologías de sistemas de propulsión alternativos, fuentes de energía (renovables y no renovables), vectores energéticos y aplicaciones particulares como el rango y el tipo de conducción, los organismos públicos o empresas que decidan incorporar éste tipo de transporte en sus sistemas se podrían formular la pregunta de cómo inciden diversos factores energéticos, de uso y ambientales en el desempeño de los diferentes sistemas de propulsión.

Cuando se planea instalar de manera concreta algunas de estas nuevas tecnologías de transporte, los temas discutidos anteriormente muestran que es necesaria una visión global con el objetivo de analizar el comportamiento de los sistemas en

diferentes escenarios, como el análisis del pozo a la rueda (WTW). Este tipo de análisis permite examinar el rendimiento de los vehículos, el consumo de energía, la autonomía y el impacto ambiental, cuando se alimentan con diversas fuentes de energía y se conducen a lo largo de diferentes tipos de carreteras. Un análisis de WTW también se denomina análisis del ciclo del combustible en el campo del transporte de combustibles y análisis del ciclo de vida (LCA) para productos de consumo [73].

Hay muchos estudios en la literatura basados en el análisis de WTW que realizan un examen detallado de los sistemas de transporte y diversos tipos de generación aplicados a diferentes países. El análisis de WTW es un enfoque útil para evaluar las emisiones de gases de efecto invernadero, entre otros indicadores importantes, producidos por diversos medios de transporte utilizando combustibles producidos a través de diferentes vías. Este estudio toma en cuenta todos los procesos desde la extracción y/o explotación de los recursos naturales hasta la operación del vehículo. Este análisis se puede desglosar en dos etapas, pozo al tanque (WTT) y tanque a rueda (TTW). La primera etapa, WTT, incluye los costos energéticos (en unidades de energía) de la extracción, explotación, transporte y procesamiento de los recursos naturales. En la etapa TTW se tienen en cuenta la eficiencia del propio vehículo, desde que el combustible se carga hasta que se transforma en energía mecánica y calor.

Wang [73], que fue uno de los primeros autores en trabajar con éste método, estudió el impacto de un FCHEV utilizando el modelo GREET y evaluó la energía y las emisiones WTW; Mizsey y Newson [74] compararon cuatro combinaciones de tren motriz y combustible, considerando la eficiencia de WTW, las emisiones de gases de efecto invernadero (GEI) y los costos de inversión; la mejor eficiencia se obtuvo para el vehículo eléctrico híbrido (HEV) con un motor de combustión interna alimentado con diésel, mientras que la mejor emisión de GEI de WTW se obtuvo para el FCHEV, operado con H₂ comprimido producido en una planta centralizada. En Simmons et al. [75] se usó un FCS Ballard con un modelo estático que no tiene en cuenta el comportamiento dinámico. La investigación se basa en un análisis de consumo de energía, sobre simulaciones extensas en diferentes rutas de manejo de autobuses. En este estudio se consideraron cinco configuraciones diferentes de autobuses urbanos híbridos y eléctricos: dos autobuses híbridos paralelos, dos híbridos en serie, y un autobús urbano eléctrico. En general, los resultados de la simulación indican que los autobuses urbanos híbridos plug-in y eléctricos tienen el mejor potencial para reducir el consumo de energía y las emisiones.

Hu et al. [76] realizaron un análisis TTW de un bus híbrido en serie plug-in,

caracterizado por la eficiencia de recuperación de energía, energía consumida por kilómetro y las eficiencias totales del sistema, estos indicadores se cuantificaron y compararon en dos estrategias de administración de energía basadas en la optimización. Los resultados arrojaron que una estrategia mixta resulta mejor para todos los indicadores, que la estrategia base de "agotamiento de carga y mantenimiento de carga". Esta última estrategia se basa en descargar la batería hasta cierto punto y luego mantener la carga dentro de una franja razonable.

Campanari et al. [77] presentaron un estudio de los balances energéticos y ambientales para FCHEV y BEV a través del método de análisis de WTW, aplicado a las simulaciones del ciclo de conducción ECE-EUDC, utilizando modelos de mapas de eficiencia. El análisis muestra que (i) cuando se usan fuentes de energía renovables al 100 % para generar electricidad, el BEV es la opción más eficiente, obviamente también con cero emisiones; (ii) cuando se utiliza una combinación de fuente primaria promedio en la generación de electricidad, o un 100 % de alimentación de carbón o gas natural, los rendimientos del BEV son mucho más bajos, y las soluciones FCEV se vuelven mucho más favorables tanto desde el punto de vista de la eficiencia como desde las emisiones de CO₂, especialmente si el rango de conducción se vuelve significativo (por ejemplo, varios cientos de kilómetros) debido al aumento progresivo del peso de la batería; (iii) entre las opciones de FCEV, FCEV-LH₂, con hidrógeno líquido generado a través de gas natural o por fuentes renovables, es la solución más eficiente y de baja emisión de CO₂. Yazdanie et al. [78] presentan un análisis de WTW para diferentes tecnologías de transmisión de automóviles de pasajeros y diferentes formas de generar los vectores energéticos en Suiza. Se presenta un caso sólido para los BEV enchufables debido a su alta eficiencia de transmisión. Sin embargo, el rendimiento de WTW depende en gran medida de la fuente de electricidad. Además identifican una combinación de electricidad crítica que divide el rendimiento óptimo del tren motriz entre el BEV, ICEV y el vehículo híbrido enchufable. El rendimiento del FCHEV está a la par con los BEV para la producción de vectores a través de los recursos de biomasa y gas natural. Sin embargo, los BEV superan a los FCHEV a través de la producción de vectores con energía solar. Los ICEV que usan combustibles alternativos, particularmente biogás y GNC, también producen una notable reducción de la energía y las emisiones de WTW, lo que indica que los combustibles alternativos, y no solo las transmisiones alternativas, desempeñan un papel importante en la transición hacia vehículos de bajas emisiones. Torchio y Santarelli [79] proponen un índice global de WTW que toma en cuenta los aspectos energéticos y ambientales, a través de la asignación de los costos asociados a la energía y las emisiones contaminantes. En el trabajo de Svensson et al. [80], se aplicó un enfoque de WTW para evaluar los impactos ambientales y energéticos de

la introducción de hidrógeno en el sector del transporte en condiciones relevantes para el sistema energético noruego. En Garcia et al. [81] se examinó el impacto ambiental causado por el ciclo de vida del proceso de producción, acondicionamiento y transporte de los combustibles utilizados por los autobuses (diésel, biodiésel (B100), un biodiésel mezclado al 20 % (B20), y gas natural), donde también se incluyó un análisis de WTW. Sharma and Stresof [82] realizaron el análisis del ciclo de vida ambiental y económico de los impactos de combustibles alternativos y una comparación con los combustibles convencionales para las condiciones australianas. En el estudio de Zhou et al. [83], se probaron tres modelos BEV en la carretera mientras se participaba en un proyecto de demostración en Macao y se aplicaron análisis de LCA y WTW en las evaluaciones de energía y medioambiente para combustibles alternativos y sistemas de baterías. Karabasoglu y Michalek [84], y Ang [85] informaron que las condiciones de conducción tales como el peso del vehículo, la velocidad de conducción media, las aceleraciones y frenados, la ruta de manejo, etc., afectan el rendimiento de los diferentes trenes de potencia produciendo cambios en las eficiencias y las emisiones de GHG, por lo tanto, utilizar ciclos de conducción significativamente diferentes permitirá un análisis más completo y reduce el sesgo producido por el uso de un solo ciclo de manejo.

En éste capítulo se propone desarrollar un análisis comparativo novedoso para ayudar a los gobiernos locales o tomadores de decisiones a evaluar los impactos ambientales y energéticos de las tecnologías de autobuses alternativas. El marco permite a las partes interesadas tomar decisiones sobre la adopción de tecnología y la asignación de recursos basándose en la comprensión de la influencia de la ruta de la energía, la combinación de electricidad, las condiciones de conducción y los diferentes rangos en el desarrollo actual y el futuro de los vehículos urbanos de pasajeros. También proporciona algunas respuestas a las complejidades de diseño y planificación para la implementación de tecnologías de bus eléctrico. Por lo tanto, se propone un método general para comparar los rendimientos energéticos y ambientales de diferentes tipos de motores y vectores de energía utilizando un único índice multifísico.

El estudio se lleva a cabo dentro del alcance del análisis WTW (desde el pozo a la rueda) y se aplica a un autobús urbano de pasajeros con cuatro sistemas de propulsión diferentes, alimentados con sus respectivos combustibles (o vectores de energía) obtenidos de diferentes fuentes. El sector del transporte se analiza como una parte esencial del crecimiento de una ciudad inteligente. A su vez, en la etapa WTT se evalúan diferentes energías primarias para los combustibles y escenarios energéticos para la producción de electricidad, tanto actuales como futuros.

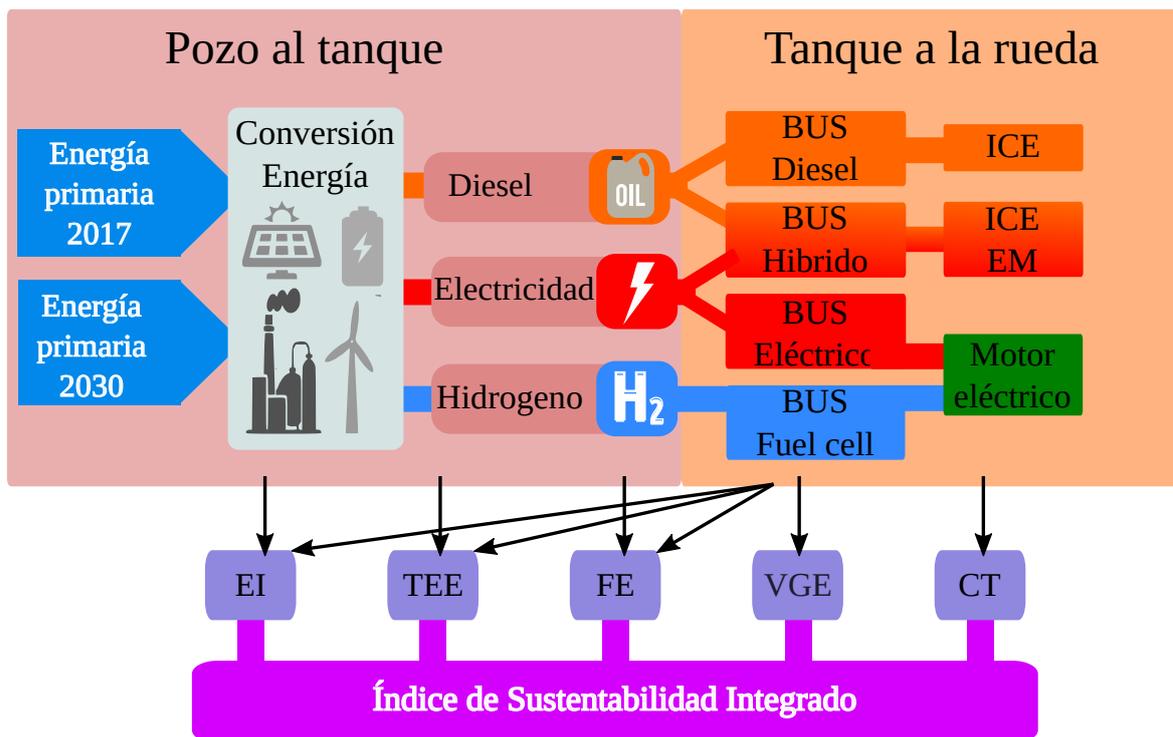


Figura 4.1: Esquema gráfico del método propuesto.

El consumo de energía y las emisiones de los autobuses (etapa TTW) varían significativamente debido a las condiciones de manejo (es decir, congestión, geografía y número de paradas) y configuraciones de propulsión (es decir, grado de hibridación, tipo de batería y tipo de celda de combustible). Por lo tanto, en la etapa TTW se utilizaron modelos dinámicos junto con dos ciclos de conducción diferentes que imponen condiciones de conducción diferentes.

El paso del pozo al tanque se realizó para escenarios presentes y futuros (año 2030) utilizando diferentes supuestos para los próximos años y obteniendo diversos parámetros energéticos y ambientales. Posteriormente, ambas etapas se integraron en una etapa de pozo a rueda donde se propusieron y discutieron índices relevantes. Con el fin de evaluar adecuadamente las diferentes hipótesis para sistemas, rango, ciclos y escenarios, se utilizó un indicador multifísico (Índice integrado), valorado entre cero y uno. En la figura 4.1 se muestra el esquema del método propuesto en éste estudio.

Los mejores resultados para el caso de Argentina se lograron con vehículos eléctricos híbridos a corto y mediano plazo. A largo plazo, los vehículos eléctricos con batería son convenientes solo para un rango de conducción corto, mientras que los autobuses con celdas de combustible ofrecen buenos rendimientos para un rango de conducción más extenso. Posteriormente, se extendió dicho análisis comparativo en

cuatro tipos de trenes de propulsión de autobuses urbanos de pasajeros dentro del alcance de WTW en Argentina, Chile y Brasil. Los trenes motrices estudiados fueron: motor de combustión interna alimentado con diésel, vehículo eléctrico híbrido de celda de combustible alimentado con hidrógeno, vehículo eléctrico de batería alimentado con electricidad y vehículo eléctrico híbrido alimentado con diésel. El objetivo del estudio es comprender cuál es la influencia de la ruta de la energía, la combinación de electricidad, las condiciones y los rangos de conducción en el desarrollo actual y futuro de los vehículos de pasajeros urbanos. Descubrimos que los vehículos de emisión cero (ZEV por su sigla en inglés: zero-emissions vehicle) son notablemente superiores en el paso del tanque al de la rueda; sin embargo, las acciones para mejorar su energía y el desempeño ambiental deben centrarse en cómo generar energía limpia dentro de la combinación de electricidad y con qué tecnologías. Para que los autobuses FCHEV sean competitivos, la proporción de producción de hidrógeno proveniente del viento u otras tecnologías de cero emisiones debería ser mayor que 50 %. En Argentina y Chile, los autobuses con ICE siguen siendo una alternativa importante en el escenario actual solo para largas distancias, en cambio, Brasil resulta ideal para la aplicación de autobuses eléctricos completos.

4.1. Método

Para el análisis de WTT, se propusieron dos escenarios para la producción de vectores de energía en Argentina, el actual (año 2017) para todos los vectores de energía y un escenario futuro (año 2030) para la generación de electricidad, basado en el trabajo de Di Sbroiavacca et al. [86], y para la producción de hidrógeno. En ambos casos los combustibles diésel, hidrógeno gaseoso comprimido (H_2), y electricidad se consideraron como vectores de energía de salida.

La figura 4.2, muestra las fuentes de energía primarias, el proceso de transporte y distribución, y los combustibles y vectores de energía relevantes para suministrar todos los sistemas de propulsión utilizados, brindando una descripción visual de las rutas utilizadas desde la extracción de energías primarias hasta sus usos finales.

Para el diésel, se consideraron las emisiones y las energías primarias necesarias para producirlo a partir del petróleo crudo junto con su distribución por camión y barcazas.

En la etapa TTW se propusieron cuatro trenes de potencia en un autobús de transporte urbano de pasajeros, que utilizan los vectores de energía analizados en la etapa WTT:

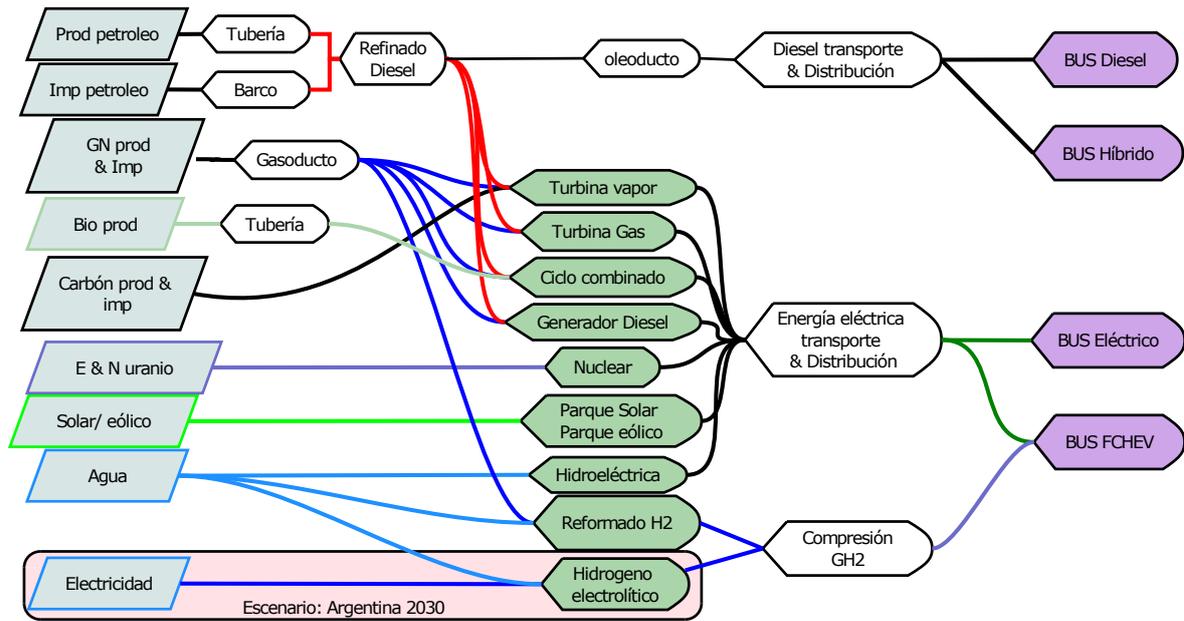


Figura 4.2: Fuentes de energía, procesos de transporte y distribución, y combustibles y vectores energéticos de interés.

- Vehículo con motor de combustión interna alimentados con diésel (DV).
- Vehículo híbrido con celdas de combustible (FCHEV) alimentado con hidrógeno.
- Vehículo eléctrico a baterías (BEV) alimentado con electricidad.
- Vehículo eléctrico híbrido (HEV) alimentado con diésel.

El análisis WTW se hizo desde la perspectiva del transporte público estudiando los trenes de potencia en un autobús para el transporte urbano de pasajeros. Las características principales del bus se enumeran en la tabla 4.1. Como se muestra en la Figura 4.3, cada modelo utilizado permite analizar el rendimiento de los buses proporcionando una gran cantidad de datos de salida de los cuales solo algunos de ellos se utilizan para este trabajo y se describen en la sección 4.1.3.

Tabla 4.1: Parámetros del Bus.

Parámetro	Valor	Unidad
Peso de la carrocería	12754.4	kg
Coefficiente de drag	0.79	-
Coefficiente de rodadura	0.0094	-
Radio de la rueda	0.486	m
Peso de los pasajeros	1500	kg

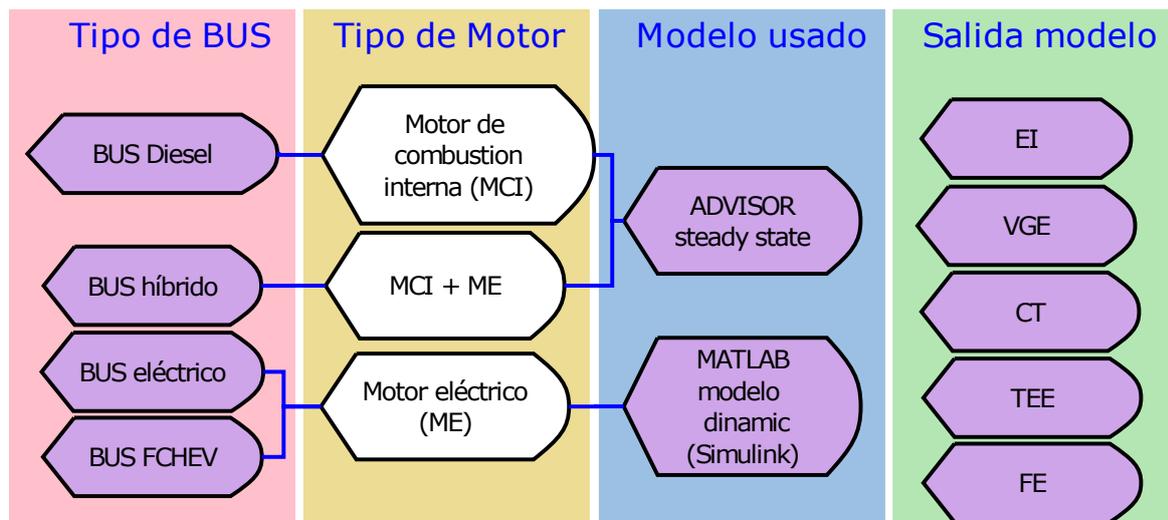


Figura 4.3: Método de análisis TTW.

4.1.1. Etapa del pozo al tanque (WTT)

El modelo utilizado es el conocido GREET [73] desarrollado por el laboratorio ARGONNE, que es una herramienta analítica para estimar el uso de energía y las emisiones del ciclo del combustible. El modelo se utilizó para estudiar el uso de energía en ciclo del combustible y las emisiones para tres vectores de energía diferentes, diésel, H₂ y Electricidad.

4.1.1.1. Producción del hidrógeno

El reformado con vapor de hidrocarburos (steam reforming) es el proceso más económico y ampliamente utilizado para la producción de hidrógeno [87]. En realidad, aproximadamente 90 % del hidrógeno generado en el mundo se produce a partir de combustibles fósiles, principalmente a través del reformado de metano con vapor, [88, 89]. El gas natural, compuesto principalmente por metano, se usa comúnmente como el insumo principal. También se requiere electricidad para la compresión, almacenamiento y suministro de gas hidrógeno. Actualmente en Argentina, el H₂ se produce siguiendo la tendencia mundial.

La producción de H₂ para el escenario actual se consideró a partir del reformado del gas natural utilizando fuentes del mix Argentino de energías primarias, y su transporte a través de tuberías virtuales. Para el escenario futuro (escenario Argentina 2030) se consideró la obtención de H₂ a partir de un mix de hidrógeno electrolítico de parques eólicos e hidrógeno obtenido por reformado del gas natural en iguales proporciones. El transporte se consideró hecho a través de tuberías virtuales. Una

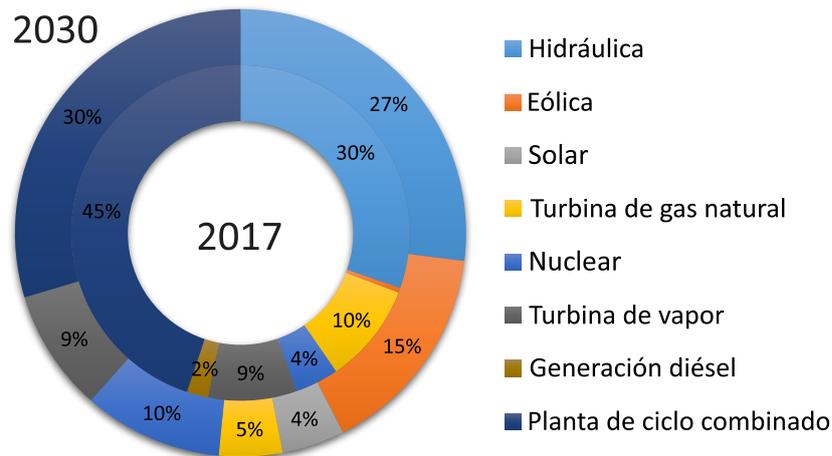


Figura 4.4: Tecnologías y tasa de participación en la generación de energía eléctrica en Argentina.

tubería virtual es una alternativa a una tubería convencional, en la cual no hay una tubería física que conecte la fuente y el usuario del gas que se está enviando. Un gasoducto virtual permite el uso de gas en lugares donde la red de gasoductos no llega. Esto se logra comprimiendo el gas en el origen y distribuyéndolo a través de camiones a los distintos puntos de consumo.

4.1.1.2. Generación eléctrica

Para la producción y distribución de electricidad en la matriz eléctrica argentina se tuvo en cuenta todos los métodos de generación disponibles en Argentina en su proporción adecuada: térmica (turbina de gas y de vástago, motor diésel, ciclo combinado), nuclear, renovables (solar y eólica) e hidráulica. La producción de electricidad necesita como insumos uranio natural y enriquecido, fuentes renovables como la energía solar y eólica, y combustibles fósiles producidos en el país e importados, como petróleo, gas y carbón.

La figura 4.4 muestra la combinación de tecnologías, eficiencias y tasas de participación en la generación eléctrica a partir de la combinación argentina de energías primarias para el escenario 2017 y para el escenario 2030. El mix de electricidad actual, se realizó utilizando el informe mensual de la compañía administradora del mercado mayorista de electricidad (CAMMESA) [90], que contiene información sobre la generación mes a mes de los últimos tres años. Estos datos se utilizaron para calcular la participación promedio de cada tecnología de generación a lo largo del año 2017. El escenario futuro se definió utilizando el trabajo de Di Sbroiavacca et al. [86].

Cada tecnología utilizada para la generación de energía eléctrica a partir de fuentes fósiles utiliza diferentes materias primas: en el caso del ciclo combinado, tiene 88.42 % de gas natural (NG) y 11.58 % de gasóleo; la turbina de gas de ciclo simple tiene 91.18 % de NG y 8.82 % de gasóleo y, finalmente, la turbina de vapor tiene 16.06 % de carbono, 59.1 % de fuel oil y 24.84 % de NG. La combinación argentina de energías primarias para el escenario 2030 se tomó del trabajo de Di Sbroiavacca et al. [86].

En ambos escenarios se consideraron las pérdidas debidas a la distribución y transmisión en la red eléctrica usando los datos del Banco Mundial [91].

4.1.1.3. Producción y distribución de diésel

Para generar las rutas de producción de diésel se tomaron los insumos actualizados de Argentina e incluyeron el combustible importado transportado en barcaza, crudo tradicional y no tradicional de las reservas nacionales, transporte de petróleo crudo, refinación de diésel, transporte y distribución de diésel, para el vehículo diésel y el vehículo eléctrico híbrido.

La producción de diésel se calculó como una mezcla de 90 % de diésel y 10 % de biodiésel a partir de granos de soja, siguiendo lo que establece la resolución 1125/2013 de la Secretaría de Energía [92]. El biodiésel se propone como una forma de diversificar las fuentes de energía sin la necesidad de una nueva infraestructura o modificación en los vehículos y como un combustible renovable [93, 94]. En vista del aumento sostenido en el porcentaje de biodiésel en la mezcla, en el futuro escenario se propone un 20 % de mezcla de biodiésel a partir de soja.

4.1.2. Etapa del tanque a la rueda (TTW)

En esta sección se ofrece una breve descripción de los componentes usados en cada uno de los trenes de potencia de los buses de pasajeros, y los diferentes modelos matemáticos utilizados para hacer las simulaciones y una descripción de los ciclos utilizados para el estudio.

4.1.2.1. Modelo de trenes de potencia

Los BEV y FCHEV se evaluaron utilizando modelos desarrollados en el grupo de trabajo al cual pertenezco [34, 95–97] y los sistemas de propulsión restantes se simularon utilizando ADVISOR [98]. Este último aproxima el comportamiento di-

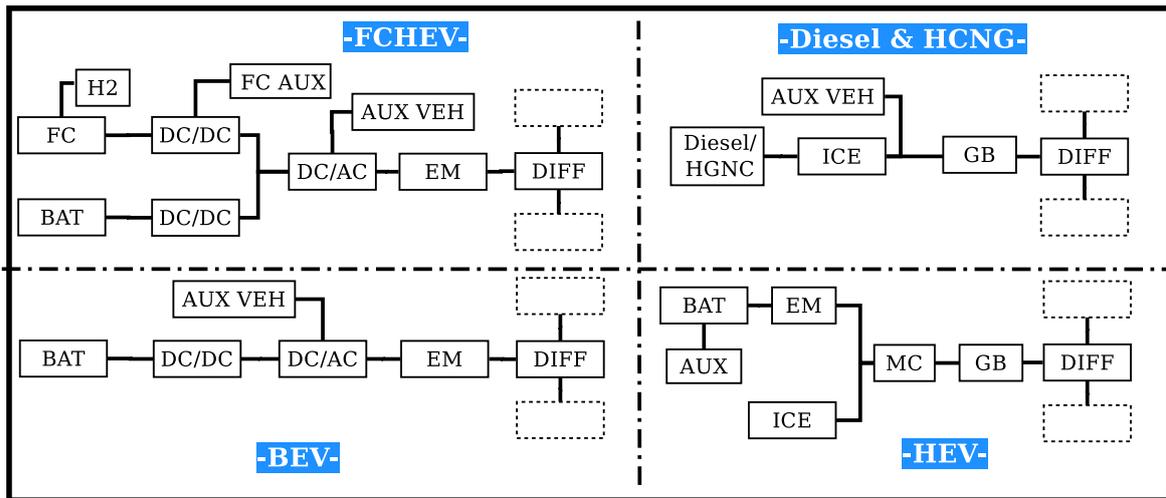


Figura 4.5: Diagrama de componentes para los distintos trenes de potencia.

námico de un vehículo a través de una serie de pasos discretos durante los cuales, se asume el estado estacionario de los componentes. Este supuesto permite utilizar para cada componente del sistema mapas de eficiencia provenientes de pruebas de estado estacionario en el laboratorio.

