

MÁSTER UNIVERSITARIO EN INGENIERÍA DE MATERIALES AVANZADOS

TRABAJO FIN DE MÁSTER

MATERIALES Y MODELO DE SIMULACIÓN DE UNA HIDROLINERA



Estudiante: Lopez Ramos Manex

Directora: Jone Muñoz Ugartemendia

Codirector: Luis Matey Muñoz

Curso: <2023-2024>

Fecha: <Bilbao, 1 de Marzo de 2024>

Laburpena

Lan honek, erregai fosilen alternatiba energetikoa diren erregai zelulen ibilgailuentan, hidrogenoa hornitzeko sistema optimizatzeko erronkari heltzen dio. Hidrogenoak berez dituen abantailak gorabehera, hala nola era garbi batean ekoizteko eta kontsumitzeko gaitasuna, edota gaur egun erregai tradizionalak baliatzeko moduarekin eduki ditzakeen antzekotasunak, bere inplementazioak oztopo handiak ditu. Besteak beste, dentsitate energetiko baxua, biltegitzeari eta garraioari lotutako erronkak, materialetan eragindako kalteak edo sintesi, konpresio, eta abarretatik prozesuetatik eratorritako energia-kostu handiak dira horietako batzuk. Erronka horiek gainditzea beraz, funtsezkoa da hidrogenoaren epe luzeko bideragarritasunerako, garraioaren eta mugikortasunaren sektorean. Testuinguru horretan, hidrogenoa hornitzeko ziklorako eredu konputazionalen diseinuan eta azterketan oinarritzen da azterlana, eta gaur egungo teknologiak proposatutako berrikuntza batzuekin alderatzen ditu. Zuzeneko konpresioa eta ur-jauziko konpresioa arkitekturak aztertzen dira, eta aldaketak planteatzen dira betetze-protokoloetan eta sistemaren konimagenzioan. Emaitzen arabera, hobekuntzak nabarmenak izan dira, eta kasu batzuetan eraginkortasuna %30eraino handitu da. Beste batzuetan diseinua eta azpiegitura sinplifikatu dira. Erabilitako metodologiak eredu konputazionalen balioztatze zorrotza barne hartzen du, erabilitako kalkulu-metodoen azterketa teoriko zehatz bat eginez. Ikuspegi horrek lortutako emaitzen fidagarritasuna bermatzen du, eta, batez ere, konimagenzio eta protokolo erregaien arteko konparaketa ahalbidetzen du. Aurkikuntzek jarrera argiak erakusten dituzte, eta horietatik ondorio baliotsuak atera daitezke hidrogena hornitzeko prozesua optimizatzeko moduaren inguruan. Ebaluatutako eredu konparaketa zehatza aurkezteaz gain, dokumentuak, amaitzeko, konimagenzio bakoitzerako ohar zehatzak ematen ditu, bai eta hidrogeno-hornikuntzaren teknologiaren egungo egoerari eta etorkizuneko perspektibei buruzko ondorio orokorrak ere. Ondorio horiek egungo erronkak gainditzeko irtenbide berritzaileak bilatzen jarraitzearen garrantzia azpimarratzen dute, etorkizuneko ikerketetarako interesgune zehatzak nabarmenduz.

Hitz-gakoak: *hidrogeno hornidura, hidrogeno geltokia, hidrogeno aurre-hoztea, hidrogeno konpresioa, efizientzia energetikoa, modelizazioa*

Resumen

El presente trabajo aborda el desafío de optimizar el sistema de suministro de hidrógeno para vehículos de pila de combustible, una alternativa energética prometedora frente a los combustibles fósiles. A pesar de las ventajas inherentes al hidrógeno, como su potencial para ser producido de manera sostenible y su modo de empleo, similar al que se conoce hoy en día con los combustibles tradicionales enfrenta obstáculos significativos. Entre estos se incluyen su baja densidad energética, los desafíos asociados con el almacenamiento y transporte, la fragilización de materiales y los elevados costos energéticos derivados de los procesos de síntesis y compresión. Superar estos retos es crucial para la viabilidad a largo plazo del hidrógeno como vector energético en el sector del transporte y la movilidad. En este contexto, el estudio se centra en el diseño y análisis de modelos computacionales para el ciclo de repostaje de hidrógeno, comparando tecnologías actuales con innovaciones propuestas. Se examinan en detalle las arquitecturas de compresión directa y de repostaje en cascada, implementando modificaciones en los protocolos de llenado y en la configuración del sistema. Los resultados indican mejoras significativas, alcanzando un incremento de hasta el 30 % en