Los FCHEV y el BEV son vehículos de emisión cero (ZEV), lo que significa que no producen emisiones de contaminantes gaseosos durante su operación. Estos vehículos son propulsados por motores eléctricos alimentados con electricidad de baterías, sistemas de celdas de combustible, o cualquier otra fuente de electricidad; tienen una mayor eficiencia general y un menor consumo de energía cuando el vehículo está inactivo, mientras que el motor de combustión interna (ICE) necesita combustible para mantenerse en movimiento. Los BEV y el FCHEV además de las emisiones cero, junto con el HEV, tienen la ventaja de tener frenos regenerativos, que permiten recuperar y almacenar la energía que, de lo contrario, se perdería como calor en el sistema de frenos de fricción. El peso del combustible no se considera en este estudio y, por lo tanto, el peso neto se considera invariante.

La figura 4.5 muestra el diagrama de flujo de energía de las diferentes arquitecturas de tren de potencia propuestas, donde H₂ es el sistema de almacenamiento de hidrógeno, DC/DC son los convertidores Buck-Boost, DC/AC son los inversores, EM son los motores eléctricos, MC es el acoplamiento mecánico, GB son las cajas de engranajes y DIFF son los diferenciales y las reducciones finales.

Para calcular la energía requerida para el movimiento del bus, se tuvieron en cuenta los efectos del rodadura de la rueda, la fuerza ejercida por la gravedad en pendientes, la resistencia del aire, la eficiencia de los componentes electrónicos, la eficiencia del motor eléctrico en modo motor y freno, la eficiencia mecánica y la

energía auxiliar requerida por el vehículo [34]. Este modelo es útil para todo tipo de vehículos al ajustar los diversos parámetros de entrada, como el peso del vehículo, los factores de rodadura, el coeficiente de arrastre, las tablas de eficiencia de los motores eléctricos, etc. La ecuación 4.1 expresa la potencia eléctrica necesaria para alimentar el motor eléctrico en los modelos de bus FCHEV y BEV, considerando los efectos aerodinámicos, gravimétricos y de rodadura, los componentes electrónicos, el motor eléctrico y las eficiencias mecánicas. Los valores de los parámetros se especificaron en la tabla 4.1.

$$P_{req} = \frac{\left[\left(\frac{dV}{dt} + f_0 g \cos(\alpha) + g \sin(\alpha) \right) M + \frac{1}{2} C_D \rho A V^2 \right] V}{\eta_{elec} \eta_{EM} \eta_{mec}} + P_{aux} \quad (4.1)$$

donde:

P_{req}	Potencia eléctrica requerida por el autobús [W]
V	Velocidad del autobús [m/s]
f_0	Factor de rodadura [m/s ²]
g	Aceleración de la gravedad [m/s ²]
M	Masa del autobús [kg]
C_D	Coeficiente de arrastre
ρ	Densidad del aire [kg/m ³]
A	Área frontal del autobús [m ²]
P_{aux}	Potencia auxiliar del autobús [W]
η_{elec}	Eficiencia de los componentes electrónicos
η_{EM}	Eficiencia del motor/generador eléctrico
η_{mec}	Eficiencia de los componentes mecánicos

Se considera que el sistema auxiliar funciona a una potencia constante de 6 kW, consumidos por los sistemas de aire acondicionado, bombas hidráulicas, luces, instrumentos, etc.; alimentándose con la electricidad generada a bordo o proveniente de las baterías.

La tabla 4.2, muestra los pesos de los buses de celdas de combustible y eléctrico a baterías, en todos los ciclos utilizados. El peso del bus vacío se refiere al peso de la carrocería sin contar los elementos del tren de potencia y FCS significa sistema de pila de combustible.

4.1.2.2. Bus diésel

Este vehículo funciona con un tren de potencia convencional que consiste en un motor diésel Caterpillar 3126E, una caja de cambios Rockwell RM10-145A y un

Tabla 4.2: Peso de todos los sistemas en todos los ciclos, en kg.

Ciclo	Autonomía [km]	Todos los buses		Bus FCHEV				Bus BEV			
		Carrocería	Pasajeros	FCS + EM	BAT	H2 tanque	Total	BAT peso	Total		
UK	100	12754	1500	750	108	209	15621	1404	15659		
	200					420	15832	2988	17242		
	300					638	16051	4854	19109		
	400					864	16277	7143	21397		
EUDC	100			12754	1500	1000	385	166	16105	1138	15393
	200							329	16268	2338	16592
	300							497	16436	3662	17916
	400							665	16603	5145	19399

catalizador estándar para motores diésel, que suman un peso parcial de 1262 kg y dan un peso total de 15389 kg.

4.1.2.3. Bus eléctrico híbrido

Los vehículos híbridos utilizan dos o más fuentes de energía, por ejemplo, motores eléctricos y motores de combustión interna. Hay varias configuraciones disponibles como: en serie, paralelo, serie-paralelo, etc. Para el bus híbrido se adopta una configuración paralela (ver figura 4.5). El motor de combustión interna es un Mercedes OM611, que alcanza 92 kW a 4200 rpm conectado a una caja de cambios Rockwell RM10-145A con un catalizador estándar para el motor diésel. La propulsión eléctrica comprende 100 módulos de baterías de ión-litio Saft de 6 Ah y un motor eléctrico de 100 kW. Los elementos del tren motriz mencionados anteriormente pesan 895 kg y contribuyen a un peso total de 15031 kg.

4.1.2.4. Bus eléctrico a baterías

El vehículo eléctrico (BEV) es propulsado por un motor eléctrico de 250 kW alimentado únicamente por la energía almacenada en las baterías de ion-litio. La selección de las baterías determina la potencia máxima disponible y la capacidad de energía de los sistemas, a diferencia del FCHEV donde la capacidad de energía está vinculada a la selección del tanque, y la potencia máxima al FCS. La batería seleccionada tiene 56 celdas de 30 Ah en serie, con una tensión nominal de cada celda de 3,7 V y voltaje nominal del pack completo de 207,2 V, una corriente de descarga máxima de 600 A, y una corriente de carga máxima de 30 A. El máximo y el mínimo de *SoD* se establecieron como 80 % y 10 %, lo que da un 70 % profundidad de descarga (*DOD*). El *SoD* inicial para cada ciclo se establece como 10 % y el freno regenerativo puede cargar la batería si el *SoD* alcanza este límite. Cada paquete de baterías, que

Tabla 4.3: Parámetros usados en el modelo de la batería.

Parámetro	Valor	Unidad
Capacidad de cada celda	30	Ah
Voltaje nominal	3.7	V
Corriente de descarga max.	600	A
Corriente de carga max.	30	A
Voltaje de corte	2.7	V
Número de celdas	56	
Profundidad de descarga	70 %	
SOD inicial	10 %	
SOD máximo	80 %	
SOD mínimo ¹	10 %	

consiste en 56 celdas en serie, tiene una energía nominal de 6,22 kWh y se colocan en paralelo para aumentar el alcance del autobús

Como entradas, el modelo necesita la temperatura ambiente, la potencia requerida por el vehículo en cada instante y la potencia entregada por el freno regenerativo del vehículo. Como salidas se obtienen la tensión y la corriente suministrada, la temperatura de la batería, el estado de descarga y las pérdidas debidas a los procesos de carga y descarga. El modelo utilizado para las baterías del bus se encuentra descrito en la sección 2.4.1.

La conexión de las celdas individuales puede ser en serie, en paralelo o combinarse según los objetivos. Usando baterías en serie, es posible aumentar el bus de voltaje manteniendo la capacidad del stack de baterías igual a la capacidad de una sola batería, mientras que una disposición en paralelo aumenta la capacidad y mantiene el bus de voltaje de la pila de baterías igual al voltaje de una sola batería. Por lo tanto, una batería de 56 celdas de ion-litio en serie se define como el bus de potencial eléctrico objetivo, y el número de baterías en paralelo varía a medida que aumenta la autonomía pretendida del autobús.

La tabla 4.3 muestra los parámetros usados para el modelo de la batería.

4.1.2.5. Bus con celdas de combustible

El tren de potencia del FCHEV consta de un conjunto adecuado de tanques de hidrógeno de 350 bar, un sistema de celdas de combustible y una batería de ion-litio y un motor eléctrico de 250 kW. La principal fuente de energía es el hidrógeno almacenado en un recipiente a presión (350 bar) que se transforma en electricidad

¹SOD a partir del cual el freno regenerativo y la FC pueden cargar la batería

Tabla 4.4: Parámetros del FCS.

Parámetro	Valor
Área activa de cada celda	419 cm ²
Nro. de celdas por stack	370
Potencia bruta	75 kW
Porcentaje de purga de H ₂	8 %

en la celda de combustible, la batería de ion-litio, cuyo modelo se trató en la sección anterior: 4.1.2.4, se utiliza como sistema secundario de energía para ayudar a la celda de combustible cuando ésta no puede alcanzar la potencia solicitada por el vehículo, debido a un retardo producto de la inercia del sistema de pila de combustible o porque la potencia solicitada excede la potencia máxima de FC. La batería se puede cargar durante el funcionamiento con el excedente de potencia de la FC o mediante el frenado regenerativo.

La celda de combustible Ballard FCvelocity®-HD6, esta diseñada específicamente para autobuses eléctricos, ofrece 150 kW (2 pilas de 75 kW) de potencia bruta con un peso del sistema de 400 kg. El sistema incluye humidificación de aire, recirculación del H₂ y condensador para la recuperación del agua [21]. La tabla 4.4 muestra las principales características de cada sistema FC. Para el ciclo EUDC se utilizan dos pilas y para el ciclo UK una sola pila.

El modelo dinámico de la pila PEMFC se extrajo del trabajo de Correa et al. [96, 97, 99] y se modificó introduciendo los parámetros apropiados [100]. Este modelo toma en cuenta los principales fenómenos electro-químicos, térmicos, y de dinámica de fluidos para predecir la potencia de salida y se combina con el modelo de balance de planta que incluye el compresor, dispositivos de refrigeración y sistemas de gestión de agua. Para obtener el voltaje de la celda, se deben calcular las presiones del reactivo en la capa de catalizador y la concentración como una función de las condiciones de funcionamiento de la celda. Además, dado que la salida de potencia depende de los sistemas de gestión de la temperatura, se debe calcular la temperatura de todo el sistema (FC y sistema de gestión del agua). Los cambios en la temperatura provienen de la producción de calor por la reacción química exotérmica, de la disipación de calor interno y de la transferencia de calor con el circuito de enfriamiento.

La ecuación de Nernst da el potencial de equilibrio para una reacción dada como una función de la temperatura y las presiones del reactante, y puede expresarse como:

$$E_0 = -\frac{\Delta\bar{g}(T, p_0)}{2F} + \frac{RT_{st}}{2F} \ln \frac{P_{H_2}P_{O_2}^{0,5}}{P_{H_2O}} \quad (4.2)$$

Tan pronto como la celda de combustible produce una corriente neta, se produce la sobretensión de activación (η_{act}), la sobretensión de concentración (η_{conc}) y la sobretensión óhmica (η_{ohm}). En la ecuación (4.3) se obtiene el voltaje real de la celda V_{FC} como la suma del voltaje ideal de Nernst obtenido de la ecuación (4.2) y las suma de sobretensiones ($\sum \eta$).

$$V_{cell} = E_0 - \eta_{act} - \eta_{conc} - \eta_{ohm} \quad (4.3)$$

El consumo total de hidrógeno viene dado por la ecuación (4.4).

$$m_{H_2} = \int_{t_0}^{t_f} M_{H_2} N_C \frac{(I_{FC}(t) + I_{aux}(t))}{2F} dt \quad (4.4)$$

donde:

- I_{FC} Corriente de salida de la FC [A]
- I_{aux} Corriente de los auxiliares de la FC [A]
- M_{H_2} Masa molar del hidrógeno [kg/mol]
- N_C Número de celdas en serie en la celda de combustible
- F Constante de Faraday [C/mol]

El modelo fue validado con los datos obtenidos de una demostración realizada en el marco del proyecto ENFICA-FC [101]. La validación del modelo a través de datos experimentales se informa en Romeo et. al. [102]. Las ecuaciones clave de los modelos electroquímicos, de balance de masas y térmicos se resumen en la Tabla 4.5.

4.1.2.6. Ciclos de manejo para buses

Dado que diferentes patrones de conducción modifican el consumo de energía de los vehículos [84], se propusieron dos ciclos de conducción para este estudio. El primer ciclo es el NEDC (Nuevo ciclo de manejo europeo, por sus siglas en inglés) en su variante con el tramo final EUDClow (Ciclo de conducción extra urbano para vehículos de baja potencia) [103] el cual a partir de ahora será referido como EUDClow. El segundo es el ciclo UK-BUS (ciclo de manejo del bus de tránsito de Londres) [104]. La figura 4.6 muestra las dos características de velocidades de los ciclos de conducción. El ciclo UK-BUS es un ciclo de conducción de autobus real, con múltiples arranques y paradas donde la velocidad máxima es relativamente ba-

Fenómeno	Ecuación	Referencia
Principales ecuaciones del modelo electro-químico		
Pérdida de potencial por activación en los electrodos	$\eta_{act_{cat}} + \eta_{act_{an}} = \eta_{act} = \frac{RT_{st}}{2F} \sinh^{-1} \left(\frac{i}{2i_{0,an}} \right) + \frac{RT_{st}}{0,5F} \sinh^{-1} \left(\frac{i}{2i_{0,ca}} \right)$	[105]
Densidad de corriente de intercambio en el cátodo	$i_{0,ca} = T^2(552 \times 10^{-9}) + T_{st}(-321 \times 10^{-6}) + 0,04674$	[96]
Resistencia iónica	$r_{ion} = r_m = \frac{t_m}{(5,139 \times 10^{-9} \lambda_m - 3,26 \times 10^{-3}) \exp \left(2416 \left(\frac{1}{273} - \frac{1}{T_{st}} \right) \right)}$	[106]
Principales ecuaciones del modelo térmico		
Intercambio de energía	$mC_{st} \frac{dT_{st}}{dt} = \sum_i \pm G_i \cdot h_{ph,i} - \left \Phi_{conv}^{amb} \right - \left \Phi_{conv}^{WC} \right + \Phi_{source}$	[97]
Int. de calor por convección	$\left \Phi_{conv}^{amb} \right = A_{st}^{amb} \cdot h_{conv}^{cell-amb} (T_{st} - T_{amb})$	
Generación de calor en el stack	$\Phi_{source} = nc \cdot i \cdot A_{cell} \left(\frac{-T_{st} \Delta \bar{s}}{2F} + \sum_j \eta_j \right)$	
Intercambio de calor con el sistema de enfriamiento	$\left \Phi_{conv}^{WC} \right = A_{st}^{WC} \cdot h_{conv}^{WC-amb} (T_{st} - T_{WC})$	
Principales ecuaciones del modelo de balance de planta		
Presión parcial efectiva del H ₂	$p_{H_2}^* = 0,5 p_{H_2O}^{sat} \left[\frac{1}{x_{H_2O}^{channel} \exp \left(\frac{RT}{p_{an} 2F} \frac{I_{st} t_{ca}}{D_{H_2O, H_2}} \right)} \right]$	[107]
		[108]
Presión parcial efectiva del O ₂	$p_{O_2}^* = p_{H_2O}^{sat} \left(\frac{1 - x_{N_2}^*}{x_{H_2O}^*} - 1 \right)$	[109]

Tabla 4.5: Ecuaciones claves electro-química, balance de masa y de planta, y modelo térmico de celda de combustible.

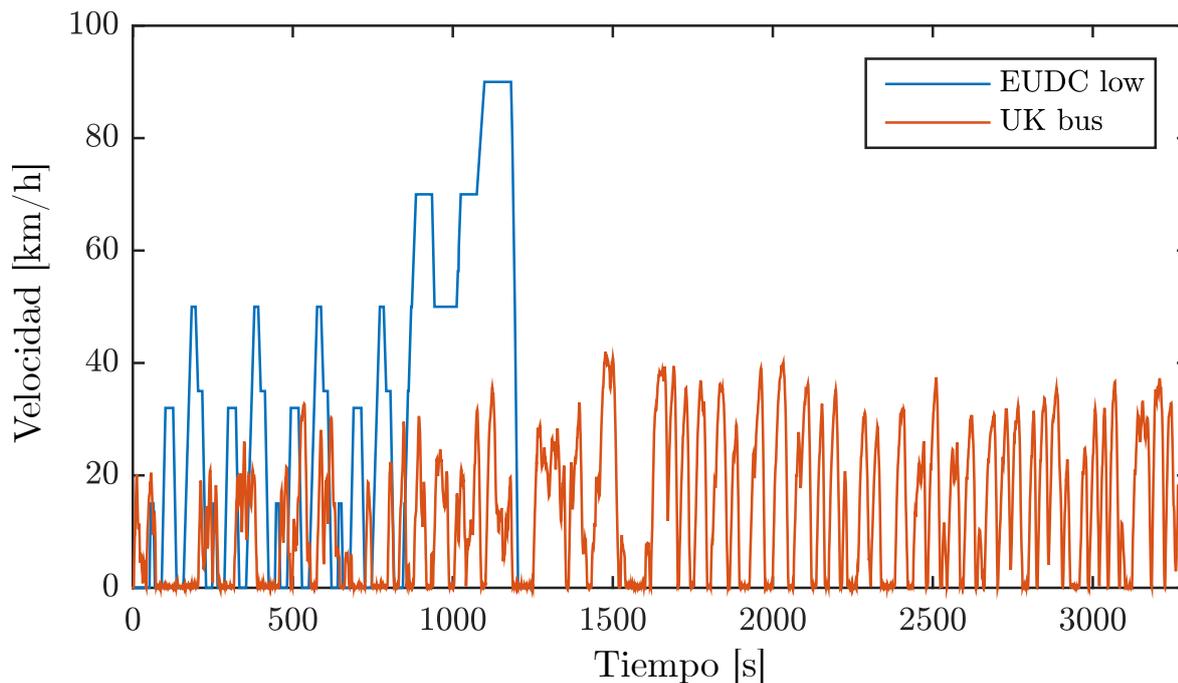


Figura 4.6: Ciclos de manejo.

ja. El ciclo EUDC_{low} tiene una velocidad máxima alta y varios arranques y paradas debida a las características de un ciclo mixto de conducción urbana y extra urbana.

Los dos ciclos de conducción y todos los autobuses se estudiaron en 4 autonomías diferentes, 100 km, 200 km, 300 km y 400 km, para analizar cómo afecta el rango en el rendimiento de los vehículos.

4.1.3. Índices relevantes

Para comparar el comportamiento de los cuatro vehículos estudiados, se seleccionaron indicadores de diferente naturaleza, debido a su importancia en el rendimiento multifísico (energético y ambiental) de estos vehículos, para los dos ciclos de conducción descritos anteriormente en las cuatro autonomías estudiadas. Los índices propuestos están listados en la tabla 4.6.

Tabla 4.6: Indices relevantes.

Índice	Tiene en cuenta
1. TEE: Eficiencia energética total	Eficiencia en la conversión de energía
2. FE: Economía energética [km/(kWh)]	Eficiencia del vehículo y su vector energético para cubrir distancias
3. VGE: Densidad gravimétrica de energía del vehículo [kWh/kg]	Energía acumulada por kg del tren de potencia
4. EI: Índice de emisión	Medioambiente
5. CT: Tiempo de carga [min/km]	Tiempo de repostaje por km recorrido

4.1.3.1. Eficiencia energética (TEE)

Se pueden calcular tres eficiencias energéticas diferentes, la eficiencia del pozo al tanque (WTT), la eficiencia del tanque a la rueda (TTW) y la eficiencia del pozo a la rueda (WTW). La eficiencia energética de WTT es la energía del vector energético producido dividida por la energía consumida durante su producción, transporte y distribución. La eficiencia energética TTW calcula la relación entre la energía necesaria para mover el vehículo (energía de la rueda) y la cantidad de energía suministrada al vehículo como vectores energético. La eficiencia de WTW es la relación entre la energía necesaria para mover el vehículo y la energía consumida durante la producción, transporte y distribución de los vectores energéticos, es decir, la energía suministrada al vehículo dividida por la eficiencia WTT. En las ecuaciones 4.5 a 4.7 se desarrolla la formulación teniendo en cuenta que los vehículos se alimentan, como máximo, de dos vectores de energía.

$$\eta_{WTT_i} = \frac{En_i}{\sum_j En_{gen_{ji}}} \quad (4.5)$$

$$\eta_{TTW_k} = \frac{En_{wheel_k}}{\sum_i En_i} \quad (4.6)$$

$$\eta_{WTW_k} = \frac{En_{wheel_k}}{\sum_i \sum_j gen_{ji}} = \frac{En_{wheel_k}}{\sum_i \frac{En_i}{\eta_{WTT_i}}} \quad (4.7)$$

donde:

- η_{WTT_i} Eficiencia de la generación del vector energético i
- η_{TTW_k} Eficiencia del tanque a la rueda del bus k
- η_{WTW_k} Eficiencia del pozo a la rueda del bus k
- En_i Energía del vector i utilizada
- $En_{gen_{ji}}$ Energía de la fuente primaria j utilizada para generar el vector i
- En_{wheel_k} Energía necesaria en la rueda para mover el bus k

Además:

- i: itera sobre los vectores energéticos.
- j: itera sobre las fuentes de energía primaria.
- k: itera sobre los trenes de potencia.

4.1.3.2. Eficiencia del consumo (FE)

La eficiencia del consumo (Fuel Economy o FE) mide la relación entre la distancia recorrida y la energía total consumida. Es la inversa del consumo de combustible

pero expresado en energía. Además la energía considerada es aquella utilizada para producir, transportar y distribuir los vectores energéticos que luego fueran usados por los buses. No solo mide qué tan buena es la conversión de energía, sino que también tiene en cuenta el propósito del sistema, que es cubrir la mayor distancia posible con el menor gasto de energía.

En el paso TTW, se obtiene la energía necesaria de cada vector simulando los trenes motrices y luego se calcula el costo energético para obtener el vector en el paso WTT.

4.1.3.3. Densidad gravimétrica de energía del vehículo (VGE)

La eficiencia gravimétrica del vehículo se utiliza para medir qué capacidad tiene la tecnología de almacenamiento y del tren de potencia para almacenar energía en función del peso de los sistemas. La energía del diésel y del hidrógeno almacenado se calcula considerando su poder calorífico inferior [MJ/kg].

4.1.3.4. Índice de emisión (EI)

Para tener en cuenta los aspectos medioambientales, se han evaluado las emisiones de contaminantes asociadas tanto al paso del proceso de producción (WTT) como también a la utilización final del combustible (TTW). Las emisiones de WTT en la extracción, el procesamiento químico y el transporte de energía se calcularon utilizando el software Greet y las emisiones de TTW con los modelos del grupo de trabajo y los modelos de ADVISOR. El índice de emisión (Emission Index o EI) se obtiene siguiendo el trabajo de Hacetoglu et al. [110] y se definen como:

$$EI = \beta_{NOx} W_{EI_{NOx}} + \beta_{CO} W_{EI_{CO}} \quad (4.8)$$

$$W_{EI_{NOx}} = W_{EI_{CO}} = \frac{1}{2} \quad (4.9)$$

$$\beta_x = \frac{A_{x,st}}{A_x} \quad (4.10)$$

donde β_x es el índice de emisión para el contaminante x , W_{EI_x} es el peso asignado al contaminante x , $A_{x,st}$ es el estándar de calidad ambiental para cada contaminante (EPA, 2011), y A_x representa la concentración de gas emitido por los buses y la generación de vectores, y se calcula como:

$$A_x = \phi_x \tau_x \quad (4.11)$$

donde ϕ_x es el tiempo de residencia del contaminante, y τ_x es la cantidad de gas emitido por kilometro recorrido. La agencia de protección ambiental de EE.UU. (EPA) brinda valores de referencia en cuanto al nivel de contaminantes aceptable y su tiempo de residencia [111]. Se consideraron dos contaminantes a saber, NOx y CO, para los cuales los valores de referencia se muestran en la tabla 4.7.

Tabla 4.7: Parámetros del índice de emisión.

	τ_x [h]	$A_{x,st}$ [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]
NOx	24	100
CO	840	10000

4.1.3.5. Tiempo de carga (CT)

Otra característica importante para hacer una comparación correcta entre los sistemas de movilidad es el tiempo de recarga de los sistemas de almacenamiento, de acuerdo con su autonomía. En general, este factor es la barrera clave que reduce el atractivo de la movilidad eléctrica en muchos casos. La ansiedad por la autonomía (range anxiety) es un concepto relativamente nuevo [112] relacionado con la idea de la insuficiencia de los vehículos eléctricos para cubrir las distancias diarias de viaje, y señala uno de los problemas que los fabricantes de vehículos eléctricos deben superar para competir con los vehículos de gasolina y diésel [113].

Los vehículos híbridos ofrecen una autonomía que es en general similar al de los autobuses diésel y el híbrido paralelo utilizado en el trabajo presentado por Mahmoud et al. [114] proporciona un alcance eléctrico adicional de 10 km. Con tanques de almacenamiento de H₂ a presión de 350 bar el FCHEV proporciona una autonomía eléctrica similar a la del bus diésel [115]. Los FCHEV se ven menos afectados que los BEV, ya que el tiempo de carga es ligeramente superior al del DV, con tasas de reabastecimiento que van desde 0,9 kg/min [116] a 5 kg/min [117]. Se adoptó el límite superior de 5 kg/min, siguiendo la experiencia de BC Transit en Whistler, Canadá [117]. Por otro lado, los BEV tienen diferentes alternativas para cargar la batería, por ejemplo, carga de oportunidad, carril de carga y estación final de carga. La selección del sistema de carga depende de numerosos factores, como la longitud de las rutas, la duración del turno de los conductores, el tamaño de la flota de autobuses, la frecuencia de servicio, la longitud de circulación, la velocidad de operación promedio, las horas de operación, etc. [118, 119]. Muchos estudios proponen diferentes aplicaciones para realizar varias carga rápida [120], en este trabajo se asume un enfoque conservador y se selecciona la estación de carga final. Independientemente del tamaño de la batería, el tiempo de carga permanece constante y se adopta

Tabla 4.8: Pesos ponderados para el índice II.

Ij	TEE	FE	VGE	EI	CT
Wj	0,3	0,3	0,1	0,2	0,1

una carga lenta para conservar la batería, lo que lleva a una carga de 6 horas para el BEV. Para el DV y el HEV se adoptaron flujos de carga de 70 l/min.

El índice de tiempo de carga se expresa en minutos por km, lo que nos permite comparar diferentes autonomías para cada autobús. Se agregaron 2 minutos en cada carga para tener en cuenta las maniobras de carga.

4.1.4. Integración de los índices

En la búsqueda de un índice único que permita un análisis comparativo simple de la sostenibilidad energética y ambiental de los diferentes autobuses, se propone un Índice Integrado (II) (Hacatoglu et al. [110]). El II considera los factores de ponderación apropiados para aquellos índices relevantes con valores normalizados que van de cero a uno, donde uno es la mejor evaluación posible para los autobuses. Para normalizar los índices en este rango, los índices evaluados en cada escenario de cada país se dividieron por los mejores índices logrados en dicho país y escenario, es decir, el CT más bajo y el FE, TEE, EI y VGE más altos. De este modo, un índice con un valor de uno es el mejor rendimiento posible para ese país en ese escenario. El valor del índice Ij se multiplica por un factor de ponderación Wj (ver tabla 4.8). El II del sistema se obtiene como la suma de estos valores.

4.2. Resultados

En esta sección se presentan los resultados del análisis WTW en forma de gráficos araña. Si bien se cuenta con información de todas las autonomías propuestas, en los gráficos solo se mostrarán el desempeño en cada uno de los índices propuestos para las autonomías más bajas y más altas (100 km y 400 km) para poder apreciar la información de mejor manera. La normalización propuesta en la sección 4.1.4 se utiliza en los índices obtenidos para facilitar la comparación entre ellos.

4.2.1. Escenario 2017

El escenario actual se analizará en mayor profundidad distinguiendo el desempeño de los trenes de potencia en cada una de las etapas (WTT, TTW y WTW), para ello se examinan las figuras 4.7, 4.8, 4.9 y 4.10, que muestran los resultados TTW normalizados, las eficiencias (TEE y FE) y las emisiones (CO y NO_x), respectivamente, para cada una de las configuraciones de bus y para los rangos de 100 y 400 km de cada ciclo.

En las figuras 4.7, 4.8, 4.9 y 4.10, del lado izquierdo se muestran el ciclo EUDC con 100 km de autonomía en la parte superior y 400 km en la parte inferior; la parte derecha del gráfico muestra los resultados para el ciclo UK, con 100 km en la parte superior y 400 en la parte inferior. Para este análisis detallado solo se evalúan los índices de eficiencia y emisiones, ya que CT y VGE son características específicas del vehículo.

La figura 4.7 muestra el comportamiento de la eficiencia TEE para el ciclo EUDC con un rango de 100 km en el escenario de 2017, donde, en general, los autobuses con ICE tienen un rendimiento superior para la etapa WTT. Por otro lado los autobuses de motor eléctrico tienen un rendimiento marcadamente mejor para el TTW. En el caso de FCHEV, tiene un rendimiento medio para ambas etapas WTT y TTW. En el análisis de TEE para el ciclo WTW completo, el BEV y HEV muestran los mejores comportamientos. Cuando el rango se lleva a 400 km y se pueden ver que los índices no varían con respecto a los del EUDC100.

El cuadrante superior derecho de la figura 4.7 muestra el ciclo UK para 100 km de autonomía, donde se puede observar una notable disminución en la eficiencia de todos los buses que utilizan ICE. Este comportamiento se debe a que el ciclo UK tiene más paradas que el ciclo EUDC, por lo tanto, suceden tres cosas:

- Los motores ICE funcionan durante más tiempo en ralenti y a bajas revoluciones, y por lo tanto a menores eficiencias.
- El aumento de paradas y frenados disminuye el rendimiento de todos los trenes de potencia.
- Debido al frenado regenerativo, el rendimiento de los sistemas con motores eléctricos aumenta con respecto a los otros sistemas.

Aumentando el rango a 400 km en el cuadrante inferior se pueden ver comportamientos similares al UK100.

La eficiencia del consumo (FE) se desagrega en las etapas TTW y WTW, ya que al ser un índice que evalúa en base al uso final del combustible (km realizados por

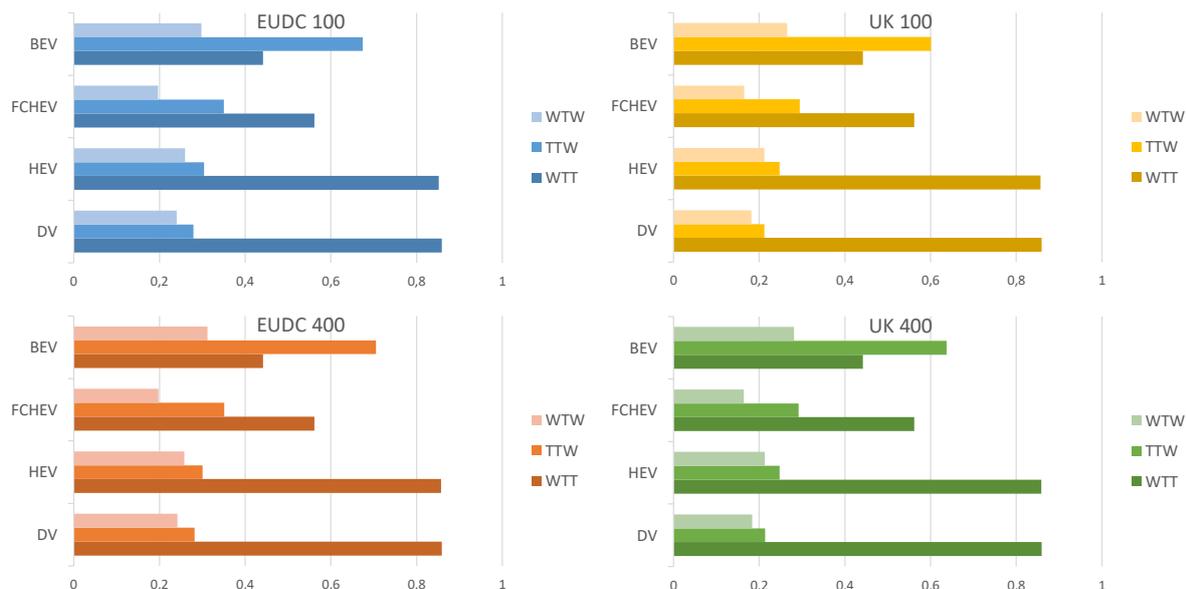


Figura 4.7: Eficiencia total (TEE) en el escenario 2017.

unidad de energía) no tiene sentido estudiarlo en una etapa en la cual todavía no se realiza el uso final (WTT). En la figura 4.8 se puede apreciar un comportamiento particular del sistema BEV: los kilómetros realizados por unidad de energía dependen en gran medida del rango para el BEV, mientras que para los DV y HEV la dependencia es nula, y para el FCHEV es menos marcada. Esto se debe a que para mayores autonomías los BEV y los FCHEV deben aumentar el peso de sus componentes, en menor medida para este último, lo cual conlleva a aumentar el gasto energético por km. Así mismo como en el análisis de la TEE, se ve una marcada superioridad de los vehículos eléctricos en la etapa WTW.

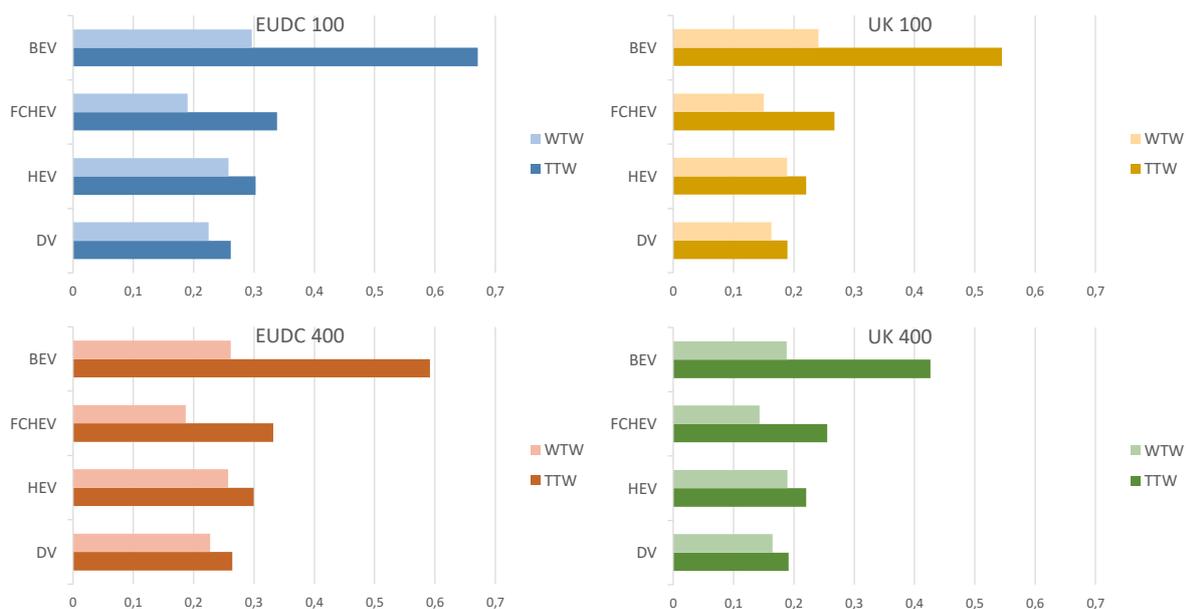


Figura 4.8: Resultados de eficiencia del consumo para las etapas TTW y WTT.

La figura 4.9 muestra cómo las emisiones relacionadas con la generación de electricidad e hidrógeno (WTT) hacen que el rendimiento de las emisiones de CO totales sean peores en los vehículos que tienen poca o ninguna emisión. Las emisiones de NOx representadas en la figura 4.10 muestran el efecto contrario, en el que las altas emisiones de ICE superan los beneficios potenciales de las bajas emisiones durante la producción del vector de energía (WTT).

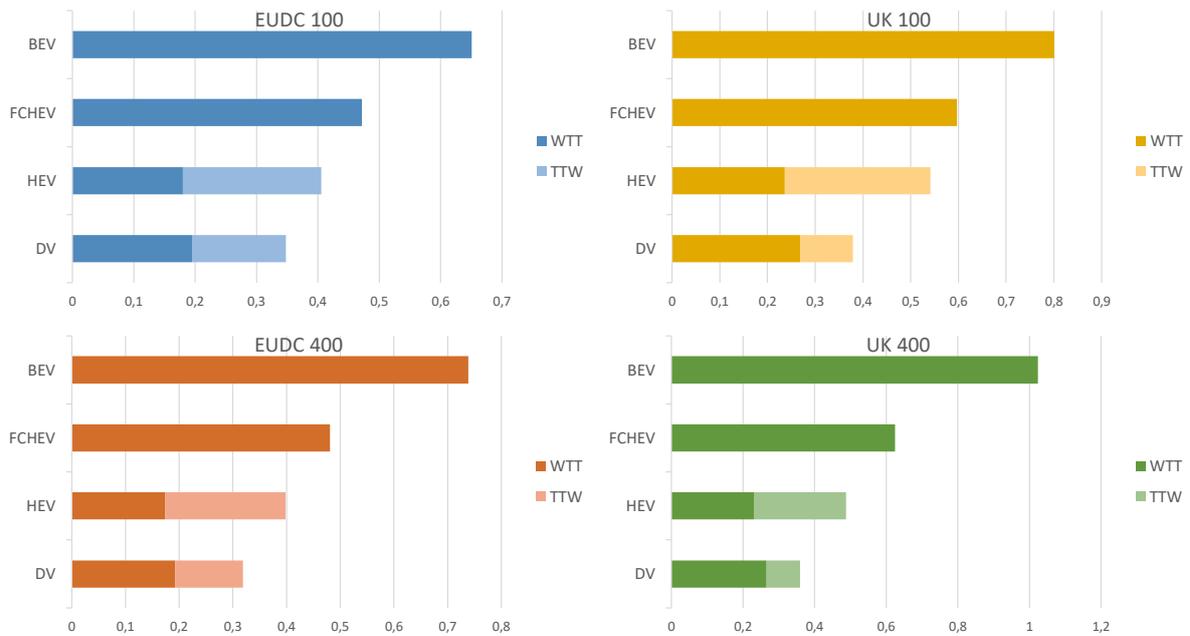


Figura 4.9: Resultado de emisiones de CO en la etapa WTT.

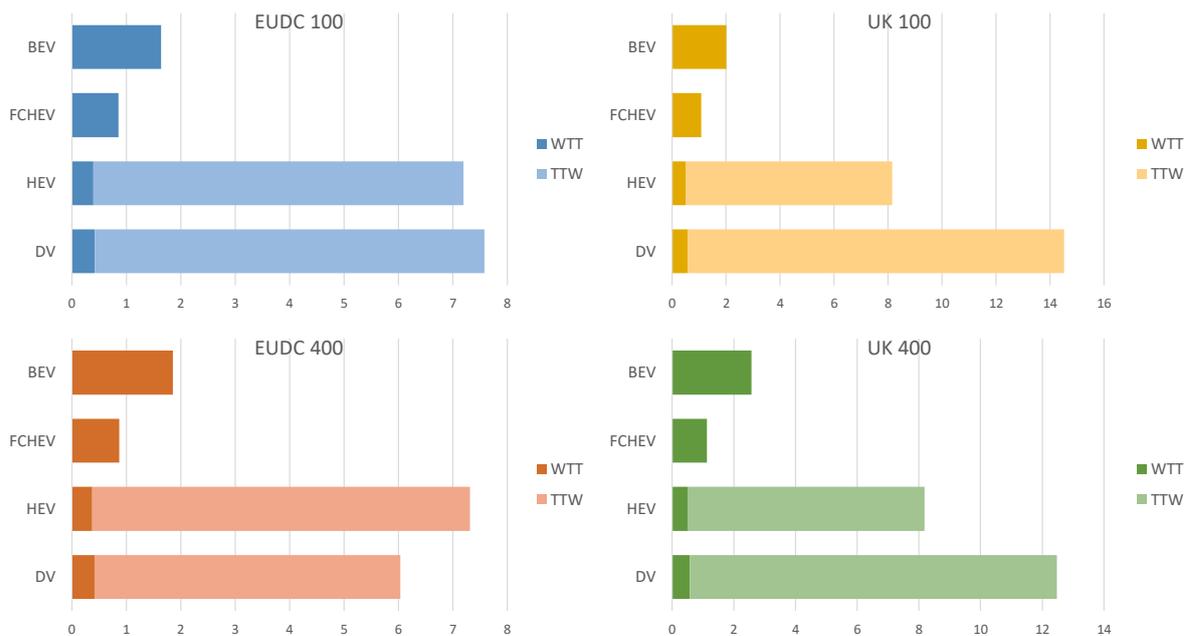


Figura 4.10: Resultado de emisiones de NOx en la etapa WTT.

La figura 4.11 muestra los resultados de los índices obtenidos para los diferentes buses, en los dos ciclos de manejos en los extremos de las autonomías (100 km y 400 km) y en el escenario 2017. Los índices normalizados entre 0 y 1 de acuerdo a lo planteado en la sección 4.1.4 se presentan en forma de gráfico de araña, donde el valor 1 es el mejor desempeño posible en el índice.

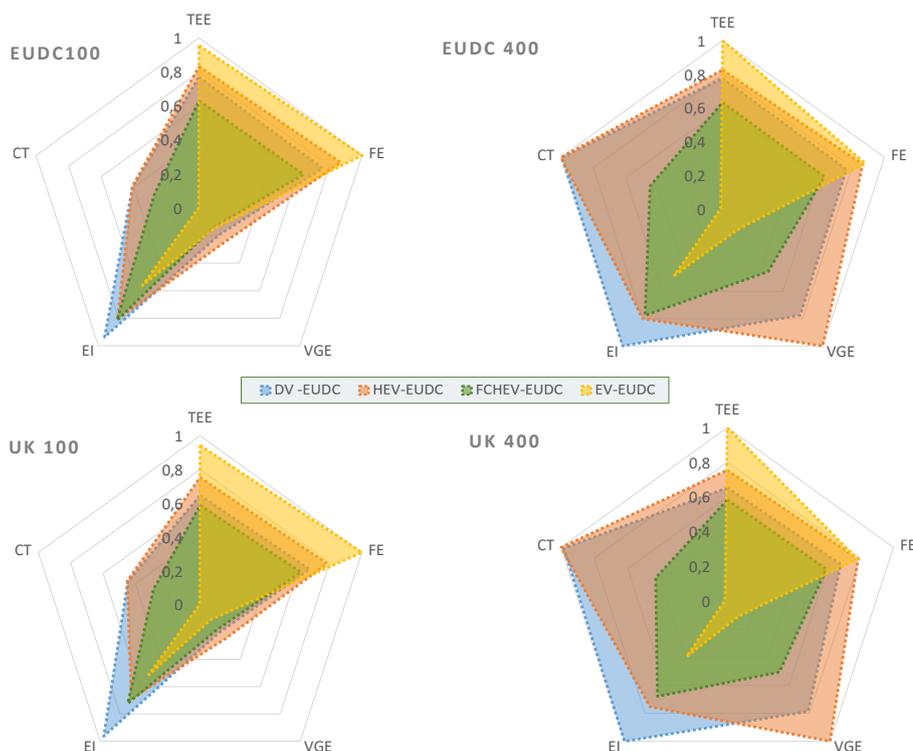


Figura 4.11: Gráficos de araña para el escenario de Argentina 2017.

Como podemos ver en la figura 4.11 para distancias cortas (100 km), el BEV y el FCHEV parecen ser capaces de competir con el DV y el HEV. En distancias largas (400 km), los vehículos con ICE ofrecen ventajas comparativas significativas con respecto al BEV y un poco menos con respecto al FCHEV en varios índices: CT y VGE especialmente. Los ZEV se vuelven muy poco competitivos porque, en comparación con los demás, los índices CT y VGE son muy bajos y el índice EI también es más bajo, pero en menor medida. El FCHEV, en comparación con los BEV, mejora sustancialmente en los rangos largos, debido a que el aumento en el rango lleva a un aumento en el peso en los sistemas de almacenamiento, que es mucho mayor en los sistemas de batería que en el FCS. Esto afecta al VGE y al FE. Por otro lado, al comparar ciclos, se puede ver que los BEV parecen mejorar considerablemente en comparación con los otros vehículos para el ciclo UK. Esto se debe a que el rendimiento de los motores eléctricos permanece casi invariable en una amplia gama de

RPM a las que opera el motor. Además, en el ICE hay un cambio sustancial en la eficiencia de los motores en todos los rangos de RPM. Adicionalmente, la energía recuperada por el sistema de frenado regenerativo en el ciclo UK, donde hay muchas paradas, genera un aumento en la eficiencia energética que tiene un impacto en la mejora del rendimiento de ZEV.

4.2.2. Escenario 2030

Para el escenario Argentina 2030 (figura 4.12), como en el escenario 2017, para ciclos cortos (rango de 100 km) el BEV y el FCHEV parecen competir en igualdad de condiciones con los autobuses ICE, aunque tienen un índice CT más bajo (en particular, el BEV) pero mejoran notablemente en el índice de EI con respecto al escenario de 2017, incluso hasta el punto de exceder el rendimiento de los vehículos con ICE. Para ciclos largos, el BEV reduce sustancialmente su rendimiento (bajan casi todos sus índices), pero en comparación con el 2017, el FCHEV parece competir en igualdad de condiciones con el DV y el HEV para ambos rangos. Para los diferentes ciclos, en este caso podemos ver que, como en el escenario de 2017, el DV disminuye en el índice FE más que los otros vehículos.

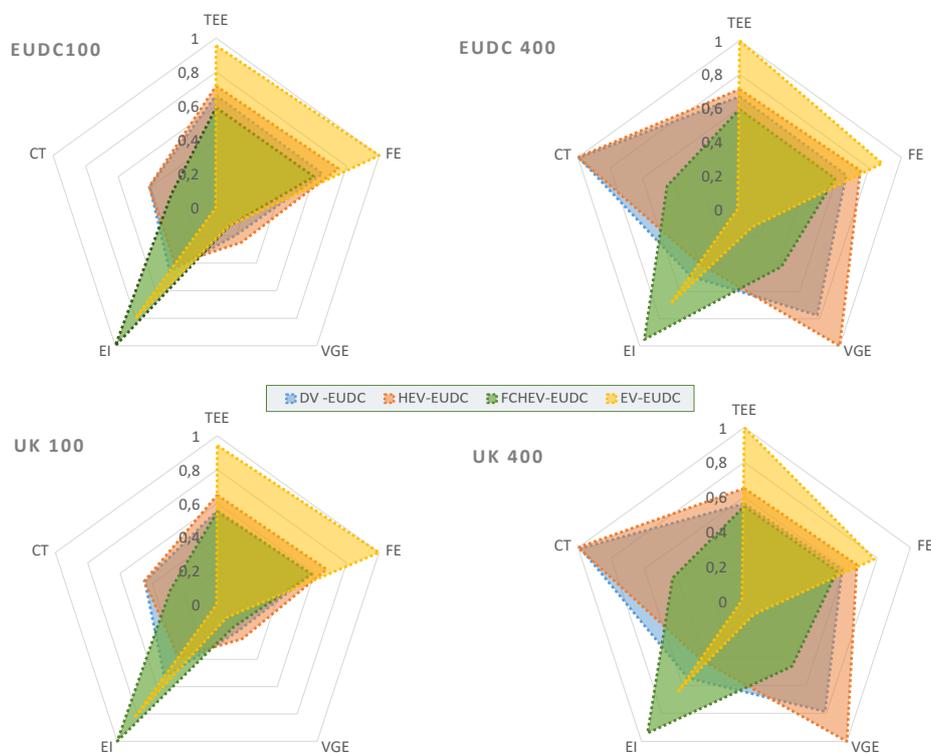


Figura 4.12: Gráficos de araña para el escenario de Argentina 2030.

4.3. Extensión del estudio a Brasil y Chile

Para comprender cuál es la influencia de la ruta de la energía y como los diferentes escenarios energético afectan el desempeño actual y futuro de los vehículos de pasajeros urbanos se propuso extender el estudio hecho para Argentina a los países vecinos Brasil y Chile, siguiendo el mismo método propuesto anteriormente.

4.3.1. Brasil WTT

4.3.1.1. Mix eléctrico

Debido a la diversidad de recursos disponibles, Brasil tiene diferentes tipos de centrales eléctricas, siendo la hidroeléctrica la predominante, como se muestra en la figura 4.13. La combinación de electricidad se tomó de los datos publicados por el Ministerio de Minas y Energía [121], y el escenario futuro se tomó de Sánchez Moore et al. [122]. En el escenario futuro, la energía eólica parece ser la fuente priorizada para complementar el uso de la energía hidroeléctrica [123].

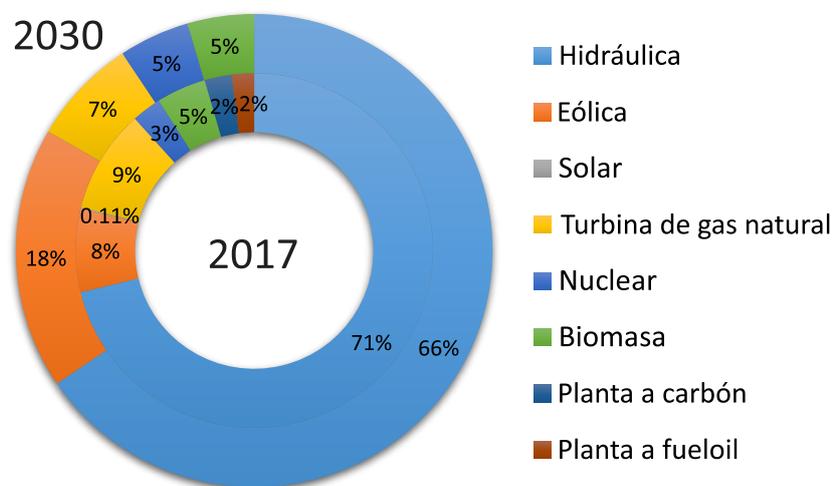


Figura 4.13: Matriz eléctrica de Brasil.

4.3.1.2. Producción y distribución de diésel

Según la ley brasileña 13.263 [124], el diésel que se vende actualmente es una mezcla con 9% de biodiésel que se produce principalmente a partir de la soja y el sebo [125]. Nuevamente, como en el caso Argentino, en el escenario futuro de Brasil se propone un corte con 20% de mezcla de biodiésel.

4.3.1.3. Producción y distribución de Hidrógeno

Como en el caso de Argentina, en Brasil casi toda la producción de hidrógeno (920000 toneladas por año) es cautiva y es consumida principalmente por las industrias de refinерías de petróleo y fertilizantes. Según Hotza y Costa [126] Brasil tiene gran capacidad para obtener hidrógeno, debido a la diversidad de materias primas para la generación de energía renovable. Para el escenario actual y futuro se proponen las mismas condiciones que para Argentina.

4.3.2. Chile WTT

4.3.2.1. Mix eléctrico

La combinación de electricidad estudiada corresponde al Sector Interconectado Central (SIC), que representa el 78 % de la capacidad total de generación eléctrica y se desarrolló utilizando los datos del sitio web "Iniciativa de Energía Abierta" de la Comisión Nacional de Energía [127]. En Chile, más del 70 % de sus fuentes de energía primarias se importan [128] porque el país no tiene recursos significativos de petróleo, gas o carbón, por lo que la única alternativa doméstica es la energía hidroeléctrica y otras fuentes de energía renovable [129]. La sostenibilidad ambiental del suministro de electricidad en Chile ha empeorado en los últimos 10 años [130]. En 2017, 312 centrales eléctricas operaban en Chile, con la siguiente contribución en el mix de electricidad: tecnologías de combustible fósil 57 %, hidroelectricidad 29 %, energía solar 6 %, energía eólica 6 % y biomasa 2 % (ver figura 4.14). El escenario futuro fue concebido considerando el trabajo de Gómez et. al. [128]. Este escenario se modeló utilizando una combinación entre el mercado y los escenarios de políticas de energía renovable no convencionales propuestos.

4.3.2.2. Producción y distribución de diésel

Aunque existe una ley en el país que propone una corte con 5 % de biodiésel, no es de carácter obligatorio [131]. En virtud de ello, en los escenarios presentes y futuros se consideró el modelo GREET para diésel de Chile, sin ninguna mezcla de biodiésel.

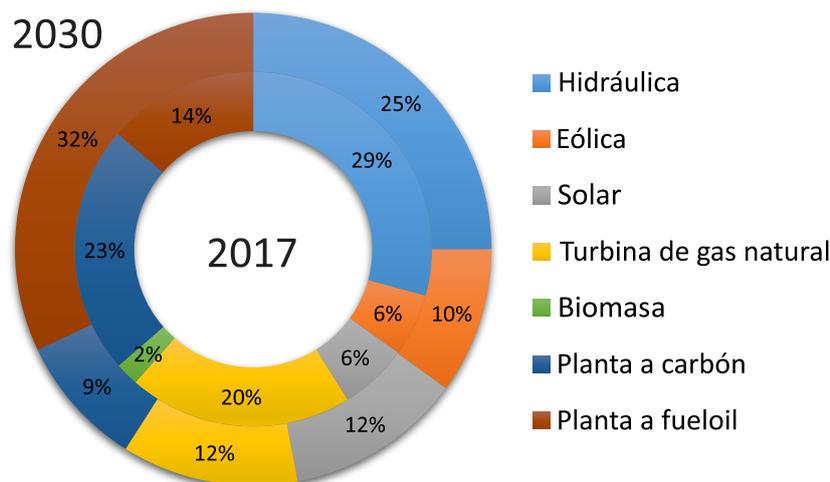


Figura 4.14: Matriz eléctrica de Chile.

4.3.2.3. Producción y distribución de hidrógeno

En Chile, los costos cada vez más bajos de los renovables, donde los costos de electricidad son de alrededor de \$30/MWh, también podrían ser competitivos en la producción de hidrógeno basada en energías renovables [132]. Para el escenario actual y futuro se proponen las mismas condiciones que para Argentina.

4.3.3. Resultados Brasil 2017

Como se puede ver en la Figura 4.15, en el escenario Brasil 2017, debido al alto porcentaje de hidroelectricidad, BEV y FCHEV (en menor medida), tienen un gran rendimiento en casi todos sus índices, excepto en el CT para el caso del BEV. Sin embargo, para los rangos largos (400 km) los EV se vuelven mucho menos competitivos, ya que no solo el CT es muy bajo, sino que también el VGE es considerablemente más bajo. En el BEV, el EI también disminuye por debajo de los niveles del DV. En contraste, el FCHEV tiene un rendimiento ligeramente menor que el DV y el HEV en los índices CT y VGE para todos los rangos.

4.3.4. Resultados Brasil 2030

Dado que el índice CT no se modificó para escenarios futuros, no es posible modelar futuras innovaciones tecnológicas que probablemente ocurran, teniendo en cuenta el inmenso interés puesto en la búsqueda de nuevos materiales para el desarrollo de electrodos tendientes a mejorar el rendimiento de las LIBs. En el escenario 2030 (ver figura 4.16), el BEV también tiene un gran rendimiento en general, pero

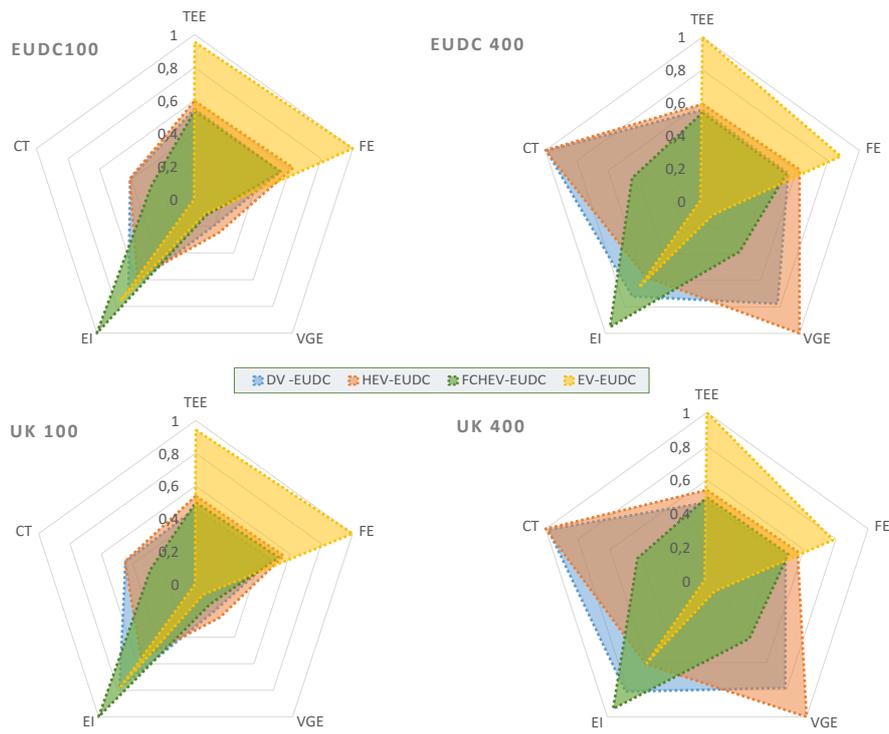


Figura 4.15: Gráficos de araña para el escenario de Brasil 2017.