la eficiencia en ciertos casos, así como una simplificación del diseño y la infraestructura en otros. La metodología empleada incluye una rigurosa validación de los modelos computacionales, con análisis teóricos detallados de los métodos de cálculo utilizados. Esta aproximación asegura la fiabilidad de los resultados obtenidos, permitiendo sobre todo una comparación exhaustiva entre diferentes configuraciones y protocolos de repostaje. Los hallazgos revelan tendencias claras, con las que se pueden extraer conclusiones valiosas sobre cómo se podría intentar optimizar el proceso de suministro de hidrógeno. Además de presentar una comparativa detallada de los modelos evaluados, el documento concluye con observaciones específicas para cada configuración, así como conclusiones generales sobre el estado actual y las perspectivas futuras de la tecnología de suministro de hidrógeno. Estas conclusiones subrayan la importancia de continuar explorando soluciones innovadoras para superar los desafíos existentes, destacando áreas específicas de interés para investigaciones futuras.

Palabras clave: *reabastecimiento de hidrógeno; estación de hidrógeno; pre-enfriamiento de hidrógeno; compresión de hidrógeno; eficiencia energética; modelado*

Abstract

The present work addresses the challenge of optimizing the hydrogen supply system for fuel cell vehicles, a promising energy alternative to fossil fuels. Despite the inherent advantages of hydrogen, such as its potential to be produced sustainably and its mode of use, similar to that known today with traditional fuels, it faces significant obstacles. These include its low energy density, challenges associated with storage and transportation, material embrittlement, and the high energy costs derived from synthesis and compression processes. Overcoming these challenges is crucial for the long-term viability of hydrogen as an energy vector in the transportation and mobility sector. In this context, the study focuses on the design and analysis of computational models for the hydrogen refueling cycle, comparing current technologies with proposed innovations. The architectures of direct compression and cascade refueling are examined in detail, implementing modifications in the filling protocols and in the system configuration. The results indicate significant improvements, achieving an increase of up to 30% in efficiency in certain cases, as well as a simplification of the design and infrastructure in others. The methodology employed includes a rigorous validation of the computational models, with detailed theoretical analysis of the calculation methods used. This approach ensures the reliability of the obtained results, allowing above all a comprehensive comparison between different configurations and refueling protocols. The findings reveal clear trends, from which valuable conclusions can be drawn about how the hydrogen supply process could be optimized. In addition to presenting a detailed comparison of the evaluated models, the document concludes with specific observations for each configuration, as well as general conclusions about the current state and future prospects of hydrogen supply technology. These conclusions underline the importance of continuing to explore innovative solutions to overcome existing challenges, highlighting specific areas of interest for future research.

Keywords: *hydrogen refueling process; hydrogen station; hydrogen pre-cooling; hydrogen compression; energy efficiency; modeling*

Índice

1. Introducción	11
2. Contexto	11
3. Objetivos y alcance	14
4. Beneficios	15
5. Descripción de los requerimientos	16
6. Estado del arte	19
6.1. Producción	19
6.1.1. Electrólisis del Agua	19
6.1.2. Extracción de hidrógeno a partir de hidrocarburos	20
6.1.3. Gasificación de Biomasa	20
6.2. Infraestructura de distribución	21
6.3. Almacenamiento	22
6.4. Modelos informáticos y simulaciones	23
7. Fundamentos teóricos	25
7.1. Principios físicos del hidrógeno	25
7.1.1. La molécula H_2	26
7.1.2. Isómeros de espín	27
7.1.3. Propiedades termodinámicas	29
7.1.4. Efecto Joule-Thomson	32
7.1.5. Permeación	33
8. Modelización y cálculos	34
8.1. Fundamentos de <i>Simscape fluids</i>	34
8.1.1. Balances generales de masa y energía	37
8.2. Depósitos	38
8.3. Compresor	41
8.3.1. Descripción general	41
8.3.2. Aplicación matemática	43
8.4. Intercambiador de calor	47
8.4.1. Descripción general	47
8.4.2. Aplicación matemática	48
8.5. Válvulas de control, aislamiento y antirretorno	50
8.5.1. Aplicación matemática	51
8.5.2. Sistema de control lógico	53
8.6. Solucionadores	55
8.7. Simplificaciones	63
8.7.1. Pérdidas de carga	63
8.7.2. Transmisiones de calor con la atmósfera	64

8.7.3. Efecto de la dinámica térmica en la pared del intercambiador de calor	66
9. Análisis de los resultados	67
9.1. Observaciones preliminares	67
9.1.1. Ubicación relativa de las válvulas de control	70
9.2. Descripción de los modelos finales	72
9.2.1. Modelo principal	72
9.2.2. Modelo de presurización en cascada	73
9.2.3. Modelo con presurización líquida o presurización inicial. Los tanques de alta presión o <i>buffers</i> , a pesar de estar representados en un único bloque acostumbra a ser grupos de 3 o más depósitos a diferentes presiones.	74
9.2.4. Modelo de refrigeración cruzada	75
9.2.5. Modelo completo	76
9.3. Tiempo de finalización	77
9.4. Comportamiento de los tanques de almacenamiento	78
9.5. Comportamiento de los sistemas de compresión	81
9.5.1. Fenómeno de caída de la potencia	81
9.5.2. Potencia y energía	81
9.6. Comportamiento de las válvulas de control	86
9.6.1. Fracción de apertura: vista general del funcionamiento	86
9.6.2. Caída de presión en las válvulas	88
9.7. Comportamiento del intercambiador de calor	90
9.7.1. Presión y temperatura	91
9.7.2. Energía y potencia	93
9.8. Análisis de las propiedades en el vehículo y energía consumida en total	96
9.8.1. Presión y temperatura	96
9.8.2. SOC, APRR y caudal másico	99
9.8.3. Energía total consumida	102
10. Conclusiones	104
10.1. Conclusiones generales	104
10.2. Conclusiones específicas	104
11. Propuestas de cara al futuro	105
11.0.1. Aproximación empírica	105
11.0.2. Presurización flash	108
11.0.3. Diseño detallado del compresor	108
11.0.4. Sistema de implementación de la refrigeración en el depósito en el modelo de refrigeración cruzada	109
A. Anexo I: Conceptualización de la máquina de estados	110
B. Anexo II: Datos termodinámicos empleados para el H_2	111
C. Anexo III: Presión y temperatura del gas en las diferentes etapas del compresor y las válvulas	114

D. Anexo IV: Coste energético, SOC y tiempo de repostaje calculado para todo el rango de condiciones iniciales 123

Índice de figuras

1.	a), incremento de los artículos relacionados con el repostaje de hidrógeno escritos en revistas indexadas encontradas mediante búsquedas en WoS y en Scopus. b), Incremento de la cantidad de hidrolíneas activas en todo el mundo.	13
2.	Diagrama de fases para el hidrógeno. Las líneas sólidas corresponden a las transiciones de fase, las líneas de puntos representan los cambios de fase según [50]. Las líneas discontinuas representan los cambios en fase sólida.[51]	27
3.	Composición de equilibrio de los isómeros <i>orto</i> y <i>para</i> del hidrógeno en función de la temperatura. [51]	28
4.	Calor específico medido a volumen constante frente a temperatura en función del isómero de espín. El n- H_2 indica los valores normales de equilibrio [51].	28
5.	Densidad del H_2 en función de la presión y la temperatura en el rango del ciclo modelizado. La línea de puntos representa la unión de los puntos con $\rho=40.5 \text{ kg/m}^3$	30
6.	Entalpía específica del H_2 en función de la presión y la temperatura en el rango del ciclo modelizado. La leyenda de colores representa los valores de la entalpía específica (kJ/kg) para clarificar la lectura.	31
7.	[35].	32
8.	Secuencia de simulación que sigue Simscape para resolver sistemas definidos por bloques.	35
9.	Esquema visual de un depósito de almacenamiento de hidrógeno correspondiente a un depósito de tiempo IV.	38
10.	Esquema conceptual de cada tipo de depósito de hidrógeno, según la clasificación de la Tabla 3.	39
11.	Representación de un proceso termodinámico no ideal correspondiente al ciclo completo de la carrera de un pistón en un cilindro cerrado (Bloch Hoefner, 1996)	42
12.	Eficiencia volumétrica de cada etapa independiente del compresor	44
13.	Representación gráfica de la comparativa entre un proceso de compresión adiabático en una sola etapa, en tres etapas con refrigeración intermedia y un proceso completamente isotérmico. [67]	46
14.	Esquema conceptual de los flujos implicados en el intercambiador de calor, tal y como se emplea en las estaciones de servicio de hidrógeno convencionales	47
15.	Curvas de efectividad para diferentes configuraciones del intercambiador de calor, según el método E-NTU [70]	50
16.	Apertura normalizada de la válvula con el tiempo de apertura situado en 1 segundo. Se comparan la respuesta de dicha válvula aplicando el suavizado para una función rampa en la entrada, y la respuesta a una entrada sigmoideal sin aplicar el suavizado	52
17.	Ejemplo de implementación de la máquina de estados de tipo <i>Mealy</i> correspondiente al modelo de presurización en cascada. Cada bloque con borde discontinuo representa un conjunto de estados que se ejecutan paralelamente. Los bloques de línea sólida son los diferentes estados por los que pasa la máquina y las flechas son representación de las condiciones y las ordenes a cumplir para pasar de un estado a otro. El bloque blanco corresponde a una función externa de <i>Simulink</i>	54
18.	Diagrama de flujo recomendado para seleccionar un solucionador para una primera simulación en simulink.[76]	56