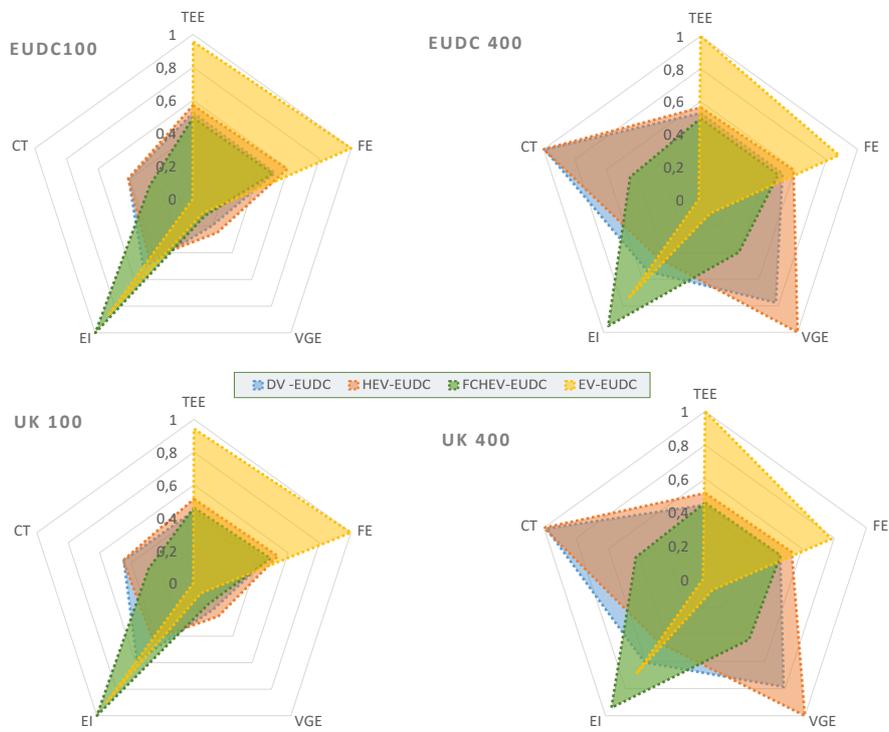


Figura 4.16: Gráficos de araña para el escenario de Brasil 2030.

no en el índice CT, que sigue siendo mucho más bajo que en los otros vehículos. Por otro lado, el FCHEV tiene rendimientos similares a los dos vehículos con ICE, excepto que tiene un índice de EI mucho mejor. Los vehículos ICE mantienen su ventaja en VGE y CT en todos los rangos y ciclos. Para distancias largas, los vehículos ICE no disminuyen su FE como lo hace el BEV, pero aún tienen un rendimiento peor que el BEV.

4.3.5. Resultados Chile 2017

Como se puede ver en la Figura 4.17, en este escenario parece haber una gran paridad en el rendimiento de las cuatro configuraciones del tren de potencia para distancias cortas (100 km). Sin embargo, el BEV tiene, como en el caso de Argentina y Brasil, un índice de CT bajo, pero a diferencia de Argentina, el índice EI es competitivo debido a su combinación eléctrica (consultar el mix de electricidad de Chile en la Figura 4.14). Por el contrario, para distancias largas, los vehículos ICE tienen una clara ventaja sobre el BEV debido al aumento de peso de los propulsores. El FCHEV tiene un rendimiento mucho mejor que el BEV, aunque es peor que el DV y el HEV.

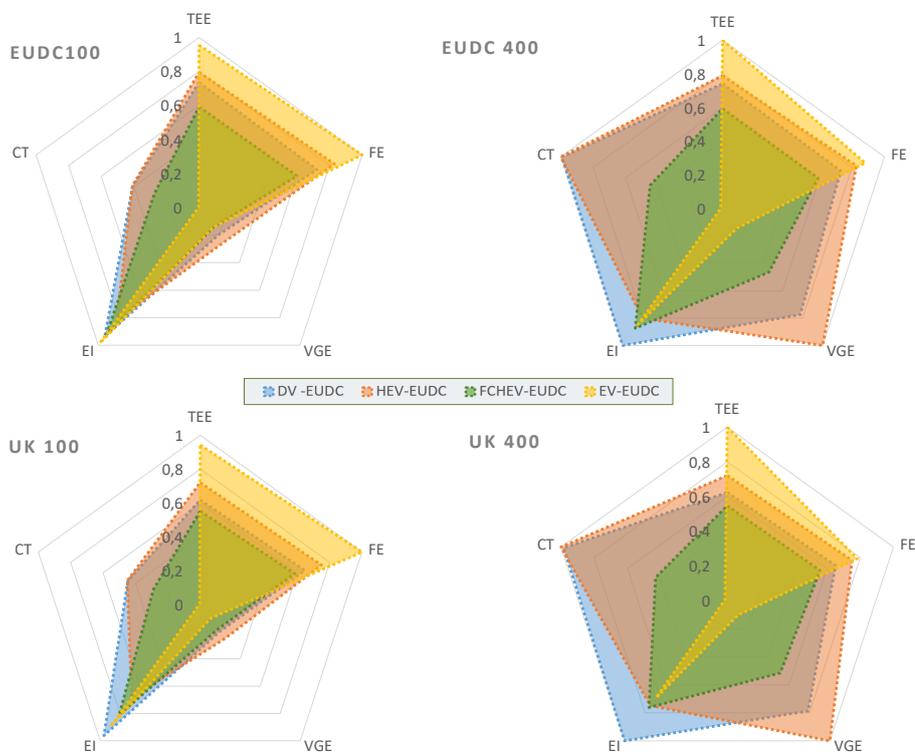


Figura 4.17: Gráficos de araña para el escenario de Chile 2017.

4.3.6. Resultados Chile 2030

Para el escenario Chile 2030 (Figura 4.18), el FCHEV tiene una alta EI (como el BEV), aunque en los otros índices es similar al de DV y HEV. El BEV mantiene el peor desempeño en el índice CT. Para rangos largos nuevamente, como en el escenario de 2017, el BEV tiene índices altos de EI, TEE y FE, aunque índices muy bajos de VGE y TC. El FCHEV tiene altos índices de EI, TEE y FE. En comparación con el BEV, el FCHEV tiene un rendimiento mucho mejor para el VGE y el CT.

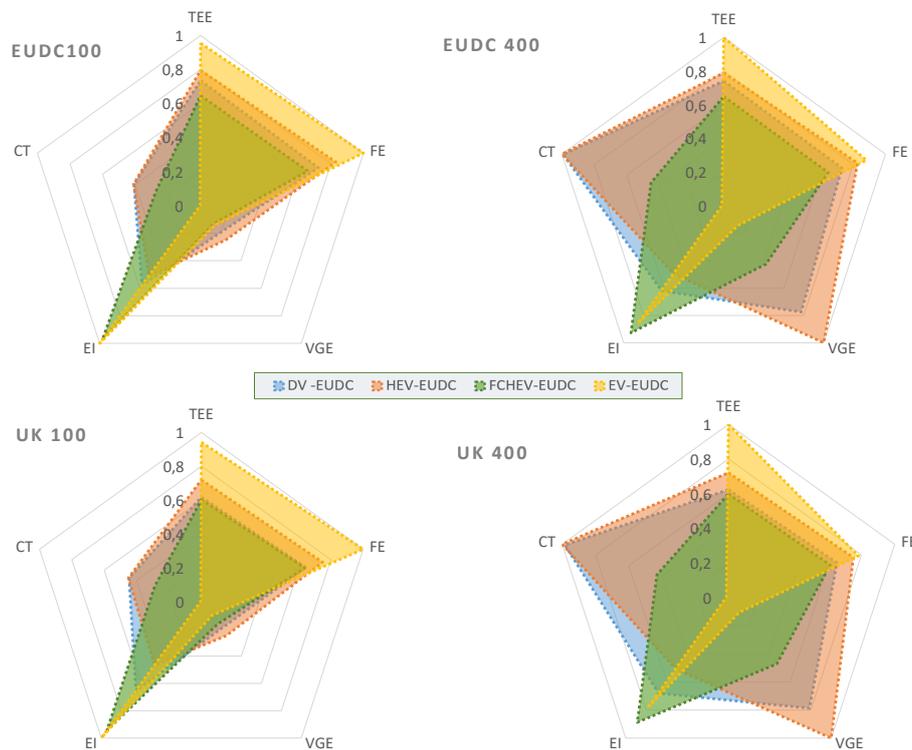


Figura 4.18: Gráficos de araña para el escenario de Chile 2030.

4.4. Discusión

Como regla general, enfatizamos que para el tren de potencia BEV, los índices TEE y FE son siempre más grandes que para todos los demás trenes considerados, independientemente del rango, tipo de ciclo, año o país, lo que significa que la conversión de energía de este tipo de tren de potencia es la más eficiente. Una excepción ocurre en Argentina para ambos ciclos en el rango más largo, donde la FE en BEV es casi igual que en los HEV, mientras que en los demás trenes de potencia la FE es

más baja. Eso significa que los trenes de potencia del BEV pueden cubrir distancias más eficientemente. En general, las matrices eléctricas que dependen en gran medida de los combustibles fósiles, como Argentina y Chile en 2017, el DV y el HEV tienen mejores índices de EI que los vehículos eléctricos. Esto se debe al hecho de que la generación eléctrica es principalmente de origen fósil (alrededor de 60 %), con tecnologías de conversión que pueden mejorarse notablemente, como la conversión de un solo ciclo a un ciclo combinado en centrales de gas natural. Adicionalmente, las pérdidas de potencia por transmisión y distribución oscilan entre 15,78 % y 6,54 %. En el caso de Argentina, mucho más que para los demás países, el cambio de un escenario a otro genera un impacto importante en sus índices II que favorecen la movilidad eléctrica en el escenario futuro (consulte la Figura 4.19). En 2017 se puede ver que los vehículos ICE son mejores para ambos ciclos y para todos los rangos. Por otro lado, en 2030 para rangos cortos, se prefieren los BEV. Para rangos largos, los FCHEV son claramente dominantes, principalmente debido al bajo rendimiento del BEV en los índices VGE y CT. Como se puede ver en la Figura 4.20, en Brasil debido a su mezcla eléctrica predominantemente no fósil, BEV y FCHEV, en menor medida, tienen mejores índices II para viajes cortos en el escenario de 2017. Para rangos largos (400 km), el BEV disminuye considerablemente su rendimiento, mucho más en el ciclo de conducción UK-BUS, por otro lado, el DV tiene sus mejores índices en ese rango. En el escenario 2030, los BEV dominan en todos los rangos para el ciclo EUDC y para el ciclo UK hasta 300 km de rango, para rangos más altos, el FCHEV y el BEV obtienen el mismo índice. En el caso de Chile (Figura 4.21), los resultados del II son más similares al caso argentino que al brasileño, especialmente para el escenario actual (2017). La diferencia sustancial es que, para rangos cortos y en ambos ciclos, el BEV obtiene los mejores resultados. En contraste, para rangos largos, los trenes motrices de ICE dominan (DV y HEV). Por otro lado, para escenarios futuros (2030), hasta 300 km de alcance el BEV domina claramente, seguido de cerca por el FCHEV. Para rangos superiores a 400 km, el HEV para el ciclo EUDC y el DV para el ciclo UK tienen los mejores resultados. Para el ciclo EUDC el resultado del II es mucho más uniforme para las cuatro configuraciones de bus. Este resultado en el escenario 2030 se debe principalmente a la introducción de ER en la matriz eléctrica.

4.5. Conclusión

El FCHEV y el BEV son vehículos de emisión cero (ZEV) y consumo cero de energía fósil directa durante su operación, siendo la tecnología BEV la alternativa

	II EUDC				II UK			
Aut.	DV	HEV	FCHEV	BEV	DV	HEV	FCHEV	BEV
II ARGENTINA 2017								
100km	0.76	0.77	0.64	0.69	0.73	0.70	0.60	0.67
200km	0.82	0.81	0.64	0.66	0.79	0.76	0.61	0.63
300km	0.86	0.85	0.65	0.64	0.82	0.79	0.60	0.58
400km	0.88	0.87	0.65	0.60	0.84	0.81	0.60	0.53
II ARGENTINA 2030								
100km	0.55	0.58	0.68	0.77	0.54	0.54	0.67	0.78
200km	0.60	0.62	0.68	0.74	0.59	0.59	0.68	0.73
300km	0.63	0.65	0.69	0.71	0.62	0.62	0.67	0.67
400km	0.66	0.67	0.69	0.67	0.64	0.64	0.66	0.61

Figura 4.19: Índice Integrado para Argentina en los escenarios 2017 & 2030, para todos los ciclos y todas las autonomías.

	II EUDC				II UK			
Aut.	DV	HEV	FCHEV	BEV	DV	HEV	FCHEV	BEV
II BRASIL 2017								
100km	0.56	0.58	0.65	0.75	0.58	0.54	0.65	0.76
200km	0.62	0.62	0.65	0.73	0.63	0.60	0.65	0.71
300km	0.66	0.65	0.66	0.70	0.66	0.63	0.65	0.66
400km	0.68	0.67	0.66	0.66	0.68	0.65	0.64	0.60
II BRASIL 2030								
100km	0.50	0.51	0.63	0.79	0.50	0.48	0.63	0.80
200km	0.55	0.56	0.63	0.76	0.55	0.54	0.63	0.75
300km	0.58	0.59	0.64	0.73	0.58	0.57	0.63	0.69
400km	0.61	0.61	0.64	0.69	0.60	0.59	0.62	0.62

Figura 4.20: Índice Integrado para Brasil en los escenarios 2017 & 2030, para todos los ciclos y todas las autonomías.

más eficiente en la etapa TTW para todos los países y para la mayoría de los escenarios estudiados. Esto se debe a que una vez que la energía se almacena a bordo del BEV, solo necesita transformar la energía electroquímica en energía cinética mediante los motores eléctricos que tienen una alta eficiencia. Debido a que los BEV son notablemente superiores en el TTW, las acciones para mejorar su rendimiento energético y ambiental deberían centrarse en cómo generar electricidad, con qué combinación eléctrica y con qué tecnologías. Aunque el FCHEV también usa mo-

	II EUDC				II UK			
Aut.	DV	HEV	FCHEV	BEV	DV	HEV	FCHEV	BEV
	II CHILE 2017							
100km	0.74	0.76	0.65	0.83	0.72	0.68	0.61	0.80
200km	0.80	0.80	0.66	0.80	0.77	0.74	0.62	0.75
300km	0.84	0.83	0.66	0.77	0.80	0.77	0.61	0.69
400km	0.86	0.85	0.66	0.72	0.82	0.79	0.61	0.62
	II CHILE 2030							
100km	0.62	0.65	0.70	0.83	0.62	0.61	0.68	0.83
200km	0.68	0.69	0.70	0.80	0.67	0.66	0.69	0.78
300km	0.71	0.72	0.71	0.77	0.70	0.69	0.68	0.72
400km	0.74	0.75	0.71	0.73	0.72	0.71	0.67	0.65

Figura 4.21: Índice Integrado para Chile en los escenarios 2017 & 2030, para todos los ciclos y todas las autonomías.

tores eléctricos para la tracción, debido a la naturaleza del proceso de conversión de energía electroquímica a bordo del bus, su eficiencia es menor que la del BEV. En el caso de la tecnología ICE (DV y HEV), la mayoría de las pérdidas de energía se deben a la baja eficiencia de la conversión de energía típica de los motores térmicos, lo que hace que esta tecnología sea la más ineficiente de todas en la etapa TTW. Los trenes de potencia FCHEV se volvieron competitivos dentro del alcance de WTW con la introducción de 50 % de H₂ proveniente de la electrólisis del agua impulsada por el viento. No obstante, hay margen para mejorar las eficiencias, que pueden aumentarse con una mayor proporción de la electrólisis del agua a partir de energías renovables de cero emisiones en la producción de hidrógeno. En escenarios fuertemente dominados por fósiles que generan y bombean electricidad a la red existente, no es posible esperar un escenario de bajas emisiones. Esta es la razón por la que en el proceso WTW los ZEV no presentan buenos índices de emisiones de IE, como en el caso de Argentina y Chile en contraste con el caso de Brasil, que tiene una combinación de electricidad altamente sostenible. En estos casos, deberíamos pensar en generar electricidad e hidrógeno a partir de energías renovables en micro redes aisladas, para alimentar a BEV y FCHEV aprovechando los ricos recursos naturales que tienen estos países. El análisis muestra que la penetración de ER no debería ser el único foco, ya que las tecnologías ya instaladas podrían ser altamente contaminantes. Brasil, con su 81 % de ER en su combinación de electricidad, resulta ideal para la aplicación de autobuses eléctricos completos. También los resultados resaltan las áreas con oportunidades de mejora para los propulsores eléctricos, co-

mo VGE y CT. Además, los rangos más cortos producen mejores rendimientos para estos trenes de potencia, ya que los pesos de los autobuses aumentan y afectan el consumo de energía. La generación de hidrógeno a partir de la electrólisis del agua en los parques eólicos se explora como el mejor escenario futuro para los FCHEV. En este caso, se demostró que FCHEV es la mejor alternativa para la reducción de emisiones en los tres países.

Capítulo 5

Optimización del manejo de la energía en un vehículo híbrido

Este capítulo se basa en parte en el trabajo desarrollado en [133] y los resultados obtenidos en él.

En este capítulo se propone estudiar y elaborar el diseño de un sistema de control para un vehículo eléctrico propulsado con celdas de combustible y un paquete de baterías de iones de litio como fuente secundaria. El sistema de celdas de combustible (FCS) fue seleccionado como la principal fuente de energía para minimizar, por ende, el uso de la batería. El comportamiento dinámico de un sistema PEMFC es un factor crucial para garantizar el funcionamiento seguro y eficaz de un vehículo a celdas de combustible (FCHEV) [134]. Debido a que la gestión térmica y del agua son fundamentales para estabilizar el rendimiento del PEMFC durante los cambios de carga severos, el modelo utilizado en este trabajo incluye un sistema de gestión térmica y del agua. Esto se desarrolló para describir la dinámica de la temperatura del sistema en función de las entradas del sistema (potencia requerida y temperatura ambiente) [135]. Aunque en la celda de combustible (FC) el comportamiento dinámico de la temperatura es mucho más lento que la mayoría de los procesos electro-químicos que tienen lugar dentro de la FC, la diferencia de los consumos de H₂ entre un modelo de pila acoplado a un modelo térmico preciso y un modelo de FC sin modelo térmico es del 4 %. La gran mayoría de las investigaciones publicadas sobre el tema, realizan sistemas optimizados adoptando modelos estáticos que usan curvas de polarización y tablas de eficiencia [136] [137].

Como el rendimiento de los vehículos híbridos (p. Ej., FCHEV) varía drásticamente con respecto a los patrones de conducción, se consideraron ocho ciclos de conducción de vehículos ligeros para entornos urbanos, suburbanos y de autopistas

que se explican en la sección 5.4.

5.1. Estado del arte

Entre los diversos tipos de celdas de combustible actualmente disponibles, debido a sus características de rendimiento, las celdas de combustible de membrana de intercambio de protones (PEMFC), que trabajan alrededor de 70 °C y con presiones cercanas a la atmosférica, son actualmente las más adecuadas para su uso en sistemas de transporte. Debido a que la respuesta dinámica de los FCS es relativamente baja, los vehículos propulsados por PEMFC podrían ser inestables ante el cambio repentino de potencia requerida [138]. Para el uso en vehículos, estos sistemas deben complementarse con dispositivos de almacenamiento de energía electroquímicos, como baterías recargables para garantizar la entrega inmediata de la energía necesaria para la propulsión cuando sea necesario.

Hay muchas motivaciones para introducir la hibridación de los FCS para aplicaciones vehiculares: desacoplar la celda de combustible de la corriente requerida por el motor de tracción para permitir que el FCS se use lo más cerca posible de su rango operativo óptimo, la recuperación de energía al desacelerar con el frenado regenerativo, reducir el tamaño de FCS y el peso total del sistema, etc. La respuesta transitoria observada en el análisis dinámico de los FCS no es instantánea y se pueden visualizar fenómenos transitorios típicos, como los efectos de sobrealimentación debido al sobre-amortiguamiento de la señal, lo cual se puede resolver con el uso de una batería complementaria [113, 139]. Pero los beneficios no se limitan a eso, el uso de una segunda fuente de energía podría incluso funcionar como una fuente de energía de emergencia, en el caso de la falla de la celda de combustible. Por otro lado, el grado extra de libertad que ofrece la topología híbrida y el complejo flujo de energía, introduce la necesidad de una estrategia de control para la gestión energética [140]. El vehículo eléctrico híbrido con celdas de combustible (FCHEV) necesita un sistema de administración de energía para distribuir energía eléctrica requerida entre las distintas fuentes de energía. La estrategia debe satisfacer las restricciones de los componentes del tren de potencia al tratar de alcanzar algún objetivo de rendimiento a nivel del sistema, como por ejemplo, maximizar el ahorro de combustible o mantener el estado de descarga de la batería (SoD).

Existen principalmente dos tipos de enfoques de control: basado en reglas y basado en la optimización [29]. Se han realizado varios estudios sobre esta tecnología, con el objetivo de lograr un mejor rendimiento y las contribuciones de la literatura

sobre las técnicas de control de FCHEV son numerosas [76, 141–148].

En el estudio realizado por Simmons [75], para encontrar la solución óptima global que minimice el consumo de combustible se aplica un control óptimo basado en el Principio Mínimo de Pontryagin (PMP) y se desarrolla un sistema de manejo de la energía (EMS) adecuado para su implementación a bordo, en la forma de un regulador autorregresivo de media móvil (ARMA). Cipollone et al. [149] propusieron un método que considera una estrategia de propulsión en la que la celda de combustible puede encenderse o apagarse por completo para lograr la mejor eficiencia. Muchos algoritmos de administración de energía fueron diseñados con métodos basados en reglas o heurísticos. Esos métodos basados en reglas son simples y fáciles de entender porque provienen de la intuición [150, 151]. Sin embargo, a menudo carecen de optimalidad o no pueden aplicarse a otros ciclos de manejo. Idealmente, la minimización del consumo de combustible de vehículos híbridos sólo se puede lograr cuando el escenario de conducción se conoce a priori. Por ejemplo, muchos autores implementan el control en línea a través del Principio Mínimo de Pontryagin, pero este método asegura la optimalidad solo cuando el ciclo de conducción se conoce a priori. En particular, una vez definidas las características del vehículo, la solución óptima depende estrictamente de la distancia total recorrida [152–156]. Otros casos,[157, 158] también desarrollan algoritmos de optimización global donde el ciclo de conducción debe ser conocido a priori. Esto implica una gran restricción para la libertad de manejo y la aplicación de las políticas de control para nuevos escenarios y ciclos de manejo.

5.2. **Objetivos**

En este capítulo, se emplea un método basado en gradiente para obtener las estrategias de gestión energética óptimas, en lugar de métodos, como por ejemplo, PMP o programación dinámica (DP por sus sigla en inglés), que no se pueden usar aquí debido a la naturaleza de los modelos. Estas estrategias óptimas se usaron para entrenar una red neuronal (NN por sus sigla en inglés) particular para cada ciclo. Además, cada NN se utilizó para simular el manejo de energía en el resto de los ciclos, mostrando diferentes actuaciones.

El objetivo es el desarrollo de un EMS capaz de supervisar el flujo de potencia de la pila de combustible, obteniendo una solución que minimice el consumo de energía equivalente de un ciclo desconocido a priori.

5.3. Modelo del vehículo y descripción del tren de potencia

La arquitectura del tren de potencia FCHEV tiene un FCS acoplado con una batería, la cual funciona principalmente como una unidad de potencia auxiliar. La batería y la celda de combustible suministran energía a los motores eléctricos a través de un bus eléctrico balanceado con dos convertidores DC/DC. Un esquema de los componentes del tren de potencia se muestra en la figura 5.1.

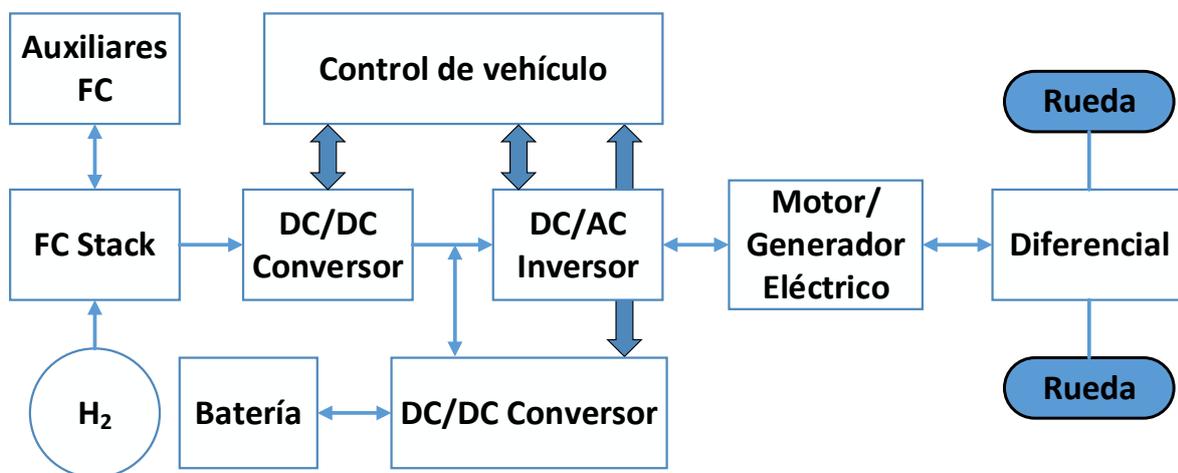


Figura 5.1: Esquema del tren de potencia.

Para el modelo del vehículo se asume que las eficiencias de los componentes electrónicos (η_{elec}) y mecánicos (η_{mec}) son 0.97 % y 0.85 %, respectivamente. Las eficiencias del motor eléctrico (η_{EM}), tanto en modo motor como en modo generador son dadas por el fabricante como un mapa de eficiencia que varía con la potencia y las RPM del motor, y fue integrado al modelo. El modelo dinámico del vehículo tiene en cuenta las fuerzas gravitacionales (5.1), la resistencia aerodinámica(5.2), la fuerza de rodadura (5.3) y las fuerzas de aceleración (5.4), las cuales se pueden ver en la figura (5.2).

$$F_g = Mg \sin(\alpha) \quad (5.1)$$

$$F_w = \frac{1}{2} C_D A \rho V^2 \quad (5.2)$$

$$F_r = \frac{T_r}{r_d} = f_r Mg \cos(\alpha) = (f_0 + KV^2) Mg \cos(\alpha) \quad (5.3)$$

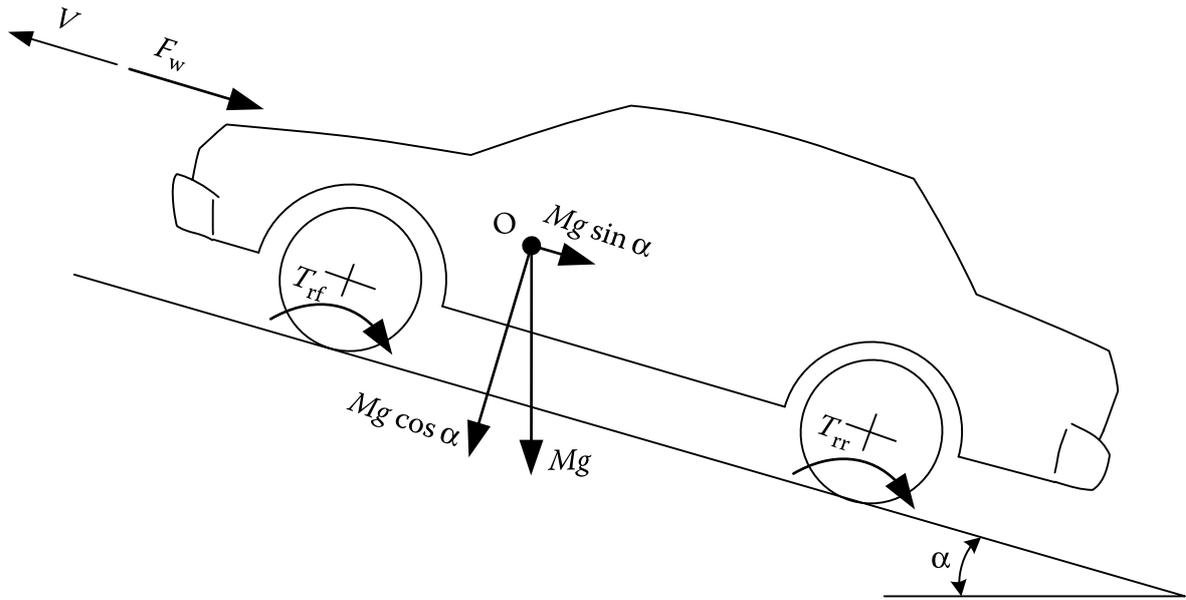


Figura 5.2: Fuerzas actuantes sobre el vehículo.

$$\sum F = M \frac{dV}{dt} = F_{rueda} - F_g - F_w - F_r \quad (5.4)$$

La potencia en la rueda se puede calcular según la ecuación (5.5).

$$P_{rueda} = F_{rueda} V \quad (5.5)$$

La potencia eléctrica requerida se calcula mediante la ecuación (5.6).

$$P_{req} = \frac{P_{rueda}}{\eta_{elec} \eta_{EM}(V) \eta_{mec}} \quad (5.6)$$

Sustituyendo (5.1), (5.2), (5.3), (5.4) y (5.5) en (5.6), y despejando, obtenemos la ecuación de la potencia eléctrica requerida mostrada en (5.7).

$$P_{req} = \frac{\left[\left(\frac{dV}{dt} + (f_0 + KV^2)g \cos(\alpha) + g \sin(\alpha) \right) M + \frac{1}{2} C_D A \rho V^2 \right] V}{\eta_{elec} \eta_{EM} \eta_{mec}} \quad (5.7)$$

Donde:

F_g	Fuerza gravitacional [N]
F_w	Resistencia aerodinámica [N]
F_r	Resistencia a la rodadura [N]
F_{rueda}	Fuerza ejercida por el vehículo en la rueda [N]
P_{rueda}	Potencia ejercida por el vehículo en la rueda [W]
P_{req}	Potencia eléctrica requerida por el vehículo [W]
M	Masa del vehículo [kg]
g	Aceleración de la gravedad [m/s^2]
α	Pendiente del camino [rad]
C_D	Coefficiente arrastre
ρ	Densidad del aire [kg/m^3]
A	Área frontal del vehículo [m^2]
V	Velocidad del vehículo [m/s]
f_r	Coefficiente de resistencia a la rodadura
f_0	Primer coeficiente de resistencia a la rodadura
K	Segundo coeficiente de resistencia a la rodadura [s^2/m^2]

Las ecuaciones anteriores asumen lo siguiente:

- La velocidad del viento es cero.
- Las inercias rotacionales son despreciables.
- La superficie de rodadura no se deforma.
- No hay deslizamiento entre las ruedas y el asfalto.
- Las fuerzas laterales son despreciables.