19.	Longitud de paso de la simulación del modelo principal a diferentes escalas. a) Vista general del tamaño de paso durante toda la simulación del modelo principal. b) Vista en detalle para identificar las zonas críticas. c) Detalle de las zonas críticas. d) Representación de la longitud de paso en la zona más crítica.	59
20.	Comparación del coste computacional de los métodos numéricos de paso fijo. EI = Euler Invertido. [80]	61
21.	Análisis de la longitud de paso, con solucionador de paso variable, del modelo principal optimizado. a) Comparativa del flujo másico del modelo principal optimizado para una dinámica más suave y sin optimizar. b) Comparativa de las energías consumidas. c) Longitud de paso en vista general para el modelo optimizado. d) Longitud de paso con la escala ajustada a 10^{-5} s	62
22.	Comparativa de las energía consumida en el compresor, en el modelo principal y el modelo con pérdidas de carga en todos los tramos de tubería y válvulas.	64
23.	Comparativa de las energías consumidas en el precoolero y el compresor, en el modelo principal perfectamente aislado y con pérdidas de calor	66
24.	Comparativa de la temperatura del hidrógeno en la salida del intercambiador de calor, calculado para el modelo principal.	66
25.	Esquema del modelo simplificado.	68
26.	Evolución de las temperaturas y las presiones en todos los nodos que componen el modelo simplificado	68
27.	Caudal del líquido refrigerante necesario para bajar la temperatura de entrada en el depósito a -40°C situando un intercambiador de calor aguas arriba y aguas abajo de la válvula de control	71
28.	Representación esquemática de los modelos creados en <i>Simscape</i> . a) Esquema completo del modelo principal. b) Esquema parcial, hasta la primera válvula de control del modelo principal con bypass.	73
29.	Representación esquemática del modelo de presurización en cascada	74
30.	Representación esquemática del modelo de presurización inicial	75
31.	Representación esquemática del modelo de refrigeración cruzada	76
32.	Representación esquemática del modelo completo	77
33.	Tiempo de finalización del repostaje para los diferentes modelos en condiciones estándar.	77
34.	Evolución de la temperatura y la presión de los tanques de almacenamiento de baja presión	79
35.	Evolución de la presión de los tanques de alta presión en el modelo de presurización en cascada.	80
36.	Evoluciones de la potencia y velocidad angular del actuador del compresor durante todo el tiempo de simulador. a) y b) corresponden a la potencia. c) y d) a la velocidad angular.	82
37.	Evolución de la compresión del pistón en el modelo de presurización líquida	84
38.	Evolución de la energía consumida en el compresor en todos los modelos propuestos	85
39.	Evoluciones de la fracción de apertura de las válvulas de control.	88
40.	Evolución de la caída de la presión en las válvulas de control	90
41.	Variación de presiones en el interior del intercambiador de calor en el modelo principal	91
42.	Variación de la temperatura entre la entrada y la salida del precoolero	93
43.	Potencia y caudal de líquido refrigerante en el intercambiador de calor	94

44.	Configuración interna del bloque que se emplea a modo de filtro de las fluctuaciones	95
45.	Energía consumida en el precoolers	95
46.	Evolución de las presiones del depósito del vehículo	97
47.	Evolución de las temperaturas del depósito del vehículo	98
48.	Evolución de la temperatura del pistón en el modelo de presurización inicial	99
49.	Estado de carga del vehículo	100
50.	Evolución del caudal entrante en el depósito del vehículo	101
51.	Tasa de presurización del vehículo	102
52.	Energías consumidas frente a las predichas por la Ecuación 32 en el compresor (a) y en el precoolers (b), en el modelo principal para una presión inicial del vehículo de 0.5 MPa.	107
53.	configuración detallada del compresor. a) Esquema de la modelización de un cilindro de un compresor de diafragma. b) Configuración de la propuesta de un compresor de diafragma de 3 etapas y 2 cilindros por etapa.	109