La tabla 5.1 muestra las especificaciones del vehículo.

Debido al comportamiento dinámico electro-químico y térmico de la FC, la potencia de salida difiere de la señal de comando. Para garantizar que la potencia entregada por la FC y la batería coincida con la potencia eléctrica solicitada por el ciclo de conducción, la solicitud de energía de la batería se define como la potencia eléctrica requerida menos la potencia de entrega por la FC, como se muestra en la siguiente ecuación:

$$P_{bat} = P_{req} - P_{FCout} \quad (5.8)$$

5.3.1. Modelo de celda de combustible

Para este análisis, se utiliza un modelo dinámico de pila PEMFC derivado del trabajo de Gabriel Correa [96, 97], descrito en la sub-sección 4.1.2.5 utilizando los

Parámetro	Valor
Vehículo	
Área Frontal	1,9403 m ²
f_0	0.013
K	$6,51 \times 10^{-6} \text{ s}^2/\text{m}^2$
Coef. de arrastre	0.35
Temperatura ambiente	25 °C
Peso del chasis	754,4 kg
Peso total	1083 kg
Celda de combustible PEM	
Potencia máxima	25 kW
Número de celdas	336
Área activa	200 cm ²
Presión de almacenamiento de H ₂	350 bar
Peso de almacenamiento de H ₂	62,8 kg
Peso del FCS	103 kg
Motor eléctrico	
Potencia continua	45 kW
Potencia continua de generación	41 kW
Torque máximo	240 N m
Potencia máxima	75 kW
Batería	
Capacidad nominal	5 Ah
Corriente de descarga máxima	150 A
Corriente de carga máxima	10 A
Voltaje nominal de celda	3,7 V
Voltaje de corte de celda	2,7 V
Nro. de celdas	56
DOD	70 %
SoD _{t=0}	30 %
Peso del pack de baterías	13 kg

Tabla 5.1: Parámetros del vehículo.

parámetros de la celda de combustible que se muestran en la tabla 5.1.

Dado que la PEMFC es la principal fuente de energía, el objetivo del sistema de manejo de la energía (EMS) es minimizar el consumo total de hidrógeno, que viene dado por la ecuación (5.9).

$$m_{H_2} = \int_{t_0}^{t_f} M_{H_2} N_C \frac{(I_{FC}(t) + I_{aux}(t))}{2F} dt \quad (5.9)$$

donde I_{FC} es la corriente de la FC, I_{aux} es la corriente de los auxiliares, N_C es el número de celdas en la celda de combustible y F es la constante de Faraday.

5.3.2. Modelo de batería

El modelo de la batería usado es el definido en la sub-sección 2.4.1 utilizando los parámetros que se dan en la tabla 5.1. Para su funcionamiento requiere las curvas de tensión vs. SoD en carga y descarga para diferentes corrientes de carga y descarga, así como el cambio de voltaje de descarga vs SoD a diferentes temperaturas. Tanto la temperatura ambiente (T_{amb}) como la potencia requerida de la batería (P_{BAT}) se necesitan como entradas en función de tiempo. Los valores iniciales de SoD y la temperatura de la batería también son necesarios.

5.3.3. Simplificación del modelo de celda de combustible

El uso de un modelo dinámico complejo naturalmente requiere un esfuerzo computacional significativo. En consecuencia, se propone un modelo simplificado para llevar a cabo el proceso de optimización de cada uno de los ciclos. Es importante tener en cuenta que cada ciclo analizado tarda aproximadamente 10 segundos en resolverse con el entorno Simulink de Matlab. Además, el proceso de optimización requiere aproximadamente 100 iteraciones hasta su convergencia, cada una de las cuales conlleva calcular la derivada de la solución propuesta, lo cual se traduce en $2 \times N$ iteraciones siendo N el número de elementos del vector solución. Se propone entonces un método que requiera un bajo esfuerzo computacional. Para este caso se decidió utilizar un modelo auto-regresivo con términos exógenos (ARX) para aproximar el comportamiento del modelo del FCS y se utilizó el ciclo HWFET como caso de prueba para la validación del mismo con respecto al modelo de Simulink. En la figura 5.3 se muestran las salidas de los modelos simplificados y Simulink.

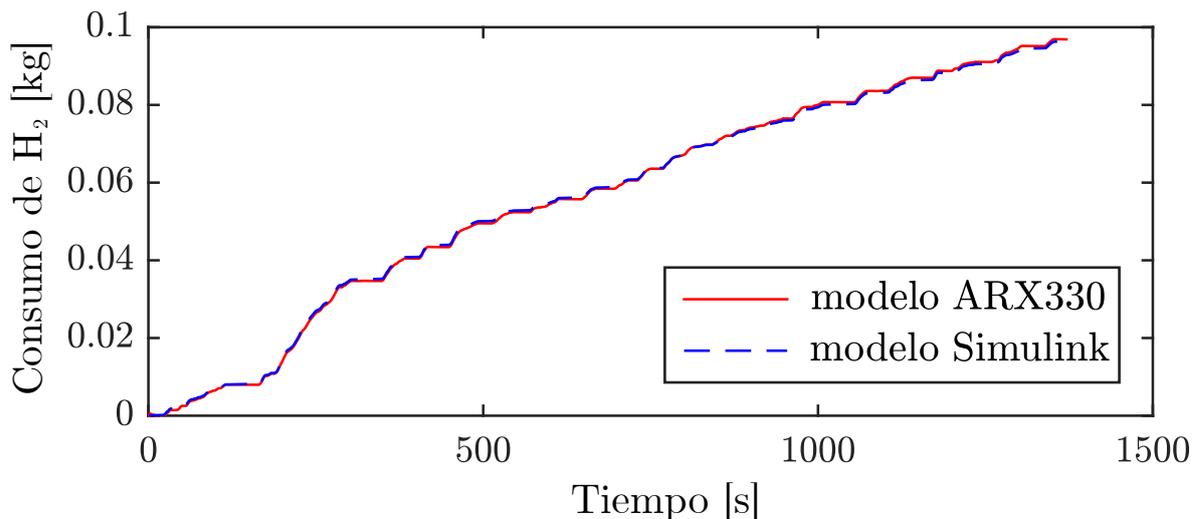


Figura 5.3: Validación del modelo ARX.

5.4. Ciclos de manejo

Los ciclos de manejo describen el comportamiento de la velocidad de un vehículo a lo largo del tiempo en una prueba de manejo. Algunos tratan de simular situaciones reales en la ciudad o en la ruta y otros solamente son para pruebas de laboratorio (tienen lapsos de velocidad constante a lo largo del ciclo). Son desarrollados por universidades, gobiernos o empresas con el fin de relevar consumos, emisiones, comportamiento de vehículos, etc. Los ciclos de manejos están, además, categorizados según el vehículo objetivo, autos, camiones, furgones, motos y autobuses; y algunos apuntan a simular condiciones de manejo específicas como ser condiciones de tráfico de ciudad, en carretera u otras condiciones.

Un compendio de ciclos con datos generales sobre los ciclos se pueden encontrar en [159], y los datos de las curvas de los ciclos se pueden encontrar en [160].

Como muestra el análisis realizado por Karabasoglu [84], los patrones de conducción afectan significativamente el consumo de combustible. Por lo tanto, se consideraron ocho ciclos de conducción de vehículos livianos para entornos urbanos, suburbanos y de carreteras: UDDS, LA92, NYCC, NEDC, HWFET, WLTP y CADC en sus variantes urbana y rural. La figura 5.4 muestra el perfil de velocidad de cada ciclo.

El programa de conducción del dinamómetro urbano (UDDS, por su sigla en inglés) representa un recorrido de 12,07 km en un entorno urbano con paradas frecuentes para pruebas de vehículos livianos. El programa de conducción del dinamómetro unificado LA92 es un ciclo de conducción en condiciones urbanas con un estilo de conducción más agresivo que el UDDS. El ciclo de Nueva York (NYCC,

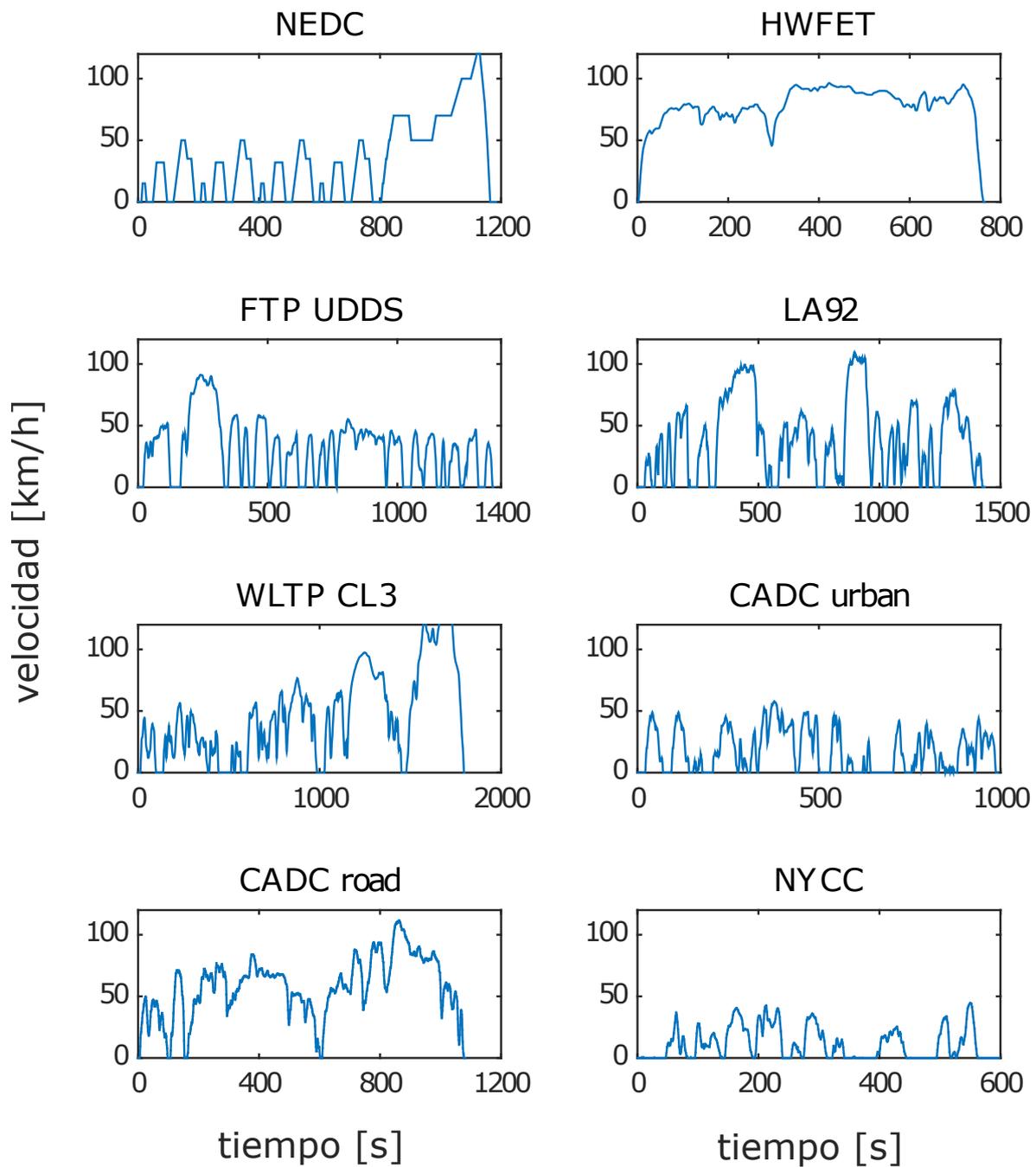


Figura 5.4: Perfil de velocidad de los ciclos de manejo.

Nombre	Duración [s]	Distancia [m]	ADS ¹ [km/h]	PKE ² [J/(kg m)]
HWFET	765	16506.54	78.18	0.141
NEDC	1184	10931.36	43.77	0.224
CADC Motorway	1068	28735.75	98.24	0.269
UDDS	1369	11990.23	38.30	0.350
WLTC CL3 v5.1	2067	18102.77	38.31	0.353
LA92	1435	15797.41	46.73	0.453
NYCC	598	1898.44	16.83	0.616
CADC Urban	993	4869.77	23.94	0.626

Tabla 5.2: Principales características de los ciclos de manejo.

por su sigla en inglés) muestra los rasgos de tráfico de una ciudad altamente poblada que tiene bajas velocidades y varias paradas. El Nuevo Ciclo de Conducción Europeo (NEDC, por sus sigla en inglés) representa el uso típico de un automóvil en Europa. Está compuesto por cuatro repeticiones de una parte urbana llamada ECE, y una parte EUDC que representa condiciones extraurbanas. La prueba de economía de combustible en carretera (HWFET, por sus sigla en inglés) muestra las condiciones de manejo en carretera con velocidades de menos de 96 km/h. Los procedimientos de prueba de vehículos ligeros armonizados en todo el mundo (WLTP, por su sigla en inglés) se dividen en 3 ciclos, dependiendo de la relación de potencia/masa del vehículo probado. Fue desarrollado por expertos europeos, japoneses e indios para reemplazar el ciclo NEDC. El vehículo utilizado para este documento se define como Clase 3, y el ciclo correspondiente consta de tres zonas de velocidad: una representativa de conducción urbana, una conducción suburbana y una conducción extraurbana con una velocidad inferior o igual a 135 km/h. Los Ciclos de Conducción de Artemisa Común (CADC, por sus sigla en inglés) incluyen tres ciclos de manejo, Urbano, Rural y Autopista [161], del cuál solo se estudiará el urbano y el rural.

En la tabla 5.2 se muestran las principales características de cada ciclo.

5.5. Método de optimización

Para realizar la minimización del consumo total de energía de los ciclos de manejo descritos en la sección anterior, se deben considerar algunas condiciones:

- Se debe considerar una función objetivo a minimizar para lograr un bajo con-

¹Average driver speed: velocidad de conducción promedio

²Positive kinetic energy: energía cinética positiva

sumo de hidrógeno.

- El vehículo a estudiar se propone como un FCHEV no-plug-in, es decir que la batería no se carga con fuentes externas, sino que se carga durante el andar del vehículo, ya sea con energía proveniente del freno regenerativo o con energía de la celda de combustible. Por este motivo se pide que dentro de un ciclo de conducción la batería termine con la mismo nivel de energía con el que partió
- El estado de descarga puede oscilar entre 10 % y 80 % a lo largo del ciclo para trabajar sobre la zona de potencial de plateau o meseta, que es la región en la cual el potencial se mantiene relativamente estable.

Luego, tomando $P_{FC}(t)$ como variable, la función de costo

$$m_{H_2} + \rho_0 W_0 + \rho_1 W_1 + \rho_2 W_2 \quad (5.10)$$

se minimiza para todo P_{FC} con $0 \leq P_{FC}(t) \leq 25$ kW para todo t con $t_0 \leq t \leq t_f$, donde W_0 es la energía descargada por la batería y definida por la ecuación (5.11)

$$W_0 = \int_{t_0}^{t_f} \max\{0, P_{BAT}(t)\} dt \quad (5.11)$$

y W_1 y W_2 son las penalizaciones cuadráticas para las restricciones del SoD y su formulación se puede ver en las ecuaciones (5.12) y (5.13). $\rho_0 > 0, \rho_1 > 0, \rho_2 > 0$ son elegidos adecuadamente de manera que los términos de la ecuación (5.10) tengan magnitudes similares de manera de que todas las restricciones sean penalizadas de manera similar.

$$W_1 = (SoD(t_f) - SoD(t_0))^2, \quad (5.12)$$

$$W_2 = \int_{t_0}^{t_f} (SoD(t) - \max\{10, \min\{SoD(t), 80\}\})^2 dt \quad (5.13)$$

5.5.1. Descripción del método

Para llevar a cabo la rutina de minimización se utilizó una computadora de escritorio estándar, con un procesador de ocho núcleos con una velocidad máxima de 3,4 GHz, una memoria RAM de 16 GiB.

Los modelos (simplificados y Simulink) proporcionan el valor de masa de hidrógeno (m_{H_2}) y la curva de estado de descarga ($SoD(t)$) para una curva de potencia dada $P_{FC}(t)$ con $t_0 \leq t \leq t_f$. Por lo tanto, la derivada exacta de la función de cos-

to (5.10) no está disponible. Para obtener el argumento que minimice la función de costo se probaron diferentes métodos, entre ellos la función de Matlab *fmincon* y el método sin derivadas BOBYQA [162] (usando la librería NLOpt) en los cuales se obtuvo poco progreso en cada iteración con lo cual se volvieron muy costosos en tiempo computacional. La función de Matlab *fmincon* y el método sin derivadas BOBYQA [162] (usando la librería NLOpt) obtuvieron muy poco progreso en cada iteración. Esto puede estar relacionado con la poca variación en la función de costo. Por lo tanto se propuso incorporar información de la curvatura usando un método cuasi Newton. Para ser más específicos, dada una cierta discretización del tiempo $t_0 < t_1 < \dots < t_f$, los valores $P_{FC}(t_j)$ se obtienen minimizando, en cada iteración, una aproximación cuadrática de la función de costo sujeta a una restricción de caja, lo cual significa que la solución estará dentro de una cota definida de acuerdo al problema. En este caso, la restricción se aplica limitando la potencia de la celda entre 0 kW y 25 kW. Para el modelo cuadrático, el vector del gradiente se calcula mediante diferencias finitas y la matriz Hessiana se obtiene usando la actualización Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS) con la corrección de Powell, para garantizar un modelo cuadrático definido positivo (ver [163, 164]). Para completar, el método se describe de la siguiente manera.

- Sea $\vec{\gamma}_*$ un vector columna con los componentes $P_{FC}(t_j)$ y $\vec{\gamma}_k$ una aproximación generada por la k -ésima iteración del método.
- Sea $\varphi(\vec{\gamma})$ el valor de la función de costo (5.10) calculada usando los componentes de $\vec{\gamma}$
- sea \vec{v}_k el vector columna de la variación de la función de costo en cada componente de $\vec{\gamma}_k$.

Luego se usa el siguiente método cuasi Newton, sin derivación restringido a la caja.

1. Elegir $\sigma \in (0, 1)$, $\kappa \in (0, 1)$, $\vec{\gamma}_0$ y una matriz H_0 . Calcular \vec{v}_0 . Definir $k = 0$.
2. Calcular $\vec{\zeta}_k$, solución de

$$\begin{aligned} \underset{\vec{\zeta}}{\text{minimizar}} \quad & (\vec{v}_k)^T \vec{\zeta} + \frac{1}{2} \vec{\zeta}^T H_k \vec{\zeta} \\ \text{sujeto a} \quad & 0 \leq (\vec{\gamma}_k + \vec{\zeta})_j \leq 25, \quad j = 0, \dots, f. \end{aligned}$$

3. Hacer *backtracking* para encontrar $\alpha_k \in (0, 1]$ satisfaciendo la condición de Armijo

$$\varphi(\vec{\gamma}_k + \alpha_k \vec{\zeta}_k) \leq \varphi(\vec{\gamma}_k) + \sigma \alpha_k (\vec{v}_k)^T \vec{\zeta}_k$$

4. Definir $\vec{\gamma}_{k+1} = \vec{\gamma}_k + \alpha_k \vec{\zeta}_k$ y calcular \vec{v}_{k+1} .
5. Si $\|\vec{\gamma}_{k+1} - \max\{0, \min\{\vec{\gamma}_{k+1} - \vec{v}_{k+1}, 25\}\}\| < tol$, PARAR.

6. Definir $\vec{\delta} = \vec{\gamma}_{k+1} - \vec{\gamma}_k$, $\vec{\mu} = \vec{v}_{k+1} - \vec{v}_k$ y $\tau = (\vec{\delta})^T H_k \vec{\delta}$.
 Si $(\vec{\delta})^T \vec{\mu} < \kappa \tau$, definir $\vec{\mu} = \theta \vec{\mu} + (1 - \theta) H_k \vec{\delta}$ para
 $\theta = (1 - \kappa) \frac{\tau}{\tau - (\vec{\delta})^T \vec{\mu}}$.
 Definir

$$H_{k+1} = H_k - \frac{H_k \vec{\delta} (H_k \vec{\delta})^T}{\tau} + \frac{\vec{\mu} (\vec{\mu})^T}{(\vec{\delta})^T \vec{\mu}}$$

7. Definir $k = k + 1$ y volver al Paso 1.

El vector $\vec{\gamma}_*$ se elige como el vector aproximado que satisfaga la condición en el Paso 4. Este algoritmo se implementa en Matlab y los pesos para la función de costo (5.10) donde $\rho_0 = 1/3600$ y $\rho_1 = \rho_2 = 1$, y los valores de los parámetros del algoritmo fueron $\sigma = 10^{-4}$ y $\kappa = 0,2$. Dado que la evaluación de la función de costo requiere la evaluación de los modelos, el cálculo de las diferencias finitas del Paso 3 es una operación que insume mucho tiempo de cálculo. Sin embargo, el algoritmo fue capaz de resolver el problema, a diferencia de *fmincon* o BOBYQUA.

Como desventaja, este algoritmo necesita una aproximación de la derivada de la función objetivo con respecto a los elementos del vector solución dada por \vec{v}_k . Para calcular ese vector se utiliza una variación lo suficientemente pequeña centrada en el punto. Para un vector de $\vec{\gamma}_*$ de n componentes, se necesitan $2n$ evaluaciones de la función objetivo para calcular la aproximación. A esto se le deben añadir las evaluaciones necesarias para resolver el valor del vector de avance α_k según la condición de Armijo.

Para un ciclo de manejo de 765 s, y un vector $\vec{\gamma}_*$ de 766 componentes, se necesitan aproximadamente 10 segundos para simular el modelo en Simulink, por lo cual, contando con 100 iteraciones para encontrar el vector que minimice la función objetivo precisaríamos, como mínimo, 17 días de cálculo para obtener el minimizador para uno de los ciclos de manejo. Para resolver el alto tiempo de computo del modelo de Simulink, se utiliza el modelo simple explicado en la subsección 5.3.3, con el cual se logra bajar el tiempo de computo a menos de 3 días.

5.6. Resultados de optimización

El procedimiento de optimización se realizó para los 8 ciclos de manejo diferentes antes mencionados. Esos resultados se muestran en la figura 5.5 donde se muestra un histograma que muestra la frecuencia de ocurrencia de las potencias óptimas de cada fuente para cada ciclo, donde las potencias negativas representan la carga de la batería y las positivas la descarga de la batería y el uso de la celda de

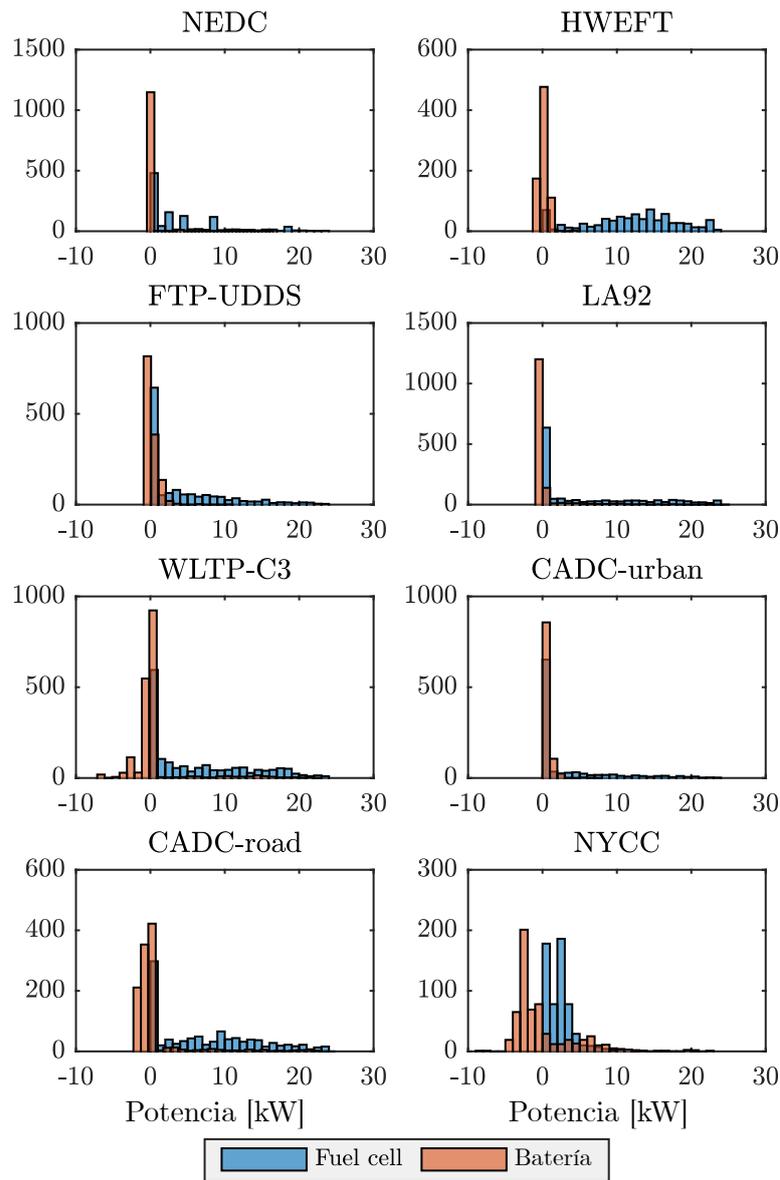


Figura 5.5: Frecuencia de potencias para los casos óptimos.

	NEDC	HWFT	UDDS	LA92	WLTP	CADC _u	CADC _r	NYCC
Energía requerida en el ciclo [kWh]	1.71	2.59	1.83	3.05	4.19	0.96	2.81	0.37
Energía entregada por el FCS [kWh]	1.63	2.57	1.71	2.95	3.99	0.88	2.76	0.36
Energía de la FC a la batería [kWh]	0.02	0.00	0.01	0.06	0.25	0.00	0.16	0.14
Energía entregada por la batería [kWh]	0.10	0.03	0.15	0.21	0.47	0.12	0.26	0.17
Energía de frenado disponible [kWh]	0.15	0.07	0.25	0.43	0.33	0.21	0.28	0.08
Energía de frenado recuperada [kWh]	0.09	0.03	0.14	0.16	0.12	0.12	0.13	0.05
Energía perdida en la batería [kWh]	0.01	0.00	0.01	0.02	0.06	0.01	0.04	0.02
Energía total entregada a la batería [kWh]	0.11	0.03	0.15	0.22	0.37	0.12	0.29	0.19
% de energía entregada por el FCS	94%	99%	92%	93%	89%	88%	91%	67%
% de energía entregada por la batería	6%	1%	8%	7%	11%	12%	9%	33%
% de energía de frenado para carga de batería	61%	44%	56%	37%	36%	56%	46%	64%
% de energía de frenado perdida	39%	56%	44%	63%	64%	44%	54%	36%
% de carga de la batería por RB	85%	97%	94%	73%	32%	98%	45%	26%
% de carga de la batería por FCS	15%	3%	6%	27%	68%	2%	55%	74%

Tabla 5.3: Análisis de los datos del manejo óptimo de la energía.

combustible. Por ejemplo en ciclo NYCC muestra una gran concentración de uso de la celda de combustible sobre las potencias de 0 a 1 kW y de 2 a 3 kW. En cambio la batería muestra su mayor uso para potencias negativas (carga de la batería) en el rango de -2 a -3 kW

La tabla 5.3 muestra el resultado y el análisis de la energía consumida, producida e intercambiada entre las fuentes. “Energía requerida en el ciclo” se refiere a la energía eléctrica solicitada por el automóvil a las fuentes de energía. “Energía entregada por el FCS” es la salida de energía neta del FCS, que incluye la energía del FCS suministrada a la batería. “Energía entregada por la batería” es la salida de energía neta de la batería. “Energía de frenado disponible” es la energía que el generador puede obtener del frenado regenerativo luego de las pérdidas en los dispositivos electrónicos. Debido a los picos de potencia de frenado, no toda esta energía se transmite a la batería, por lo tanto, “Energía de frenado recuperada” es la energía de frenado que se usa para cargar la batería después de las pérdidas de carga de la batería. “Energía perdida en la batería” incluye pérdidas debido a los procesos de carga y descarga. Finalmente, “Energía total entregada a la batería” es la suma de las energías entregadas por el FCS y el generador a la batería. Los flujos de energías se pueden apreciar en el esquema Sankey de la figura 5.6.