Índice de Tablas

1.	Capacidad de generación de energía renovable (2000-2030)	12
2.	Requisitos y recomendaciones para un buen uso de los softwares MATLAB, <i>Simulink</i> y <i>Simscape</i> [16]	19
3.	Tipos de tanques de almacenamiento de hidrógeno gaseoso a presión. [57],[39]	39
4.	Explicación de los diferentes casos mostrados en la Figura 15	50
5.	Resumen de las diferencias entre una máquina de estados de Moore y de Mealy	55
6.	Resumen de los métodos numéricos de paso variable disponibles en <i>Simulink</i>	57
7.	Energías consumidas por el compresor para todos los modelos propuestos en condiciones de contorno estándares	84
8.	Energía consumida en el precooler	96
9.	Resumen de las energías invertidas en los modelos y sus comparativas	103
10.	Valores de los coeficientes A, B y C a presión inicial de 0.5 MPa	106

1. Introducción

En la actualidad, la humanidad se encuentra en un momento crítico en la búsqueda de soluciones energéticas sostenibles para abordar los impactos del cambio climático y reducir la dependencia de los combustibles fósiles. La necesidad urgente de disminuir las emisiones de gases de efecto invernadero y avanzar hacia una matriz energética más limpia ha situado al hidrógeno en el centro de la revolución energética. Este elemento, disponible en abundancia en la naturaleza, se distingue por su capacidad única para almacenar y liberar energía de manera eficiente, sin generar emisiones perjudiciales durante su utilización. La conciencia creciente sobre la escasez de los recursos fósiles y los impactos ambientales adversos asociados con su extracción y utilización ha estimulado la búsqueda de alternativas más sostenibles y renovables.

En este contexto, el hidrógeno se presenta como un vector energético versátil que tiene el potencial de ser fundamental en la transición hacia un futuro más limpio y eficiente. Su aplicación en el sector de la movilidad no solo aborda las preocupaciones ambientales, sino que también responde a la creciente demanda de tecnologías que impulsen la descarbonización del transporte. A pesar de los avances significativos logrados mediante la electrificación de los vehículos, las limitaciones de las baterías en términos de autonomía y tiempo de recarga han motivado la exploración de opciones complementarias. En este sentido, el hidrógeno plantea una alternativa destacada, ofreciendo una solución viable para superar los desafíos actuales y transformar la movilidad hacia un paradigma más sostenible y eficiente.

Aun así, aunque se estudie como una de las mejores opciones de cara a futuro de hoy en día, la adopción del hidrógeno como vector energético plantea desafíos tecnológicos y de infraestructura que deben abordarse de manera integral. En este contexto, el presente trabajo se enfoca en el análisis detallado de las hidrogeneras, infraestructuras para la implementación exitosa de vehículos movidos por hidrógeno.

Las hidrogeneras son estaciones de servicio especializadas diseñadas para almacenar, dispensar, y a veces, producir hidrógeno. Su despliegue adecuado es esencial para respaldar la creciente demanda de vehículos de hidrógeno, pero su desarrollo y adopción enfrentan obstáculos considerables. La capacidad de producir hidrógeno de manera sostenible y asequible, así como la expansión de la red de hidrogeneras o el gasto energético en los procesos de presurización, son aspectos críticos que requieren una atención especial.

Este trabajo aborda la tecnología actual empleada en hidrogeneras, evaluando los métodos de compresión y enfriamiento de hidrógeno, los sistemas de almacenamiento y las tecnologías de dispensación. En ese sentido, tras hacer una contextualización del tema, en los apartados técnicos se explican y justifican a fondo los análisis realizados para construir el modelo y las conclusiones extraídas a partir de este.

2. Contexto

El mundo está en crisis. La actual configuración socioeconómica, junto con el crecimiento demográfico, nos obliga a mantener tasas de producción, distribución y consumo que superan los

estándares anteriores día tras día. Según la gran mayoría de los estudios científicos sobre el tema, hemos llegado a una situación que desafía cualquier equilibrio posible. El término crisis.^abarca no solo una crisis económica causada por la imposibilidad de lograr tasas de ganancias cada vez más altas para los grandes capitales financieros e industriales, sino también todo el conjunto de campos que influyen en nuestra forma de vida.

En dicho contexto de crisis, una de las cuestiones que más está proliferando es el problema medioambiental y sus efectos en el clima. Parece ser que tras varios años de estudios e infinidad de pruebas empíricas, la sociedad poco a poco se está volcando en conseguir fuentes de energía limpia. Este proceso desgraciadamente, va estrictamente guiado por la lógica del capital y solamente proliferan aquellas iniciativas que puedan reportar beneficios en los nuevos mercados que se van abriendo.

Dicho esto, cabe reconocer que las investigaciones para dejar de lado los combustibles fósiles y las fuentes de energía no renovables, han crecido enormemente en los últimos años. De hecho, según [1] el incremento en el uso de la energía renovable a nivel mundial ha sido exponencial, y se espera aumentar aun mas la tasa de crecimiento en los proximos años, tal y como se muestra en la Tabla 1. Asimismo, mas allá de las fuentes de energía, se proponen numerosas alternativas y, aunque

Tabla 1: Capacidad de generación de energía renovable (2000-2030)

Fuente de Energía	2000	2010	2020	Proyecciones 2030
Energía Eólica	17 GW	60 GW	600 GW	1,400 GW
Energía Solar	1 GW	40 GW	650 GW	2,200 GW
Energía Hidroeléctrica	800 GW	1,000 GW	1,300 GW	1,500 GW

ninguna se ha convertido en la solución definitiva, el uso de vectores energéticos no fósiles [2] y la electrificación de ciertos campos como la maquinaria industrial o la flota de vehículos en general, están cada vez más presentes en la vida diaria.

De todas estas nuevas alternativas, el hidrógeno parece ser el material más prometedor hasta ahora. Por un lado, es el elemento destinado a lograr la fusión nuclear [3]. Por otro lado, es el material más abundante en el universo, el cuarto en la atmósfera terrestre y el décimo en la corteza terrestre [4]. Por último, en comparación con los combustibles actuales, ha llamado la atención debido a su alta eficiencia de conversión térmica, alta densidad energética y bajo poder calorífico. En general, esto lo convierte en un combustible potencialmente más eficiente que los combustibles fósiles a base de hidrocarburos [5].

Estas características aparentemente hacen del hidrógeno un elemento único; ninguno de sus usos mencionados produce, por lo general, residuos contaminantes. En consecuencia, no es sorprendente el aumento en la investigación del hidrógeno y su creciente prominencia en las discusiones institucionales sobre energía y clima.

En comparación con la combustión directa, la eficiencia energética de las pilas de combustible de hidrógeno es relativamente alta. Esto se debe a que las pilas de combustible convierten directamente la energía química del hidrógeno en energía eléctrica, evitando un proceso de conversión

térmica y reduciendo las pérdidas de energía [6].

A medida que se desarrollan tecnologías para el repostaje seguro y rápido de hidrógeno, también lo hacen los estudios sobre la creación de una cadena de distribución efectiva en varios países. Prueba de este desarrollo son las gráficas aparentes en la Figura 1, las cuales muestran por un lado la cantidad de artículos que tratan temas relacionados con la movilidad basada en hidrógeno, escritos en revistas científicas indexadas [7], y por otro, la proliferación de las hidrolineras [8].

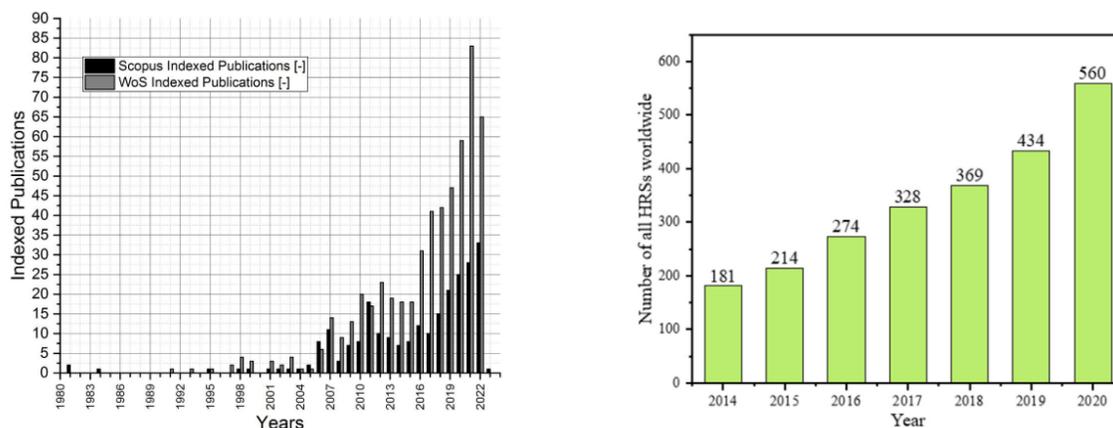


Figura 1: a), incremento de los artículos relacionados con el repostaje de hidrógeno escritos en revistas indexadas encontradas mediante búsquedas en WoS y en Scopus. b), Incremento de la cantidad de hidrolineras activas en todo el mundo.