En la figura 5.7, se muestra una comparación entre el valor de la función de costo en la estrategia óptima (barras rojas) y en un caso base (barras azules). El caso base usado es la administración de energía trivial donde la potencia de la celda de combustible se selecciona como la fuente principal y por lo tanto funciona para proporcionar la potencia requerida, cuando la FC no puede proporcionarla, se usa la batería para proporcionar lo faltante. Se puede observar que en casi todos los ciclos, el valor de la función de costo disminuye sustancialmente, obteniendo hasta 2 % del costo de referencia en los ciclos CADC, excepto en el ciclo NEDC donde el costo óptimo es 96 % del costo base. En este ciclo, el caso base está muy cerca del caso óptimo.

5.7. Sistema de manejo de energía con redes neuronales

Una vez obtenidos los valores óptimos, el objetivo es encontrar un algoritmo que logre predecir los valores óptimos sin tener conocimiento de las potencias requeridas a futuro, es decir que sólo cuente con información del instante y de los valores pasados. Esto plantea un problema de predicción de series temporales, donde se

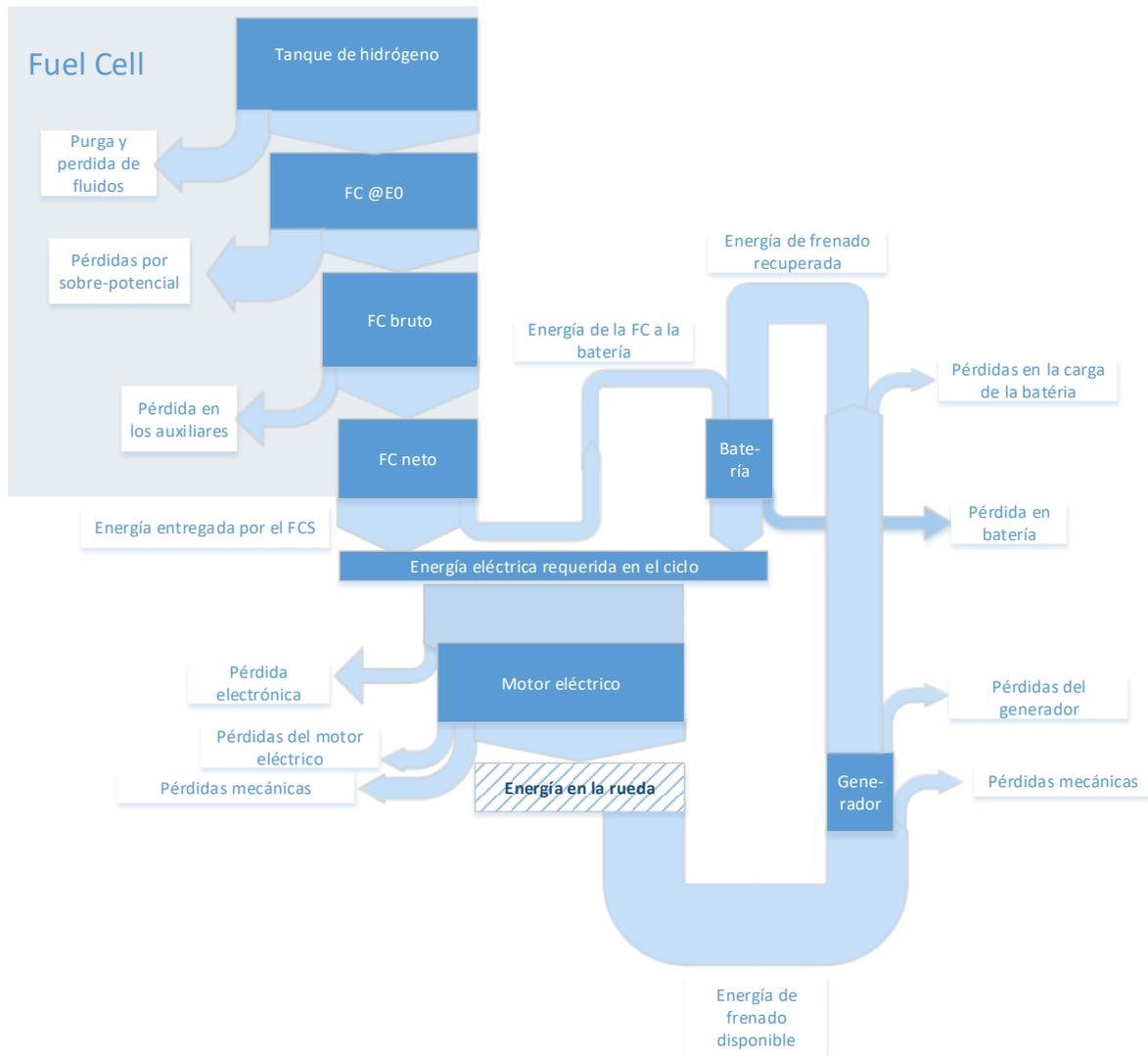


Figura 5.6: Esquema Sankey del flujo de energías en el FCHEV (no a escala).

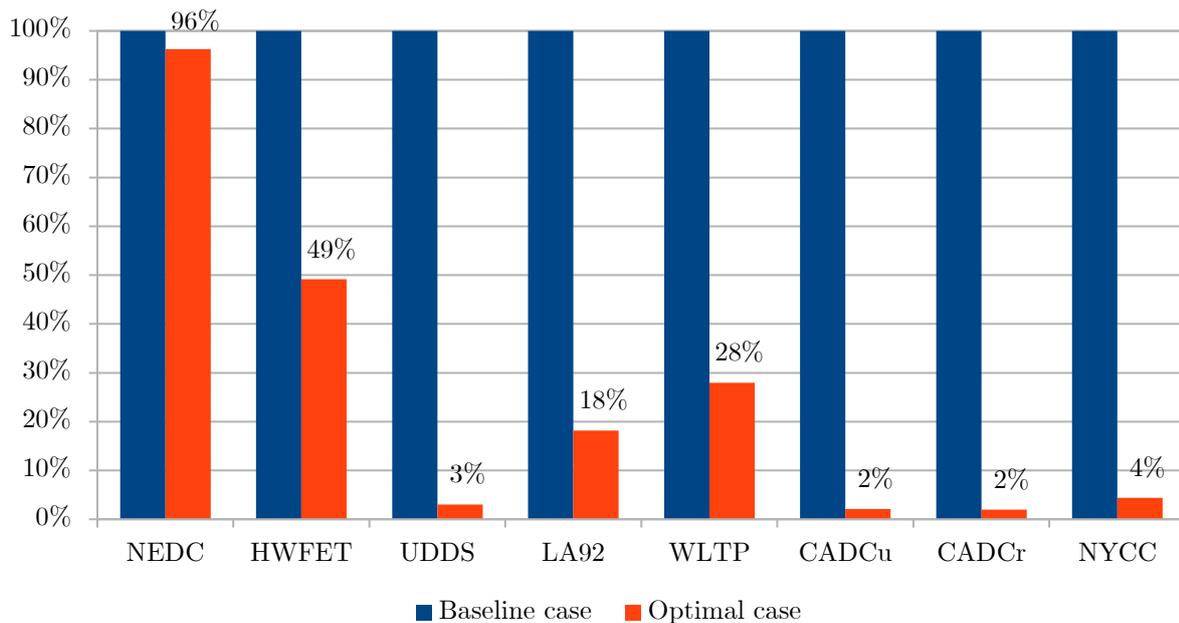


Figura 5.7: Resultados de la función de costo.

busca saber instante a instante cual es el valor de potencia de celda que minimice el consumo de hidrógeno. Dentro de la plétora de métodos para resolver este problema se decidió optar por las redes neuronales por ser un método sencillo de aplicar y que tiene la capacidad de aprender comportamientos subyacentes no detectados. Se optó por entrenar una red neuronal NARX (modelo exógeno autoregresivo no lineal) por cada uno de los ciclos de manejo. Las redes neuronales consisten en una capa de entrada, una capa oculta y una capa de salida. La capa de entrada toma información de los últimos 7 pasos de tiempo hacia atrás y la capa oculta cuenta con 10 neuronas [165]. La red neuronal del ciclo está entrenada para predecir la potencia de la celda de combustible $P_{FC}(t)$ contando con los datos de las potencias anteriores

$$P_{FC}(t - \Delta t), \dots, P_{FC}(t - 7\Delta t) \quad (5.14)$$

y la potencia eléctrica requerida por el vehículo

$$\vec{P}_{req} = (P_{req}(t), P_{req}(t - \Delta t), \dots, P_{req}(t - 6\Delta t)) \quad (5.15)$$

La potencia requerida en el instante presente se considera disponible. Además, se usa la potencia del frenado en la rueda.

$$\vec{P}_{wb} = (P_{wb}(t), P_{wb}(t - \Delta t), \dots, P_{wb}(t - 6\Delta t)) \quad (5.16)$$

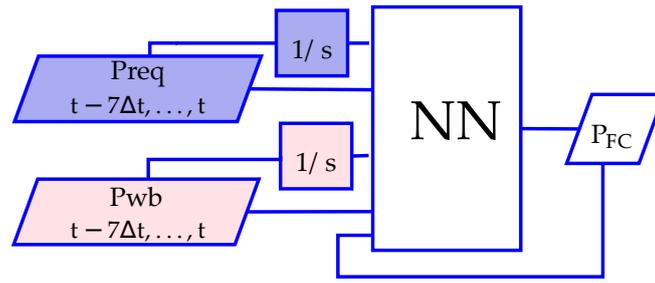


Figura 5.8: Diagrama de bloques de la red neuronal.

y las integrales

$$\int^t \vec{P}_{req} dt \text{ y } \int^t \vec{P}_{wb} dt \quad (5.17)$$

también se incorporaron como entradas para el entrenamiento de las redes.

Una vez que la red neuronal está entrenada, la estrategia de control (ver figura 5.8) consiste en calcular una aproximación (\hat{P}_{FC}) de la potencia de celda requerida $P_{FC}(t)$ la cual será la salida de la red, tomando como valores pasados la potencia de la celda de combustible:

$$\hat{P}_{FC}(t - \Delta t), \dots, \hat{P}_{FC}(t - 7\Delta t),$$

De esta forma, se calcula el próximo valor requerido a la celda $\hat{P}_{FC}(t)$, a partir de sus 7 últimos valores calculados recientemente, lo que siempre es matemáticamente posible si se asumen las condiciones iniciales de descanso ($P = 0$). Se utilizó la caja de herramientas de redes neuronales de Matlab para el entrenamiento, utilizando un método Levenberg-Marquardt para calcular los pesos y sesgos, y funciones de tangente hiperbólica y lineales para las funciones de activación de las capas ocultas y de salida, respectivamente. La introducción de \vec{P}_{wb} y las integrales de la ecuación (5.17) como entradas jugaron un papel muy importante aquí. En realidad, no sólo esto redujo sustancialmente el error de predicción, sino que también hizo que algunas redes de ciclos fueran capaces de predecir la potencia de la celda de combustible de otros ciclos diferentes. Una vez que se entrenaron las ocho redes neuronales, se probó su aplicación en los otros ciclos, además del ciclo con el que fue entrenada, con el fin de estudiar el rendimiento de cada red frente a la posible aplicación.

Obviamente, la potencia eléctrica requerida tendrá en general una fuerte dependencia del ciclo de conducción (figura 5.5) y, en consecuencia, cualquier tipo de estrategia de control general es, en principio, difícil de imaginar. Sin embargo, la mera existencia de grupos de ciclos que tienen características similares en principio sugiere que podría haber algunas estrategias comunes, capaces de predecir el conjunto completo de los requisitos de potencia de los ciclos.

	NEDC	HWFET	UDDS	LA92	WLTP	CADCu	CADCr	NYCC
NEDC	0.51 %	1.30 %	4.25 %	4.96 %	2.22 %	23.46 %	5.33 %	34.69 %
HWFET	1.37 %	0.25 %	38.35 %	-	0.52 %	71.04 %	3.47 %	57.78 %
UDDS	0.69 %	4.55 %	0.84 %	-	-	29.15 %	-	40.77 %
LA92	16.80 %	10.40 %	28.96 %	0.51 %	0.98 %	41.94 %	1.41 %	52.02 %
WLTP	4.79 %	2.04 %	19.35 %	28.49 %	0.64 %	52.76 %	4.56 %	76.05 %
CADCu	4.76 %	32.35 %	1.98 %	4.80 %	7.84 %	2.20 %	8.35 %	8.40 %
CADCr	46.10 %	23.82 %	45.64 %	-	2.62 %	73.33 %	0.37 %	104.65 %
NYCC	-	-	-	-	-	-	-	28.57 %

Tabla 5.4: Error relativo entre el caso óptimo y la respuesta del EMS para el consumo equivalente.

5.8. Resultados

En los vehículos híbridos, es decir con dos o más fuentes de energía, el consumo de combustible suele ser difícil de definir. En este trabajo se propuso estudiar el rendimiento del EMS a través del consumo equivalente que se define como:

$$Y = \frac{|SoD_f - SoD_0| BSE}{\eta_{FC} 100} + m_{H_2} LHV \quad (5.18)$$

Este índice mide la energía consumida por el modelo en kWh. El segundo término de la ecuación (5.18) está claramente relacionado con el consumo de H_2 del tanque. La diferencia absoluta entre el SoD inicial y final puede interpretarse como una desviación de caso ideal, en el que no se almacena energía en la batería por demás ($SoD_f < SoD_0$) ni existe la necesidad de recarga ($SoD_f > SoD_0$). La ecuación (5.19) da el error relativo del consumo equivalente del ciclo j -ésimo obtenido con la i -ésima red neuronal (\hat{Y}_{ij}), y el consumo óptimo equivalente del j -ésimo ciclo (Y_j).

$$M_{ij} = \frac{|\hat{Y}_{ij} - Y_j|}{Y_j} \quad (5.19)$$

Este índice se usó para evaluar el desempeño de las 64 posibles combinaciones de EMS y ciclos, y los resultados se muestran en la tabla 5.4. Las celdas de la tabla están coloreadas en un degradado lineal de acuerdo con los valores, el verde es la mejor valoración, el rojo el peor y el amarillo el punto medio. Los bloques blancos representan los casos en los que el EMS conduce al agotamiento de la batería ($SoD_f \geq 80\%$) y no se finaliza el ciclo por falta de energía almacenada. La fuente en negritas se usa para indicar la red neuronal que en las secciones siguientes se aplicarán a cada ciclo.

5.9. Clasificación de los ciclos de conducción

De la tabla 5.4 se puede inferir la existencia de una capacidad de predicción sobre otros ciclos más que el entrenado. Por lo tanto, se propone clasificar los ciclos de conducción en solo dos categorías, un grupo principalmente urbano y otro grupo principalmente interurbano y de carretera. Como se muestra en la tabla 5.4, la red neuronal HWFET ejecutada sobre el ciclo con la cual fue entrenada resulta tener el error relativo mínimo de 0.25 %. Por otro lado, el error relativo máximo se obtuvo cuando CADC road se ejecutó sobre NYCC con 104.65 %. Sin embargo, sin tener en cuenta el NYCC (ya que el ciclo óptimo es difícil de reproducir con el EMS propuesto), el error relativo máximo se obtuvo cuando el CADC road se ejecutó sobre el CADC urbano (73.33 %), seguido del HWFET sobre el CADC urbano (71.04 %) El error relativo medio de cada estrategia aplicada a los otros ciclos fue de 20.44 %, y sin tener en cuenta el NYCC, fue de 15 %.

De acuerdo con estos resultados, las redes neuronales entrenadas con ciclos agresivos (por ejemplo, CADC urbano) deberían funcionar en general para todos los ciclos. Por el contrario, las estrategias neuronales de ciclos suaves (por ejemplo, HWFET o NEDC) pueden no funcionar con ciclos agresivos.

Si bien la elección de los ciclos de conducción siempre tiene un impacto en el rendimiento de los vehículos, ciertos tipos de ciclos de conducción amplifican este impacto en los trenes de potencia de vehículos híbridos y eléctricos. Los vehículos híbridos e híbridos plug-in ofrecen poco beneficio de consumo a costos más altos para la conducción en carretera (HWFET), pero pueden ofrecer reducciones drásticas de combustible y ahorro de costos en conducciones agresivas con paradas frecuentes y ralentí [84].

Como se puede ver en tabla 5.4, la estrategia neuronal entrenada con el CADC urbano muestra el mejor rendimiento cuando se usa con ciclos de conducción desconocidos. Por el contrario, la estrategia neuronal entrenada con el NYCC solo puede usarse en el NYCC. Este comportamiento puede explicarse mirando la figura 5.5 y la tabla 5.3, donde, en el ciclo NYCC, la batería se carga con frecuencia (potencia negativa) tanto por el freno regenerativo (26 %) como por la FC (74 %). El EMS entrenado con este ciclo, donde el suministro de energía de la batería es el más grande, puede explicar por qué esta estrategia agota la batería en el resto de los ciclos.

Por otro lado, uno puede ver en la tabla 5.4 que la estrategia neuronal entrenada por el ciclo de manejo de autopistas HWFET tiene su peor desempeño cuando se aplica a los ciclos fuertemente urbanos NYCC, CADC urbano, LA92 y UDSS.

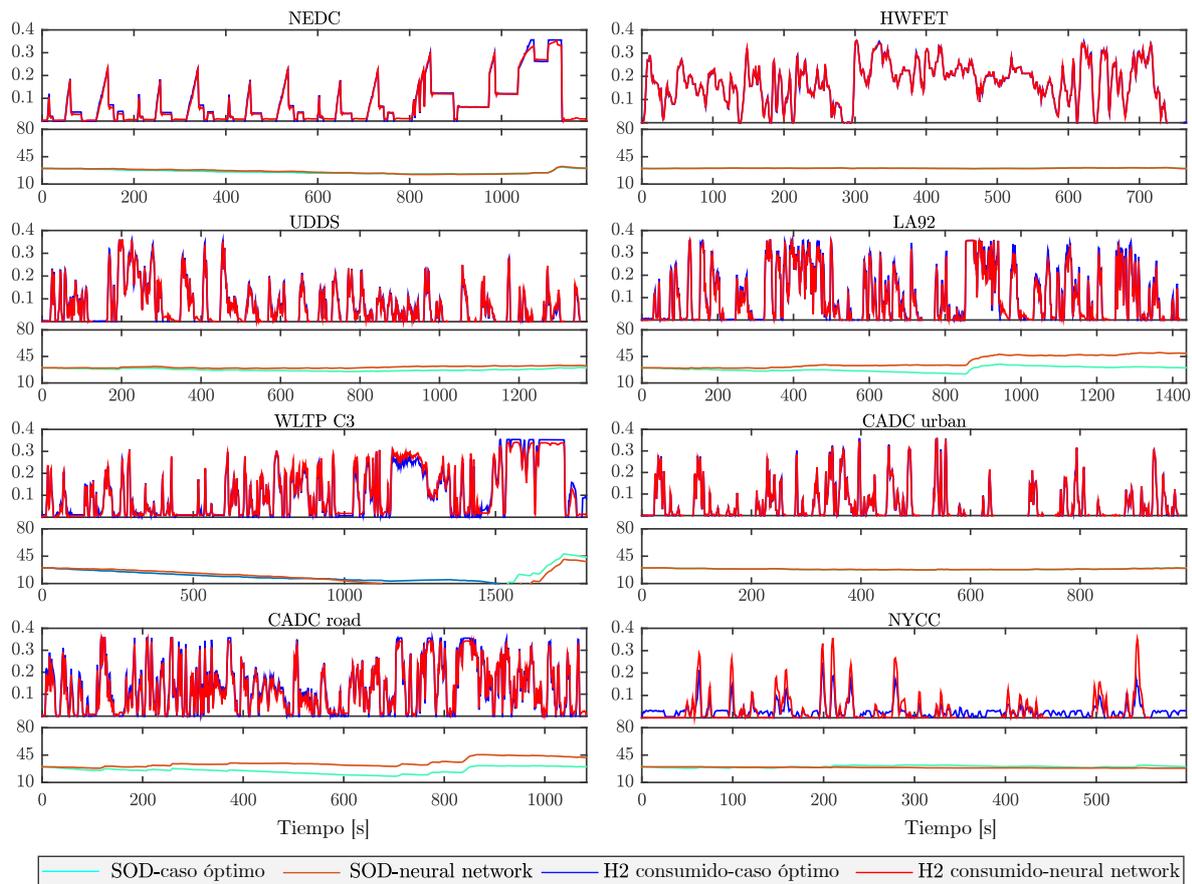


Figura 5.9: Flujo de hidrógeno (g/s) y SoD para el caso óptimo y para la gestión con EMS.

El EMS entrenado con el ciclo urbano CADC logra el error medio más bajo, para los ciclos urbanos UDDS, LA92, CADC urbano y NYCC y empeora para los ciclos de autopistas (por ejemplo, HWFET). Además, el EMS entrenado con HWFET muestra buenos resultados para ciclos interurbanos como NEDC, HWFET, WLTP y CADC Road. A partir de este análisis, es claro que se puede realizar una clasificación natural en dos grupos: ciclos urbanos que incluyen los ciclos UDDS, LA92, CADC urbano y NYCC, y ciclos interurbanos y de autopistas que incluyen los ciclos NEDC, HWFET, WLTP y CADC. Como se puede ver en la figura 5.9, se pueden obtener buenos resultados con el EMS entrenado con el CADC urbano aplicado a los ciclos urbanos y el EMS entrenado con el ciclo HWFET aplicado a los ciclos interurbanos y de carretera.

	NEDC	HWEFT	UDDS	LA92	WLTP	CADCu	CADCr	NYCC
Caso Base								
H ₂ [kg]	0.084	0.132	0.092	0.147	0.192	0.050	0.133	0.019
SoD final	29.681	27.883	20.411	34.746	57.320	21.563	45.359	26.355
Consumo equivalente [g/km]	0.254	0.270	0.277	0.318	0.307	0.387	0.279	0.390
Caso óptimo								
H ₂ consumido [kg]	0.084	0.131	0.087	0.150	0.203	0.045	0.141	0.018
SoD final	30.009	30.009	30.009	30.009	43.876	30.009	30.010	29.997
Mejoras del consumo equivalente [%]	0.52	2.05	12.80	0.69	0.05	19.79	2.27	17.76
Estrategia basada en NN								
H ₂ consumido [kg]	0.083	0.131	0.087	0.150	0.202	0.046	0.142	0.021
SoD final	30.754	29.769	29.534	29.519	46.252	29.471	30.538	27.335
Mejoras del consumo equivalente [%]	-0.84	1.80	11.07	-4.07	0.57	18.03	-1.12	10.85

Tabla 5.5: H₂ consumido y SoD para el caso base, caso óptimo y estrategia basada en NN.

5.10. Resultados comparativos

Para visualizar de forma más cuantitativa y cualitativa los resultados anteriores, es conveniente mostrar más específicamente en qué grado el EMS mejora el rendimiento en términos de consumo equivalente (ver (5.19)) contrastando la respuesta de la red neuronal, la optimización ideal del ciclo conocido a priori y el caso base. Esto se resume en la tabla 5.5 y la figura 5.10.

La tabla 5.5 muestra la masa de hidrogeno consumida, el SoD final (el SoD inicial es siempre 30 %) y el consumo equivalente en g/km para cada uno de los casos analizados (caso base, el consumo óptimo y con la aplicación del EMS) en cada uno de los ciclos estudiados.

En la figura 5.10, el consumo equivalente por kilómetro para el caso base está representado por las barras azules. Las barras amarillas corresponden al caso del control diseñado con las redes neuronales, y las barras rojas muestran los resultados del consumo equivalente dado por la optimización realizada cuando los ciclos son conocidos a priori. La diferencia de porcentaje de consumo equivalente con respecto al caso de referencia se muestra en la parte superior de cada barra. En la mayoría de los ciclos, la estrategia NN reduce el consumo con respecto al caso base o produce un resultado general que se acerca al rendimiento óptimo. Para los ciclos en los que las estrategias óptima y de referencia son aproximadamente comparables, la estrategia de NN en general produce resultados similares (por ejemplo, NEDC, LA92 y camino de CADCu), mejorando en algunos casos el rendimiento (por ejemplo, HWEFT, WLTP). Para los ciclos UDDS, CADCu urbano y NYCC, en los cuales el consumo óptimo es claramente menor que el caso base, la estrategia NN también reduce el consumo, a veces muy cerca del escenario óptimo (por ejemplo, UDDS,

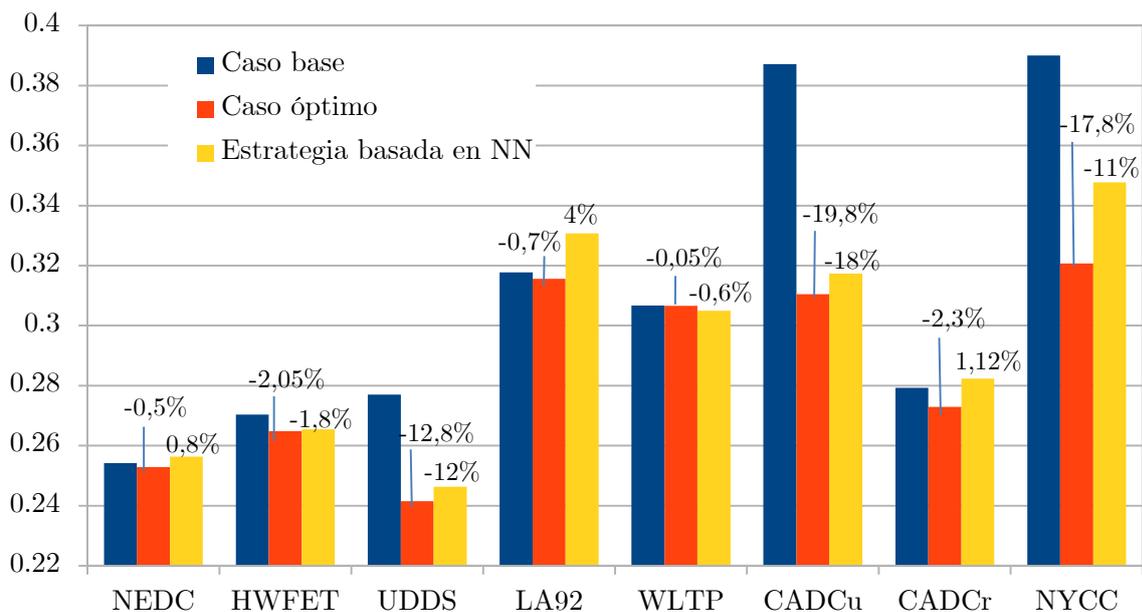


Figura 5.10: Comparación del consumo equivalente por kilómetro (g/km) y la diferencia porcentual con respecto al caso base.

CADC urbano). El EMS urbano aplicado a los ciclos urbanos obtiene una mejora general cercana a 10 %, 12 % en el UDDS, 18 % en el CADC urbano y 11 % en el NYCC. Por otro lado, cuando se aplica al LA92, el EMS urbano no muestra ninguna mejora, lo que puede explicarse debido a que el caso óptimo está muy cerca del caso de referencia. Para el EMS interurbano y de carretera, se aplica la observación anterior, obteniéndose mejoras de 1.8 % para el HWFET y de 0.6 % para el WLTP.