A primera vista, puede parecer que los números son escasos ya que uno podría suponer que simplemente reemplazar los canales de distribución de hidrocarburos actuales sería suficiente para un combustible líquido o gaseoso como el hidrógeno. Sin embargo, la distribución de dicho gas requiere una infraestructura específica y sistemas de almacenamiento adecuados, lo que presenta un desafío adicional para la implementación a gran escala [9].

Ante los desafíos mencionados, la investigación para modelar un sistema de suministro de hidrógeno se vuelve no solo relevante sino esencial para la transición hacia un futuro energético sostenible. Esta investigación tiene como objetivo abordar la optimización de componentes y procesos en lo que al repostaje de hidrógeno se refiere.

La investigación para optimizar los componentes y procesos que participan en el suministro de hidrógeno es inherentemente multidisciplinaria, involucrando ciencia de materiales, ingeniería mecánica, ingeniería química, ingeniería térmica y la automática, entre otros. Al abordar los desafíos técnicos asociados con cada componente de la cadena de suministro de hidrógeno, la investigación tiene como objetivo contribuir al desarrollo de una infraestructura de hidrógeno más eficiente, rentable y escalable. Esto, a su vez, facilitaría la adopción más amplia del hidrógeno como un portador de energía limpia, alineándose con los esfuerzos globales para mitigar el cambio climático y transitar hacia sistemas energéticos sostenibles.

3. Objetivos y alcance

Este trabajo pretende realizar un estudio de los coches basados en celdas de combustible de hidrógeno, y más en concreto de las llamadas “hidrolineras” o “hidrogeneras”. El principal objetivo es realizar un modelo de simulación lo suficientemente realista y preciso, como para poder hacer predicciones y optimizaciones del proceso de repostaje de hidrógeno en fase gaseosa. Para ello se pretende encontrar un software que sea capaz de proporcionar flexibilidad y una amplia variedad de opciones a la hora de diseñar el proceso, y a su vez una rapidez y una precisión que hagan del modelo una herramienta útil para una posible primera fase de diseño en un sistema de transferencia de hidrógeno.

El modelo debe ser capaz de realizar análisis en el campo de la termodinámica, dinámica de fluidos, simulaciones de un sistema de control y además tener en cuenta otros muchos fenómenos que se salen de un comportamiento ideal de los componentes que se utilicen. Estos comportamientos pueden estar relacionados con pérdidas de flujo en válvulas, difusión del combustible presurizado en los materiales (en los puntos donde se pueda considerar relevante), tiempos de actuación e inercias en los sistemas mecánicos o electrónicos, y algunos más que se comentan en el apartado dedicado al modelo.

Preferiblemente el modelo debe ser capaz de funcionar en un ordenador de sobremesa sin ninguna capacidad especial para calcular problemas matemáticos como ciclos algebraicos o resolución numérica de ecuaciones diferenciales, por lo que en lo que se ve necesario valorar los mecanismos de resolución que proporcione el software. La elección de un motor y unos algoritmos correctos puede suponer la diferencia entre poder realizar una rápida simulación de unos pocos minutos (incluso segundos) y el que no lleguen a converger las ecuaciones en un momento dado.

Para una correcta interpretación de los resultados extraídos de los modelos, aparte de lo mencionado acerca de su correcta construcción, es necesario un estudio de los instrumentos usados hoy en día en las hidrolineras, y se pretende hacer una selección representativa tanto de las dimensiones y características de estos elementos, como de las condiciones iniciales y de contorno impuestas al modelo.

Todo ello se realiza siguiendo estrictamente los protocolos y la norma vigente en la Unión Europea y en el ámbito nacional (UNE-ISO 19880-12022) [10]. Se determina así por varios motivos. En primer lugar, es lógico que un modelo que ayude a diseñar un sistema de repostaje o algún sistema similar de transferencia de hidrógeno gaseoso presurizado, se haga directamente pensando en una utilización práctica del mismo.