5.11. Conclusión

Se introdujo un nuevo controlador EMS en línea que gestiona los flujos de potencia de las fuentes de alimentación del FCHEV utilizando modelos dinámicos y redes neuronales. Los modelos dinámicos del vehículo con sus fuentes de alimentación particulares aseguran un diseño de EMS mejorado porque tienen en cuenta varios factores que no pueden incluirse mediante el uso de modelos estáticos (por ejemplo, la corriente máxima de carga de la batería, temperatura de trabajo, etc.). Se crearon ocho redes neuronales y se entrenaron con los resultados de la optimización de modelos simplificados, que se han utilizado para reducir el alto costo computacional de la optimización con los modelos de Simulink. El uso de redes neuronales proporciona un EMS aplicable en tiempo real. La solidez de este método se verificó al ejecutar cada estrategia sobre el resto de los ciclos, pudiendo comprobar

la confiabilidad para predecir ciclos desconocidos. Con esta metodología, se realizó un análisis cuantitativo y cualitativo, que muestra el comportamiento de las redes en diferentes tipos de ciclos. A partir de este análisis, las estrategias de administración se pudieron clasificar en dos categorías que cubren la mayoría de los tipos de conducción posibles: urbano e interurbano y carretera. Los resultados muestran que con la metodología propuesta es posible obtener dos EMS adecuados para implementar en un controlador de vehículo en tiempo real. Para un estilo de conducción en carretera e interurbano, la NN entrenada con el ciclo HWFET tiene el mejor rendimiento mostrando una reducción de consumo energético de hasta 2 %, mientras que la NN entrenada con el ciclo urbano CADC logra el error medio más bajo para ciclos urbanos obtener el ahorro de energía equivalente hasta 18 %.

Capítulo 6

Comentarios finales

La relación entre energía y ambiente es sin duda uno de los campos claves entre los desafíos tecnológicos existentes en la actualidad, tanto por su incidencia en el bienestar personal y colectivo, como por su influencia en la competitividad económica regional, y también por las repercusiones medioambientales. La investigación y transferencia, en estas dos áreas del conocimiento representan una gran posibilidad de crecimiento y desarrollo socio-productivo de nuestro país y de la región. En el contexto nacional es necesario que desde los centros de investigación y las universidades nacionales exista un claro involucramiento en los desafíos necesarios para lograr desarrollos tecnológicos innovadores o avanzados en tecnologías energéticas con baja emisión de carbono, entre ellas las energías renovables y tecnologías amigables con el ambiente. El litio es considerado como un recurso estratégico por su proyección futura, debido a que constituye un insumo imprescindible en las baterías de ion litio, para la alimentación de energía en celulares, computadoras, autos modernos (híbridos y eléctricos) y a una amplia gama de tecnologías. La batería de ion litio es un sistema de almacenamiento de energía eléctrica que ha generado grandes expectativas como fuente de potencia por su capacidad de almacenamiento, tanto de energía gravimétrica como volumétrica, considerablemente superior a la de los sistemas convencionales como por ejemplo las baterías de plomo, níquel/metal hidruro, entre otras. Con el fin de aprovechar localmente los grandes reservorios de litio que existen en el territorio nacional es fundamental incursionar en la investigación sobre tecnología de baterías de litio, para dar valor agregado a nuestras materias primas y poder realizar la sustitución de importaciones. Esto representa una oportunidad estratégica de enorme trascendencia, no sólo para la explotación de este recurso natural, sino también para agregarle valor tecnológico basado en un desarrollo científico autónomo e independiente. Muchos grupos de investigación de nuestro país están desarrollando acciones de investigación y transferencia tecno-

lógica que se espera impacten positivamente en la región y particularmente en los sectores productivos y sociales.

En este contexto, el trabajo expuesto en esta tesis de doctorado tuvo como principal motivación realizar aportes que puedan servir como nexo entre las investigaciones llevadas adelante para desarrollar nuevos materiales para las baterías de ion litio y la etapa de diseño y producción de baterías. En estas líneas se presentó un modelo basado en la Física, con más de 30 parámetros ajustables, que luego de una estimación de parámetros basada en la optimización entre los resultados de la simulación y los resultados experimentales, permitió modelar correctamente el comportamiento de una batería comercial de ion-litio. Además, en el marco de los estudios sobre la aplicación de los modelos desarrollados en sistemas de paquetes de baterías, se encontró que el refrigeramiento forzado de aire no es un buen método de enfriamiento para el paquete de baterías ya que las celdas centrales no alcanzan a bajar su temperatura y esto produce desbalance térmico entre las celdas del borde sobre el cual el aire impacta.

En cuanto a la introducción de los sistemas de almacenamiento basados en baterías de ion litio en vehículos eléctricos, en este trabajo se propusieron diversas metodologías de análisis que permiten evaluar, con una mirada global, los mejores caminos tecnológicos para la implementación de los mismos. En el análisis WTW se encontró que en el escenario actual, los buses convencionales tienen mejores índices, excepto en los índices de eficiencia donde los buses eléctricos a baterías tienen siempre mejores resultados. A la luz de esto último se comprende que para que los buses eléctricos sean, sin lugar a dudas, una mejor opción que los buses convencionales, se debe trabajar fuertemente sobre la generación energética, adoptando fuentes de emisiones cero (como la eólica y la solar) y reduciendo las emisiones de las fuentes ya instaladas. Como parte de estos estudios, se investigó un sistema de control para un vehículo eléctrico propulsado con celdas de combustible y un paquete de baterías de iones de litio como fuente secundaria. El objetivo principal fue el diseño y desarrollo de un controlador capaz de supervisar el flujo de energía de la celda de combustible y la batería, obteniendo una solución que minimice el consumo de energía equivalente de un ciclo desconocido a priori. La solidez de este método se verificó al ejecutar cada estrategia sobre varios ciclos de manejo internacional, pudiendo comprobar la confiabilidad para predecir ciclos desconocidos. A partir de este análisis, las estrategias de administración se pudieron clasificar en dos categorías que cubren la mayoría de los tipos de conducción posibles: urbano e interurbano y carretera. Los resultados muestran que con el sistema de control propuesto es posible obtener un controlador de vehículo en tiempo real que permite ahorros

energéticos de hasta 18 %.

La presente tesis fue llevada a cabo gracias al otorgamiento de una beca doctoral interna del tipo I por parte de CONICET en 2014. Gracias a la misma se pudo exponer resultados preliminares en los siguientes congresos y reuniones científicas:

- CORREA, G.; MUÑOZ, P.; RODRIGUEZ, C.R. Performance comparison of conventional, hybrid, hydrogen and electric urban buses using well to wheel analysis for different south american countries 22nd World Hydrogen Energy Conference Lugar: Rio de Janeiro; Año: 2018
- MUÑOZ, P.; CORREA, G.; FERNÁNDEZ, D.; GAUDIANO, M.
Environmental performance of multi- objective optimal energy management for fuel cell hybrid and plug-in hybrid urban buses
22nd World Hydrogen Energy Conference
Lugar: Rio de Janeiro; Año: 2018
- PEDRO MATÍAS MUÑOZ; ARPIT MAHESHWARI; GABRIEL CORREA PERELMUTER; MASSIMO SANTARELLI
Thermal behavior investigation of a LiFePO₄ battery cell determined by optimum power management of fuel cell electric vehicles
20th Topical Meeting of the International Society of Electrochemistry
Lugar: Ciudad Autonoma de Buenos Aires; Año: 2017
- PEDRO MATÍAS MUÑOZ; GABRIEL CORREA PERELMUTER; EMANUEL WALDEMAR MOSCHEN; AGUSTIN SIGAL; MIRTA SUSANA ROITMAN; GUILLERMINA LETICIA LUQUE; CARLOS RAMIRO RODRIGUEZ
GESTIÓN DE LA ECONOMÍA DEL HIDRÓGENO: DEL POZO A LA RUEDA PRODUCCIÓN, TRANSPORTE, DISTRIBUCIÓN Y USOS FINALES
I Congreso Internacional sobre Ciudades inteligentes, Innovación y sostenibilidad
Lugar: Córdoba; Año: 2016
- GABRIEL CORREA PERELMUTER; DAMIÁN FERNANDEZ; MARCOS GAUDIANO; LADISLAO MATHE; EMANUEL WALDEMAR MOSCHEN; PEDRO MATÍAS MUÑOZ
Dimensionamiento y gestión de la energía optimos en un vehículo eléctrico a pila de combustible utilizando modelos dinámicos del vehículo.
Biennial Congress of Argentina (ARGENCON)
Lugar: Bariloche; Año: 2014
- PEDRO MATÍAS MUÑOZ; EMANUEL WALDEMAR MOSCHEN; GABRIEL CORREA PERELMUTER; LADISLAO MATHE
Selección y dimensionamiento de un vehículo eléctrico híbrido propulsado

por celdas de combustible. Comparación y análisis con un vehículo de combustión interna

Biennial Congress of Argentina (ARGENCON)

Lugar: Bariloche; Año: 2014

Trabajo futuro

Entre los trabajos futuros que se pueden desprender de esta tesis se encuentran los siguientes:

- Aplicar los modelos de baterías con otras composiciones químicas y otros diseños de baterías, así como desarrollar modelos de paquetes de baterías para otras aplicaciones vehiculares como lo pueden ser autos o buses eléctricos, atendiendo diferentes métodos de enfriamiento y aportando soluciones a los problemas de configuración espacial y cumplimiento de estándares de seguridad.
- En el análisis WTW se puede formular el estudio inversamente, es decir, partiendo desde los requerimientos de emisiones y eficiencias energéticas para que los vehículos de emisión cero sean sustentables, calcular cómo debería estar constituida la matriz energética de Argentina, Brasil o Chile.
- En el marco de estudios sobre los sistemas de almacenamiento de energía como un concepto que integra tecnologías de hidrógeno y baterías de ion litio verticalmente, el hidrógeno producido a partir de electrolizadores se puede incorporar en diferentes arquitecturas de sistemas P2P y P2G. Las aplicaciones incluyen: hidrógeno para el abastecimiento de combustible de vehículos, procesos industriales, generación de energía e inyección en la tubería de gas natural. La producción y el almacenamiento de hidrógeno se pueden combinar con equipos de generación de energía, incluyendo celdas de combustible, motores de movimiento alternativo, turbinas de combustión y turbinas de vapor, lo que resulta en un dispositivo de almacenamiento con la capacidad de cambiar la entrega de electricidad para aplicaciones de redes eléctricas. Se propone hacer un análisis WTW de estas tecnologías para evaluar las eficiencias disponibles en cada uno de los caminos posibles.
- Actualmente se está llevando a cabo la optimización del manejo de energía en vehículos híbridos de emisión cero, minimizando índices multifísicos relativos a la eficiencia y emisiones del mismo en su ciclo WTW, integrando así la etapa de generación de los vectores energéticos.

Bibliografía

- [1] E. I. R. E. A. I. Aberg, R. R. Adib, F. Appavou, A. Brown, S. I.-U. Dwyer, B. s. Epp, F. R. Guerra, B. Kondev, H. E. R. Murdock, E. Musolino, J. I.-U. Rutovitz, J. L. S. R. Sawin, K. K. R. Seyboth, Consulting), J. S. F. E. Skeen, F. S. R. Sverrisson, S. I.-U. Teske, S. I. Weckend, H. I. Wuester, 17-8652_GSR2018_FullReport_web_-1, 2018. doi:978-3-9818911-3-3.
URL <http://www.ren21.net/status-of-renewables/global-status-report/>
- [2] X. Luo, J. Wang, M. Dooner, J. Clarke, Overview of current development in electrical energy storage technologies and the application potential in power system operation, *Applied Energy* 137 (2015) 511-536. doi:10.1016/J.APENERGY.2014.09.081.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0306261914010290>
- [3] W. A. van Schalkwijk, B. Scrosati (Eds.), *Advances in Lithium-Ion Batteries*, Springer US, Boston, MA, 2002. doi:10.1007/b113788.
- [4] C. Julien, A. Mauger, A. Vijn, K. Zaghbi, *Lithium Batteries*, Springer International Publishing, Cham, 2016. doi:10.1007/978-3-319-19108-9.
URL <http://link.springer.com/10.1007/978-3-319-19108-9>
- [5] M. Yoshio, R. J. Brodd, A. Kozawa (Eds.), *Lithium-Ion Batteries*, Springer New York, New York, NY, 2009. doi:10.1007/978-0-387-34445-4.
URL <http://link.springer.com/10.1007/978-0-387-34445-4>
- [6] R. A. Ríos, F. Arango, Estrategias de mitigación y métodos para la estimación de las emisiones de gases de efecto invernadero en el sector transporte, *Inf. téc.* (2013).
URL <https://publications.iadb.org/bitstream/handle/11319/3613/Estrategiasdemitigaci{ó}nym{é}todosparalaestimaci{ó}ndelasemisionesdegasesefecEnelsectortransporte..pdf?sequence=4>

- [7] S. Winkelman, A. Bishins, C. Kooshian, Planning for economic and environmental resilience, *Transportation Research Part A: Policy and Practice* 44 (8) (2010) 575–586. doi:10.1016/J.TRA.2010.03.011.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0965856410000509>
- [8] W. J. W. J. Mitchell, C. Borroni-Bird, L. D. Burns, *Reinventing the automobile : personal urban mobility for the 21st century*, Massachusetts Institute of Technology, 2010.
- [9] International Energy Agency, IEA Sankey Diagram.
URL <https://www.iea.org/sankey/>
- [10] E. A. Nanaki, C. J. Koroneos, Comparative economic and environmental analysis of conventional, hybrid and electric vehicles – the case study of Greece, *Journal of Cleaner Production* 53 (2013) 261–266. doi:10.1016/j.jclepro.2013.04.010.
- [11] E. F. Choma, C. M. L. Ugaya, Environmental impact assessment of increasing electric vehicles in the Brazilian fleet, *Journal of Cleaner Production* 152 (2017) 497–507. doi:10.1016/J.JCLEPRO.2015.07.091.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0959652615010203>
- [12] A. Pilkington, R. Dyerson, O. Tissier, The electric vehicle:: Patent data as indicators of technological development, *World Patent Information* 24 (1) (2002) 5–12. doi:10.1016/S0172-2190(01)00065-5.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0172219001000655>
- [13] International Energy Agency, *Global EV outlook 2018: towards cross-modal electrification*, Electric Vehicles Initiative (2018) 143doi:EIA-0383(2016).
- [14] S.-I. Sohn, J.-H. Oh, Y.-S. Lee, D.-H. Park, I.-K. Oh, Design of a Fuel-Cell-Powered Catamaran-Type Unmanned Surface Vehicle, *IEEE Journal of Oceanic Engineering* 40 (2) (2015) 388–396. doi:10.1109/JOE.2014.2315889.
URL <http://ieeexplore.ieee.org/document/6818449/>
- [15] G. Romeo, F. Borello, G. Correa, Setup and Test Flights of All-Electric Two-Seater Aeroplane Powered by Fuel Cells, *Journal of Aircraft* 48 (4) (2011) 1331–1341. doi:10.2514/1.C031271.
URL <http://arc.aiaa.org/doi/abs/10.2514/1.C031271>

- [16] World Energy Outlook 2016 (2016).
- [17] China is adding a London-sized electric bus fleet every five weeks | World Economic Forum (2018).
URL <https://www.weforum.org/agenda/2018/04/china-is-adding-a-london-sized-electric-bus-fleet-every-five-weeks/>
- [18] OECD/IEA, Hydrogen.
URL <https://www.iea.org/tcep/energyintegration/hydrogen/>
- [19] S. Mekhilef, R. Saidur, A. Safari, Comparative study of different fuel cell technologies, *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 16 (1) (2012) 981–989. doi:10.1016/J.RSER.2011.09.020.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1364032111004709>
- [20] A. Lajunen, T. Lipman, Lifecycle cost assessment and carbon dioxide emissions of diesel, natural gas, hybrid electric, fuel cell hybrid and electric transit buses, *Energy* 106 (2016) 329–342. doi:10.1016/j.energy.2016.03.075.
URL <http://dx.doi.org/10.1016/j.energy.2016.03.075><http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S036054421630319X>
- [21] T. Hua, R. Ahluwalia, L. Eudy, G. Singer, B. Jermer, N. Asselin-miller, S. Wessel, T. Patterson, J. Marcinkoski, Status of hydrogen fuel cell electric buses worldwide, *Journal of Power Sources* 269 (2014) 975–993. doi:10.1016/j.jpowsour.2014.06.055.
URL <http://dx.doi.org/10.1016/j.jpowsour.2014.06.055>
- [22] B. Lin, R. Tan, Are people willing to pay more for new energy bus fares?, *Energy* 130 (2017) 365–372. doi:10.1016/j.energy.2017.04.153.
URL <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0360544217307296>
- [23] K. Liu, J. Wang, T. Yamamoto, T. Morikawa, Modelling the multilevel structure and mixed effects of the factors influencing the energy consumption of electric vehicles, *Applied Energy* 183 (2016) 1351–1360. doi:10.1016/j.apenergy.2016.09.082.
- [24] G. J. Offer, D. Howey, M. Contestabile, R. Clague, N. P. Brandon, Comparative analysis of battery electric, hydrogen fuel cell and hybrid vehicles in a future sustainable road transport system, *Energy Policy* 38 (1) (2010) 24–29. doi:10.1016/j.enpol.2009.08.040.
URL <http://dx.doi.org/10.1016/j.enpol.2009.08.040>

- [25] C. E. Thomas, Fuel cell and battery electric vehicles compared, *International Journal of Hydrogen Energy* 34 (15) (2009) 6005–6020. doi:10.1016/j.ijhydene.2009.06.003.
URL <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijhydene.2009.06.003>
- [26] M. Weeda, R. Wurster, U. Bünger, G. Schaap, C. Wallmark, M. Floris, Towards a comprehensive hydrogen infrastructure for fuel cell electric cars in view of EU GHG reduction targets, en: *Fuel Cell Vehicle Demonstration and Hydrogen Infrastructure Project in Japan*, 2015.
- [27] S. Hardman, R. Steinberger-Wilckens, D. Van Der Horst, Disruptive innovations: The case for hydrogen fuel cells and battery electric vehicles (2013). doi:10.1016/j.ijhydene.2013.09.088.
- [28] E. C. McKenzie, P. L. Durango-Cohen, Environmental life-cycle assessment of transit buses with alternative fuel technology, *Transportation Research Part D: Transport and Environment* 17 (1) (2012) 39–47. doi:10.1016/j.trd.2011.09.008.
URL <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1361920911001179>
- [29] N. Sulaiman, M. Hannan, A. Mohamed, E. Majlan, W. Wan Daud, A review on energy management system for fuel cell hybrid electric vehicle: Issues and challenges, *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 52 (2015) 802–814. doi:10.1016/j.rser.2015.07.132.
- [30] N. Lebedeva, F. Di Persio, L. Brett, Lithium ion battery value chain and related opportunities for Europe, *Inf. téc.* (2016). doi:10.2760/6060.
URL <https://ec.europa.eu/jrc/en/publication/eur-scientific-and-technical-research-reports/lithium-ion-battery-value-chain-and-related-opportunities-europe>
- [31] A. K. Padhi, K. S. Nanjundaswamy, J. B. Goodenough, Phospho-olivines as Positive-Electrode Materials for Rechargeable Lithium Batteries, *Journal of The Electrochemical Society* 144 (4) (1997) 1188. doi:10.1149/1.1837571.
URL <http://jes.ecsdl.org/cgi/doi/10.1149/1.1837571>
- [32] V. Ramadesigan, P. W. C. Northrop, S. De, S. Santhanagopalan, R. D. Braatz, V. R. Subramanian, Modeling and simulation of lithium-ion batteries from a systems engineering perspective, *Journal of the Electrochemical Society* 159 (3) (2012) R31—R45.

- [33] A. Jokar, B. Rajabloo, M. Désilets, M. Lacroix, Review of simplified Pseudo-two-Dimensional models of lithium-ion batteries, *Journal of Power Sources* 327 (2016) 44–55. doi:10.1016/J.JPOWSOUR.2016.07.036.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378775316308916>
- [34] P. M. Munoz, E. W. Moschen, G. C. Perelmuter, L. Mathe, Selección y dimensionamiento de un vehículo eléctrico híbrido propulsado por celdas de combustible. Comparación y análisis con un vehículo de combustión interna, en: 2014 IEEE Biennial Congress of Argentina, ARGENCON 2014, 2014, págs. 804–809. doi:10.1109/ARGENCON.2014.6868592.
- [35] J. Newman, W. Tiedemann, Porous-electrode theory with battery applications, *AIChE Journal* 21 (1) (1975) 25–41. doi:10.1002/aic.690210103.
URL <http://doi.wiley.com/10.1002/aic.690210103>
- [36] M. Doyle, Modeling of Galvanostatic Charge and Discharge of the Lithium/Polymer/Insertion Cell, *Journal of The Electrochemical Society* 140 (6) (1993) 1526. doi:10.1149/1.2221597.
URL <http://jes.ecsdl.org/cgi/doi/10.1149/1.2221597>
- [37] M. Doyle, J. Newman, The use of mathematical modeling in the design of lithium/polymer battery systems, *Electrochimica Acta* 40 (13-14) (1995) 2191–2196. doi:10.1016/0013-4686(95)00162-8.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0013468695001628>
- [38] J. Newman, W. Tiedemann, Potential and Current Distribution in Electrochemical Cells, *Journal of The Electrochemical Society* 140 (7) (1993) 1961. doi:10.1149/1.2220746.
URL <http://jes.ecsdl.org/cgi/doi/10.1149/1.2220746>
- [39] B. Tjaden, S. J. Cooper, D. J. Brett, D. Kramer, P. R. Shearing, On the origin and application of the Bruggeman correlation for analysing transport phenomena in electrochemical systems, *Current Opinion in Chemical Engineering* 12 (2016) 44–51. doi:10.1016/J.COACHE.2016.02.006.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2211339816300119>
- [40] W. B. Gu, C. Y. Wang, Thermal-Electrochemical Coupled Modeling of a Lithium-ion Cell, en: S. Surampudi (Ed.), *Lithium Batteries: Proceedings of the International Symposium*, The Electrochemical society, Honolulu, 1999,

- págs. 748–762.
URL <http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/download?doi=10.1.1.539.9287&rep=rep1&type=pdf>
- [41] K. E. Thomas, J. Newman, Thermal Modeling of Porous Insertion Electrodes, *Journal of The Electrochemical Society* 150 (2) (2003) A176. doi:10.1149/1.1531194.
URL <http://jes.ecsdl.org/cgi/doi/10.1149/1.1531194>
- [42] L. Rao, J. Newman, Heat-Generation Rate and General Energy Balance for Insertion Battery Systems, *Journal of The Electrochemical Society* 144 (8) (1997) 2697. doi:10.1149/1.1837884.
URL <http://jes.ecsdl.org/cgi/doi/10.1149/1.1837884>
- [43] COMSOL Multiphysics® v. 5.4. www.comsol.com. COMSOL AB, Stockholm, Sweden.
- [44] M. Safari, C. Delacourt, Modeling of a Commercial Graphite/LiFePO₄ Cell, *Journal of The Electrochemical Society* 158 (5) (2011) A562. doi:10.1149/1.3567007.
URL <http://jes.ecsdl.org/cgi/doi/10.1149/1.3567007>
- [45] P. Ramadass, B. Haran, P. M. Gomadam, R. White, B. N. Popov, Development of First Principles Capacity Fade Model for Li-Ion Cells, *Journal of The Electrochemical Society* 151 (2) (2004) A196. doi:10.1149/1.1634273.
URL <http://jes.ecsdl.org/cgi/doi/10.1149/1.1634273>
- [46] K. E. Thomas, J. Newman, Heats of mixing and of entropy in porous insertion electrodes, *Journal of Power Sources* 119-121 (2003) 844–849. doi:10.1016/S0378-7753(03)00283-0.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378775303002830>
- [47] J. L. Dodd, Phase composition and dynamical studies of lithium iron phosphate, Tesis Doctoral (2007).
URL <https://thesis.library.caltech.edu/1662/>
- [48] T. F. Fuller, M. Doyle, J. Newman, Simulation and Optimization of the Dual Lithium Ion Insertion Cell, *Journal of the Electrochemical Society* 141 (1) (1994) 1–10.
- [49] P. Arora, M. Doyle, A. S. Gozdz, R. E. White, J. Newman, Comparison between computer simulations and experimental data for high-rate discharges of

- plastic lithium-ion batteries, *Journal of Power Sources* 88 (2) (2000) 219–231. doi:10.1016/S0378-7753(99)00527-3.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378775399005273>
- [50] V. Srinivasan, J. Newman, Discharge Model for the Lithium Iron-Phosphate Electrode, *Journal of The Electrochemical Society* 151 (10) (2004) A1517. doi:10.1149/1.1785012.
URL <http://jes.ecsdl.org/cgi/doi/10.1149/1.1785012>
- [51] NLOpt Documentation.
URL <https://nlopt.readthedocs.io>
- [52] M. Powell, The BOBYQA algorithm for bound constrained optimization without derivatives, *Cambridge NA Report* 6 (2009) 39. doi:10.1.1.443.7693.
URL <http://www6.cityu.edu.hk/rcms/publications/preprint26.pdf>
- [53] M. J. D. Powell, Beyond symmetric Broyden for updating quadratic models in minimization without derivatives, *Mathematical Programming* 138 (1-2) (2013) 475–500. doi:10.1007/s10107-011-0510-y.
URL <http://link.springer.com/10.1007/s10107-011-0510-y>
- [54] E. Prada, D. Di Domenico, Y. Creff, J. Bernard, V. Sauvant-Moynot, F. Huet, Simplified Electrochemical and Thermal Model of LiFePO₄ - Graphite Li-Ion Batteries for Fast Charge Applications, *Journal of The Electrochemical Society* 159 (9) (2012) A1508–A1519. doi:10.1149/2.064209jes.
URL <http://jes.ecsdl.org/lookup/doi/10.1149/2.064209jes>
- [55] A. Maheshwari, M. A. Dumitrescu, M. Destro, M. Santarelli, Inverse parameter determination in the development of an optimized lithium iron phosphate – Graphite battery discharge model, *Journal of Power Sources* 307 (2016) 160–172. doi:10.1016/J.JPOWSOUR.2015.12.111.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378775315307230#sec3>
- [56] Y. Seungho, K. Soo, K. Tae Young, N. Jin Hyun, C. Won Il, Model Prediction and Experiments for the Electrode Design Optimization of LiFePO₄/Graphite Electrodes in High Capacity Lithium-ion Batteries, *Bulletin of the Korean Chemical Society*. 34 (1).
URL http://journal.kcsnet.or.kr/main/j{}_search/j{}_abstract{}_view.htm?code=B130115&cpage=1&qpage=j{}_search&spage=j{}_search&journal=B&vol=34&no=

1{&}page={&}year1=2010{&}year2=2019{&}view=10{&}qpage=
j{ }search{&}abstract=

- [57] D. A. Stevens, J. R. Dahn, The Mechanisms of Lithium and Sodium Insertion in Carbon Materials, *Journal of The Electrochemical Society* 148 (8) (2001) A803. doi:10.1149/1.1379565.
URL <http://jes.ecsdl.org/cgi/doi/10.1149/1.1379565>
- [58] J. Li, Y. Cheng, M. Jia, Y. Tang, Y. Lin, Z. Zhang, Y. Liu, An electrochemical–thermal model based on dynamic responses for lithium iron phosphate battery, *Journal of Power Sources* 255 (2014) 130–143. doi:10.1016/J.JPOWSOUR.2014.01.007.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378775314000172>
- [59] I. V. Thorat, T. Joshi, K. Zaghib, J. N. Harb, D. R. Wheeler, Understanding Rate-Limiting Mechanisms in LiFePO₄ Cathodes for Li-Ion Batteries, *Journal of The Electrochemical Society* 158 (11) (2011) A1185. doi:10.1149/2.001111jes.
URL <http://jes.ecsdl.org/cgi/doi/10.1149/2.001111jes>
- [60] W. Wu, X. Xiao, X. Huang, The effect of battery design parameters on heat generation and utilization in a Li-ion cell, *Electrochimica Acta* 83 (2012) 227–240. doi:10.1016/J.ELECTACTA.2012.07.081.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0013468612012248>
- [61] A. Tourani, P. White, P. Ivey, A multi scale multi-dimensional thermo electrochemical modelling of high capacity lithium-ion cells, *Journal of Power Sources* 255 (2014) 360–367. doi:10.1016/J.JPOWSOUR.2014.01.030.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378775314000457>
- [62] S. Chen, C. Wan, Y. Wang, Thermal analysis of lithium-ion batteries, *Journal of Power Sources* 140 (1) (2005) 111–124. doi:10.1016/J.JPOWSOUR.2004.05.064.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378775304008596>
- [63] J. Nanda, S. K. Martha, W. D. Porter, H. Wang, N. J. Dudney, M. D. Radin, D. J. Siegel, Thermophysical properties of LiFePO₄ cathodes with carbonized pitch coatings and organic binders: Experiments and first-principles modeling, *Journal of Power Sources* 251 (2014) 8–13.

- doi:10.1016/J.JPOWSOUR.2013.11.022.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S037877531301848X>
- [64] S. Patrone Firma Paz, Desarrollan batería de litio para motos eléctricas | CONICET (2018).
URL <https://www.conicet.gov.ar/desarrollan-bateria-de-litio-para-motos-electricas>
- [65] M. Bellucci, Científicos argentinos desarrollaron una batería de litio desmontable para motos eléctricas - 14/08/2018 - Clarín.com (aug 2018).
URL <https://www.clarin.com/sociedad/bateria-litio-investigacion-00rkLt2uy.html>
- [66] V. Ingrassia, Investigadores argentinos desarrollan una innovadora batería de litio para motos eléctricas - Infobae (2018).
URL <https://www.infobae.com/tendencias/innovacion/2018/08/18/investigadores-argentinos-desarrollan-una-innovadora-bateria-de-litio-para-motos-electricas>
- [67] Y. Ji, Y. Zhang, C.-Y. Wang, Li-Ion Cell Operation at Low Temperatures, Journal of The Electrochemical Society 160 (4) (2013) A636–A649. doi:10.1149/2.047304jes.
URL <http://jes.ecsdl.org/lookup/doi/10.1149/2.047304jes>
- [68] T. Waldmann, M. Wilka, M. Kasper, M. Fleischhammer, M. Wohlfahrt-Mehrens, Temperature dependent ageing mechanisms in Lithium-ion batteries – A Post-Mortem study, Journal of Power Sources 262 (2014) 129–135. doi:10.1016/J.JPOWSOUR.2014.03.112.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0378775314004352>
- [69] K. Amine, J. Liu, I. Belharouak, High-temperature storage and cycling of C-LiFePO₄/graphite Li-ion cells, Electrochemistry Communications 7 (7) (2005) 669–673. doi:10.1016/J.ELECOM.2005.04.018.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1388248105001177>
- [70] F. Leng, C. M. Tan, M. Pecht, Effect of Temperature on the Aging rate of Li Ion Battery Operating above Room Temperature, Scientific Reports 5 (1) (2015) 12967. doi:10.1038/srep12967.
URL <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/26245922>
<http://www.pubmedcentral.nih.gov/articlerender.fcgi?artid=PMC4526891>
<http://www.nature.com/articles/srep12967>

- [71] R. Spotnitz, J. Franklin, Abuse behavior of high-power, lithium-ion cells, *Journal of Power Sources* 113 (1) (2003) 81–100. doi:10.1016/S0378-7753(02)00488-3.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0378775302004883>
- [72] G. Correa, P. Muñoz, T. Falaguerra, C. Rodriguez, Performance comparison of conventional, hybrid, hydrogen and electric urban buses using well to wheel analysis, *Energy* 141. doi:10.1016/j.energy.2017.09.066.
- [73] M. Wang, Fuel choices for fuel-cell vehicles: well-to-wheels energy and emission impacts, *Journal of Power Sources* 112 (1) (2002) 307–321. doi:10.1016/S0378-7753(02)00447-0.
- [74] P. Mizsey, E. Newson, Comparison of different vehicle power trains, *Journal of Power Sources* 102 (1-2) (2001) 205–209. doi:10.1016/S0378-7753(01)00802-3.
URL <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0378775301008023>
- [75] K. Simmons, Y. Guezennec, S. Onori, Modeling and energy management control design for a fuel cell hybrid, *Journal of Power Sources* 246 (2014) 736–746.
- [76] X. Hu, N. Murgovski, L. Johannesson, B. Egardt, Energy efficiency analysis of a series plug-in hybrid electric bus with different energy management strategies and battery sizes, *Applied Energy* 111 (2013) 1001–1009. doi:10.1016/j.apenergy.2013.06.056.
- [77] S. Campanari, G. Manzolini, F. Garcia de la Iglesia, Energy analysis of electric vehicles using batteries or fuel cells through well-to-wheel driving cycle simulations, *Journal of Power Sources* 186 (2) (2009) 464–477. doi:10.1016/j.jpowsour.2008.09.115.
- [78] M. Yazdanie, F. Noembrini, L. Dossetto, K. Boulouchos, A comparative analysis of well-to-wheel primary energy demand and greenhouse gas emissions for the operation of alternative and conventional vehicles in Switzerland, considering various energy carrier production pathways, *Journal of Power Sources* 249 (2014) 333–348. doi:10.1016/j.jpowsour.2013.10.043.
- [79] M. F. Torchio, M. G. Santarelli, Energy, environmental and economic comparison of different powertrain/fuel options using well-to-wheels assessment, energy and external costs - European market analysis, *Energy* 35 (10) (2010) 4156–4171. doi:10.1016/j.energy.2010.06.037.

- [80] A. Mari Svensson, S. Møller-Holst, R. Glöckner, O. Maurstad, Well-to-wheel study of passenger vehicles in the Norwegian energy system, *Energy* 32 (4) (2007) 437–445. doi:10.1016/j.energy.2006.07.029.
URL <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0360544206001939>
- [81] J. A. García Sánchez, J. M. López Martínez, J. Lumbreras Martín, M. N. Flores Holgado, Comparison of Life Cycle energy consumption and GHG emissions of natural gas, biodiesel and diesel buses of the Madrid transportation system, *Energy* 47 (1) (2012) 174–198. doi:10.1016/j.energy.2012.09.052.
URL <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0360544212007311>
- [82] A. Sharma, V. Strezov, Life cycle environmental and economic impact assessment of alternative transport fuels and power-train technologies, *Energy* 133 (2017) 1132–1141. doi:10.1016/j.energy.2017.04.160.
URL <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0360544217307375>
- [83] B. Zhou, Y. Wu, B. Zhou, R. Wang, W. Ke, S. Zhang, J. Hao, Real-world performance of battery electric buses and their life-cycle benefits with respect to energy consumption and carbon dioxide emissions, *Energy* 96 (2016) 603–613. doi:10.1016/j.energy.2015.12.041.
URL <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0360544215016837>
- [84] O. Karabasoglu, J. Michalek, Influence of driving patterns on life cycle cost and emissions of hybrid and plug-in electric vehicle powertrains, *Energy Policy* 60 (2013) 445–461. doi:10.1016/j.enpol.2013.03.047.
- [85] B. Ang, T. Fwa, A study on the fuel-consumption characteristics of public buses, *Energy* 14 (12) (1989) 797–803. doi:10.1016/0360-5442(89)90033-9.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360544289900339>
- [86] N. Di Sbroiavacca, G. Nadal, F. Lallana, J. Falzon, K. Calvin, Emissions reduction scenarios in the Argentinean Energy Sector, *Energy Economics* 56 (2016) 552–563. doi:10.1016/j.eneco.2015.03.021.
- [87] L. García, 4 – Hydrogen production by steam reforming of natural gas and other nonrenewable feedstocks, en: *Compendium of Hydrogen Energy*, 2015, págs. 83–107. doi:10.1016/B978-1-78242-361-4.00004-2.
- [88] J. Dufour, D. Serrano, J. Gálvez, J. Moreno, C. García, Life cycle assessment of processes for hydrogen production. Environmental feasibility and reduction of greenhouse gases emissions, *International Journal of Hydrogen Energy* 34 (3) (2009) 1370–1376. doi:10.1016/j.ijhydene.2008.11.053.

- [89] B. Ewan, R. Allen, A figure of merit assessment of the routes to hydrogen, *International Journal of Hydrogen Energy* 30 (8) (2005) 809–819. doi:10.1016/j.ijhydene.2005.02.003.
- [90] Descargas de Informes, CAMMESA.
URL <http://portalweb.cammesa.com/memnet1/Pages/descargas.aspx>
- [91] Worldbank, Electric power transmission and distribution losses (% of output) | Data.
URL <https://data.worldbank.org/indicator/EG.ELC.LOSS.ZS>
- [92] I. P. y. S. Cameron, Daniel (Secretaría de Energía, Ministerio de Planificación Federal, Resolución N° 1125/2013, Secretaría de Energía, Ministerio de Planificación Federal, Inversión Pública y Servicios. (2013).
URL <http://servicios.infoleg.gob.ar/infolegInternet/anexos/220000-224999/224799/norma.htm>
- [93] I. Ambat, V. Srivastava, M. Sillanpää, Recent advancement in biodiesel production methodologies using various feedstock: A review, *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 90 (2018) 356–369. doi:10.1016/J.RSER.2018.03.069.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1364032118301588{s0040>
- [94] A. Talebian-Kiakalaieh, N. A. S. Amin, H. Mazaheri, A review on novel processes of biodiesel production from waste cooking oil, *Applied Energy* 104 (2013) 683–710. doi:10.1016/J.APENERGY.2012.11.061.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0306261912008665{b0145>
- [95] P. Correa, D. Fernandez, M. Gaudiano, L. Mathe, E. Moschen, P. Munoz, Sizing and optimal energy management in an electric vehicle with fuel cell using dynamic vehicle models | Dimensionamiento y gestión de la energía óptimos en un vehículo eléctrico a pila de combustible utilizando modelos dinámicos del vehículo, en: 2014 IEEE Biennial Congress of Argentina, ARGENCON 2014, 2014. doi:10.1109/ARGENCON.2014.6868590.
- [96] G. Correa, M. Santarelli, F. Borello, E. Cestino, G. Romeo, Flight test validation of the dynamic model of a fuel cell system for ultra-light aircraft, *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part G: Journal of Aerospace Engineering* 229 (5) (2015) 917–932. doi:10.1177/0954410014541081.
URL <http://pig.sagepub.com/lookup/doi/10.1177/0954410014541081>

- [97] G. Correa, F. Borello, M. Santarelli, Sensitivity analysis of stack power uncertainty in a PEMFC-based powertrain for aircraft application, *International Journal of Hydrogen Energy* 40 (32) (2015) 10354–10365. doi:10.1016/j.ijhydene.2015.05.133.
- [98] T. Markel, A. Brooker, T. Hendricks, V. Johnson, K. Kelly, B. Kramer, M. O’Keefe, S. Sprik, K. Wipke, ADVISOR: a systems analysis tool for advanced vehicle modeling, *Journal of Power Sources* 110 (2) (2002) 255–266. doi:10.1016/S0378-7753(02)00189-1.
URL <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0378775302001891>
- [99] G. Correa, F. Borello, M. Santarelli, Sensitivity analysis of temperature uncertainty in an aircraft PEM fuel cell, *International Journal of Hydrogen Energy* 36 (22) (2011) 14745–14758. doi:10.1016/j.ijhydene.2011.08.036.
- [100] M. Saxe, A. Folkesson, P. Alvfors, Energy system analysis of the fuel cell buses operated in the project: Clean Urban Transport for Europe, *Energy* doi:10.1016/j.energy.2008.01.001.
- [101] G. Romeo, F. Borello, G. Correa, E. Cestino, ENFICA-FC: Design of transport aircraft powered by fuel cell & flight test of zero emission 2-seater aircraft powered by fuel cells fueled by hydrogen, *International Journal of Hydrogen Energy* 38 (1) (2013) 469–479. doi:10.1016/j.ijhydene.2012.09.064.
URL <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0360319912021027>
- [102] G. Romeo, G. Correa, F. Borello, E. Cestino, M. Santarelli, Air Cooling of a Two-Seater Fuel Cell-Powered Aircraft: Dynamic Modeling and Comparison with Experimental Data, *Journal of Aerospace Engineering* 25 (3) (2012) 356–368. doi:10.1061/(ASCE)AS.1943-5525.0000138.
URL [http://ascelibrary.org/doi/10.1061/\(ASCE\)AS.1943-5525.0000138](http://ascelibrary.org/doi/10.1061/(ASCE)AS.1943-5525.0000138)
<http://ascelibrary.org/doi/10.1061/{%}28ASCE{%}29AS.1943-5525.0000138>
- [103] T. Mahlia, S. Tohno, T. Tezuka, A review on fuel economy test procedure for automobiles: Implementation possibilities in Malaysia and lessons for other countries, *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 16 (6) (2012) 4029–4046. doi:10.1016/j.rser.2012.03.032.
- [104] U. Diego-Ayala, An Investigation into Hybrid Power Trains for vehicles with regenerative braking, *Mechanical Engineering* 240 (February) (2007) 240.

- [105] M. G. Santarelli, M. F. Torchio, P. Cochis, Parameters estimation of a PEM fuel cell polarization curve and analysis of their behavior with temperature, *Journal of Power Sources* 159 (2) (2006) 824–835. doi:10.1016/j.jpowsour.2005.11.099.
URL <http://www.scopus.com/inward/record.url?eid=2-s2.0-33748032089&partnerID=tZ0tx3y1>
- [106] T. Zawodzinski, M. Neeman, L. O. Sillerud, S. Gottesfeld, Determination of water diffusion coefficients in perfluorosulfonate ionomeric membranes, *J. phys. Chem.* 95 (1991) 6040.
- [107] J. C. Amphlett, R. F. Mann, B. A. Peppley, C. P. Thurgood, Application of Butler–Volmer equations in the modelling of activation polarization for PEM fuel cells, *Journal of Power Sources* 161, Issu (2006) 775–781.
- [108] J. Amphlett, R. Baumert, R. Mann, B. Peppley, P. Roberge, Performance Modeling of the Ballard Mark IV Solid Polymer Electrolyte Fuel Cell 142 (1). doi:10.1149/1.2043959.
- [109] T. E. Springer, T. a. Zawodzinski, S. Gottesfeld, Polymer electrolyte fuel cell model, *Journal of the Electrochemical Society* 138 (8) (1991) 2334–2342. doi:10.1149/1.2085971.
URL <http://jes.ecsdl.org/content/138/8/2334.short%}5Cnhttp://jes.ecsdl.org/content/138/8/2334.abstract>
- [110] K. Hacatoglu, I. Dincer, M. A. Rosen, Sustainability of a wind-hydrogen energy system: Assessment using a novel index and comparison to a conventional gas-fired system, *International Journal of Hydrogen Energy* 41 (19) (2016) 8376–8385. doi:10.1016/j.ijhydene.2016.01.135.
URL <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0360319916002123>
- [111] US-EPA, National Ambient Air Quality Standards, Inf. téc. (2014).
URL <http://epa.gov/air/criteria.html>
- [112] M. K. Hidrue, G. R. Parsons, Is there a near-term market for vehicle-to-grid electric vehicles?, *Applied Energy* 151 (2015) 67–76. doi:10.1016/j.apenergy.2015.04.051.
- [113] J.-H. Jang, W.-M. Yan, H.-C. Chiu, J.-Y. Lui, Dynamic cell performance of kW-grade proton exchange membrane fuel cell stack with dead-ended anode, *Applied Energy* 142 (2015) 108–114. doi:10.1016/j.apenergy.2014.12.073.

- [114] M. Mahmoud, R. Garnett, M. Ferguson, P. Kanaroglou, Electric buses: A review of alternative powertrains, *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 62 (2016) 673–684. doi:10.1016/j.rser.2016.05.019.
- [115] M. Ball, M. Weeda, The hydrogen economy – Vision or reality?, *International Journal of Hydrogen Energy* 40 (25) (2015) 7903–7919. doi:10.1016/j.ijhydene.2015.04.032.
- [116] S. Sprik, J. Kurtz, G. Saur, S. Onorato, M. Ruple, C. Ainscough, Next Generation Hydrogen Station Composite Data Products: Retail Stations, Data through Quarter 4 of 2017, *Inf. téc.* (2017).
URL <https://www.nrel.gov/docs/fy18osti/71645.pdf>
- [117] L. Eudy, M. Post, BC Transit Fuel Cell Bus Project Evaluation Results: Second Report, *Inf. téc.* (2014).
URL <https://www.nrel.gov/docs/fy14osti/62317.pdf>
- [118] A. Lajunen, Lifecycle costs and charging requirements of electric buses with different charging methods, *Journal of Cleaner Production* 172 (2018) 56–67. doi:10.1016/J.JCLEPRO.2017.10.066.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0959652617323594?via=ihub>
- [119] Z. Chen, Y. Yin, Z. Song, A cost-competitiveness analysis of charging infrastructure for electric bus operations, *Transportation Research Part C: Emerging Technologies* 93 (2018) 351–366. doi:10.1016/J.TRC.2018.06.006.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0968090X18308465?#s0060>
- [120] J. Shi, Y. Liu, Y. Tang, J. Deng, Application of a hybrid energy storage system in the fast charging station of electric vehicles, *IET Generation, Transmission & Distribution* 10 (4) (2016) 1092–1097. doi:10.1049/iet-gtd.2015.0110.
URL <http://digital-library.theiet.org/content/journals/10.1049/iet-gtd.2015.0110>
- [121] Minas e Energia.
URL <http://www.mme.gov.br/web/guest/secretarias/energia-eletrica/publicacoes/boletim-de-monitoramento-do-sistema-eletrico/boletins-2018>
- [122] C. Cristina, S. Moore, E. E. Rego, L. Kulay, The Brazilian Electricity Supply for 2030: A Projection Based on Economic, Environmental and Technical Criteria 7 (4) (2017) 17–29. doi:10.5539/enrr.v7n4p17.

- [123] D. R. Raimundo, I. F. S. dos Santos, G. L. Tiago Filho, R. M. Barros, Evaluation of greenhouse gas emissions avoided by wind generation in the Brazilian energetic matrix: A retroactive analysis and future potential, *Resources, Conservation and Recycling* 137 (2018) 270–280. doi:10.1016/J.RESCONREC.2018.06.020.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0921344918302404>
- [124] Law 13.263.
URL <http://pesquisa.in.gov.br/imprensa/jsp/visualiza/index.jsp?data=24/03/2016{&}jornal=1{&}pagina=1{&}totalArquivos=112>
- [125] P. André Cremonez, M. Feroldi, W. César Nadaleti, E. de Rossi, A. Feiden, M. P. de Camargo, F. E. Cremonez, F. F. Klajn, Biodiesel production in Brazil: Current scenario and perspectives, *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 42 (2015) 415–428. doi:10.1016/j.rser.2014.10.004.
URL <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1364032114008211>
- [126] D. Hotza, J. Diniz da Costa, Fuel cells development and hydrogen production from renewable resources in Brazil, *International Journal of Hydrogen Energy* 33 (19) (2008) 4915–4935. doi:10.1016/J.IJHYDENE.2008.06.028.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360319908007428>
- [127] Reportes – Energía Abierta | Comisión Nacional de Energía.
URL <http://energiaabierta.cl/reportes/>
- [128] C. R. Gómez, S. Arango-Aramburo, E. R. Larsen, Construction of a Chilean energy matrix portraying energy source substitution: A system dynamics approach, *Journal of Cleaner Production* 162 (2017) 903–913. doi:10.1016/j.jclepro.2017.06.111.
- [129] B. Bezerra, S. Mocarquer, L. Barroso, H. Rudnick, Expansion Pressure: Energy Challenges in Brazil and Chile, *IEEE Power and Energy Magazine* 10 (3) (2012) 48–58. doi:10.1109/MPE.2012.2188665.
URL <http://ieeexplore.ieee.org/document/6185787/>
- [130] C. Gaete-Morales, A. Gallego-Schmid, L. Stamford, A. Azapagic, Assessing the environmental sustainability of electricity generation in Chile, *Science of The Total Environment* 636 (2018) 1155–1170. doi:10.1016/J.SCITOTENV.2018.04.346.

- URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0048969718315298>
- [131] DTO-11 09-MAY-2008 MINISTERIO DE ECONOMÍA, FOMENTO Y RECONSTRUCCIÓN, SUBSECRETARIA DE ECONOMIA, FOMENTO Y ECONSTRUCCION - Ley Chile - Biblioteca del Congreso Nacional.
URL <https://www.leychile.cl/Navegar?idNorma=271031>
- [132] Producing ammonia and fertilizers: new opportunities from renewables.
URL <https://www.iea.org/media/news/2017/Fertilizer{ }manufacturing{ }Renewables{ }01102017.pdf>
- [133] P. Muñoz, G. Correa, M. Gaudiano, D. Fernández, Energy management control design for fuel cell hybrid electric vehicles using neural networks, *International Journal of Hydrogen Energy* 42 (48). doi:10.1016/j.ijhydene.2017.09.169.
- [134] S. Kang, K. Min, Dynamic simulation of a fuel cell hybrid vehicle during the federal test procedure-75 driving cycle, *Applied Energy* 161 (2016) 181–196. doi:10.1016/j.apenergy.2015.09.093.
- [135] G. Correa, F. Borello, M. Santarelli, Sensitivity analysis of temperature uncertainty in an aircraft PEM fuel cell, *International Journal of Hydrogen Energy* 36 (22) (2011) 14745–14758. doi:10.1016/j.ijhydene.2011.08.036.
URL <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0360319911019239>
- [136] D. Feroldi, M. Serra, J. Riera, Energy Management Strategies based on efficiency map for Fuel Cell Hybrid Vehicles, *Journal of Power Sources* 190 (2) (2009) 387–401. doi:10.1016/j.jpowsour.2009.01.040.
- [137] M. Sorrentino, C. Pianese, M. Maiorino, An integrated mathematical tool aimed at developing highly performing and cost-effective fuel cell hybrid vehicles, *Journal of Power Sources* 221 (221) (2013) 308–317. doi:10.1016/j.jpowsour.2012.08.001.
URL <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0378775312012591>
- [138] Y. Wang, K. S. Chen, J. Mishler, S. C. Cho, X. C. Adroher, A review of polymer electrolyte membrane fuel cells: Technology, applications, and needs on fundamental research, *Applied Energy* 88 (4) (2011) 981–1007. doi:10.1016/j.apenergy.2010.09.030.
- [139] Y. Tang, W. Yuan, M. Pan, Z. Li, G. Chen, Y. Li, Experimental investigation of dynamic performance and transient responses of a kW-class PEM fuel cell

- stack under various load changes, *Applied Energy* 87 (4) (2010) 1410–1417. doi:10.1016/j.apenergy.2009.08.047.
- [140] Z. Chen, R. Xiong, C. Wang, J. Cao, An on-line predictive energy management strategy for plug-in hybrid electric vehicles to counter the uncertain prediction of the driving cycle, *Applied Energy* 185 (2017) 1663–1672. doi:10.1016/j.apenergy.2016.01.071.
- [141] K. Ettahir, L. Boulon, K. Agbossou, Optimization-based energy management strategy for a fuel cell/battery hybrid power system, *Applied Energy* 163 (2016) 142–153. doi:10.1016/j.apenergy.2015.10.176.
URL <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S030626191501418X>
- [142] M. J. Kim, H. Peng, Power management and design optimization of fuel cell/battery hybrid vehicles, *Journal of Power Sources* 165 (2) (2007) 819–832. doi:10.1016/j.jpowsour.2006.12.038.
- [143] Z. Song, J. Li, X. Han, L. Xu, L. Lu, M. Ouyang, H. Hofmann, Multi-objective optimization of a semi-active battery/supercapacitor energy storage system for electric vehicles, *Applied Energy* 135 (2014) 212–224. doi:10.1016/j.apenergy.2014.06.087.
URL <http://dx.doi.org/10.1016/j.apenergy.2014.06.087>
- [144] C. Xie, J. M. Ogden, S. Quan, Q. Chen, Optimal power management for fuel cell-battery full hybrid powertrain on a test station, *International Journal of Electrical Power and Energy Systems* 53 (1) (2013) 307–320. doi:10.1016/j.ijepes.2013.05.016.
URL <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijepes.2013.05.016>
- [145] L. Xu, M. Ouyang, J. Li, F. Yang, Dynamic Programming Algorithm for minimizing operating cost of a PEM fuel cell vehicle, *Industrial Electronics (ISIE), 2012 IEEE International Symposium on* (2012) 1490–1495.
- [146] A. Ravey, R. Roche, B. Blunier, A. Miraoui, Combined optimal sizing and energy management of hybrid electric vehicles, en: *2012 IEEE Transportation Electrification Conference and Expo (ITEC)*, no. 5, IEEE, 2012, págs. 1–6. doi:10.1109/ITEC.2012.6243420.
URL <http://ieeexplore.ieee.org/lpdocs/epic03/wrapper.htm?arnumber=6243420>
- [147] L. Barelli, G. Bidini, A. Ottaviano, Optimization of a PEMFC/battery pack power system for a bus application, *Applied Energy* 97 (2012) 777–784. doi:

- 10.1016/j.apenergy.2011.11.043.
URL <http://dx.doi.org/10.1016/j.apenergy.2011.11.043>
- [148] D. Fares, R. Chedid, F. Panik, S. Karaki, R. Jabr, Dynamic programming technique for optimizing fuel cell hybrid vehicles, *International Journal of Hydrogen Energy* 40 (24) (2015) 7777–7790. doi:10.1016/j.ijhydene.2014.12.120.
URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360319914035526>
- [149] R. Cipollone, D. Di Battista, M. Marchionni, C. Villante, Model based design and optimization of a fuel cell electric vehicle, *Energy Procedia* 45 (2014) 71–80. doi:10.1016/j.egypro.2014.01.009.
URL <http://dx.doi.org/10.1016/j.egypro.2014.01.009>
- [150] S. Ahmadi, S. Bathaee, Multi-objective genetic optimization of the fuel cell hybrid vehicle supervisory system: Fuzzy logic and operating mode control strategies, *International Journal of Hydrogen Energy* 40 (36) (2015) 12512–12521. doi:10.1016/j.ijhydene.2015.06.160.
URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360319915016894>
- [151] G. Xu, W. Li, K. Xu, Z. Song, An intelligent regenerative braking strategy for electric vehicles, *Energies* 4 (9) (2011) 1461–1477. doi:10.3390/en4091461.
- [152] Z. Chen, C. C. Mi, B. Xia, C. You, Energy management of power-split plug-in hybrid electric vehicles based on simulated annealing and Pontryagin's minimum principle, *Journal of Power Sources* 272 (2014) 160–168. doi:<http://dx.doi.org/10.1016/j.jpowsour.2014.08.057>.
URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378775314013123>
- [153] L. Xu, M. Ouyang, J. Li, F. Yang, L. Lu, J. Hua, Application of Pontryagin's Minimal Principle to the energy management strategy of plugin fuel cell electric vehicles, *International Journal of Hydrogen Energy* 38 (24) (2013) 10104–10115. doi:10.1016/j.ijhydene.2013.05.125.
URL <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijhydene.2013.05.125>
- [154] C. H. Zheng, N. W. Kim, Y. I. Park, W. S. Lim, S. W. Cha, G. Q. Xu, The effect of battery temperature on total fuel consumption of fuel cell hybrid vehicles, *International Journal of Hydrogen Energy* 38 (13) (2013) 5192–5200. doi:10.1016/j.ijhydene.2013.02.048.

- [155] C. Liu, L. Liu, Optimal power source sizing of fuel cell hybrid vehicles based on Pontryagin's minimum principle, *International Journal of Hydrogen Energy* 40 (26) (2015) 8454–8464. doi:10.1016/j.ijhydene.2015.04.112.
- [156] K. Ettahir, M. Higueta Cano, L. Boulon, K. Agbossou, Design of an adaptive EMS for fuel cell vehicles, *International Journal of Hydrogen Energy* 42 (2) (2017) 1481–1489. doi:10.1016/j.ijhydene.2016.07.211.
URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360319916306929>
- [157] J. Bernard, S. Delprat, F. Buechi, T. Guerra, Global Optimisation in the power management of a Fuel Cell Hybrid Vehicle (FCHV), en: 2006 IEEE Vehicle Power and Propulsion Conference, IEEE, 2006, págs. 1–6. doi:10.1109/VPPC.2006.364289.
URL <http://ieeexplore.ieee.org/document/4211317/>
- [158] S. Delprat, J. Lauber, T. Guerra, J. Rimaux, Control of a Parallel Hybrid Powertrain: Optimal Control, *IEEE Transactions on Vehicular Technology* 53 (3) (2004) 872–881. doi:10.1109/TVT.2004.827161.
URL <http://ieeexplore.ieee.org/document/1300877/>
- [159] T. Barlow, S. Latham, I. McCrae, P. Boulter, A reference book of driving cycles for use in the measurement of road vehicle emissions, TRL Published Project Report doi:10.1108/WJSTSD-06-2014-0009.
- [160] NREL, Drive Cycle Analysis Tool — DriveCAT | NREL.
URL <https://www.nrel.gov/transportation/drive-cycle-tool/>
- [161] M. André, The {ARTEMIS} European driving cycles for measuring car pollutant emissions, *Science of The Total Environment* 334–335 (2004) 73–84. doi:http://dx.doi.org/10.1016/j.scitotenv.2004.04.070.
URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0048969704003584>
- [162] M. J. D. Powell, The BOBYQA algorithm for bound constrained optimization without derivatives, Cambridge NA Report NA2009/06, University of Cambridge, Cambridge.
- [163] D. P. Bertsekas, *Nonlinear programming*, Athena Scientific, 1999.
- [164] J.-F. Bonnans, J. C. Gilbert, C. Lemaréchal, C. A. Sagastizábal, *Numerical optimization: theoretical and practical aspects*, Springer Science & Business Media, 2006.

- [165] H. T. Siegelmann, B. G. Horne, C. L. Giles, Computational capabilities of recurrent NARX neural networks, *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics, Part B: Cybernetics* 27 (2) (1997) 208–215. doi:10.1109/3477.558801.
URL <http://ieeexplore.ieee.org/document/558801/>