Asimismo, adoptando la norma, se coloca un rango de actuación que ayuda a tomar un rumbo de construcción del sistema, ya que, si no se hace, el rango de posibilidades es infinito y puede ser costoso valorar cuales de las opciones es más o menos viable. Ese mismo trabajo de abstracción puede llevar a conclusiones revolucionarias, y puede ser una buena vía para plantear alternativas a los modelos convencionales, pero supone un enfoque radicalmente diferente y toma una forma mucho más primaria de investigación. Además, el hecho de realizar y comprobar un modelo sin una instalación de pruebas, saliéndose completamente de los moldes de la norma, puede ser un trabajo demasiado ambicioso para este tipo de documento.

Por último, se ha visto que por el (de momento) limitado recorrido de esta tecnología a nivel comercial, la mayoría de protocolos que se aplican en todo el mundo nacen de un mismo estándar: SAE J2601(SAE ,2016). Por ende, aunque la norma europea u otras de referencia como la china T/CECA-G 0079-2020 [11], o la japonesa JPEC-S 0003 [12], JPEC-S 0003 utilizada no sea idéntica a esta, comparten propiedades que hacen que un modelo diseñado con una de ellas sea fácilmente trasladable a cualquier parte del mundo cambiando unos pequeños parámetros.

Otra de las limitaciones del modelo es, como ya se ha mencionado anteriormente, la falta de un banco de pruebas donde realizar los ciclos de carga de hidrógeno. Debido al alto costo de los materiales y la maquinaria necesaria para comprimir y transportar hidrógeno a presiones que llegan a casi 90 MPa, hay solo unos pocos lugares donde se ha podido hacer una inversión de ese tipo solo para estudiar formas de optimizar el proceso. Por tanto, en este caso particular, se ha testado el modelo con información experimental extraída de artículos científicos que sí contaban con este tipo de medios, o en su defecto se han comparado los resultados con modelos ya existentes y testados. Además de los métodos mencionados también se ha verificado el ciclo desde una perspectiva teórica, haciendo un análisis de cada resultado en cada punto del sistema, contrastándolo con las ecuaciones y viendo si el comportamiento era el esperado.

En resumen, el modelo matemático que se pretende desarrollar pretende tener un grado de precisión suficiente para formar parte de un comienzo de desarrollo de un proyecto relacionado con construir una hidrolinera, y se espera que se puedan sacar conclusiones válidas de cara a obtener un sistema más eficiente que los más tradicionales, añadiendo o modificando partes concretas. En cambio, no se busca ni un modelo completamente innovador que rompa con los moldes actuales en su totalidad debido a su poca aplicabilidad inmediata, ni tampoco una simulación que requiera de medios especializados y que se use en una fase más avanzada del proceso de diseño.

4. Beneficios

Como ya se ha explicado en apartados anteriores, el presente texto y la subsecuente investigación de cara a lograr unos avances en la simulación y optimización de los procesos de repostaje de hidrógeno, pretenden tener el mayor impacto en los campos de la ingeniería energética y del hidrógeno, para lograr una movilidad más eficiente que la conocida actualmente.

Claro está que los avances que se puedan hacer directamente con este documento no son revolucionarios, ya que no pretenden serlo; pero sí que puede contribuir a asentar las bases en una tecnología casi en fase embrionaria.

Son varios los artículos que discuten los beneficios de una distribución clásica de compresión directa, los que proponen cambios como el repostaje “en cascada” [13], o los que intentan optimizar el proceso con modificaciones puntuales como una descompresión en turbina, antes de entrar al depósito, con el propósito de aumentar la eficiencia energética [14]. pero es unánime la opinión de que en absoluto se ha llegado a una situación de bloqueo y hay que seguir desarrollando protocolos de llenado más y más eficientes. En ese camino es donde más tiene que hablar este documento.

El hidrógeno es un material complicado de utilizar a presiones elevadas y temperaturas cercanas a la temperatura ambiente. Contiene características que lo hacen especialmente interesante para su uso como combustible, y en general como vector energético, pero su contraparte se manifiesta enseguida cuando se miran algunas de sus propiedades.

Para un ciclo de compresión en fase gaseosa como es el que se describe en este trabajo, antes de entrar en detalles técnicos (cosa que se hace en otros apartados más adelante), se puede decir de manera burda que el hidrógeno biatómico tiende a calentarse hasta cuando no debe. Teniendo en cuenta que la máxima temperatura permitida en el ciclo es de 85°C, ya que este gas, al entrar en contacto con el oxígeno, produce una reacción exotérmica muy energética, esto supone un reto para diseñar un ciclo de compresión eficiente y efectivo.

Aparte de esta particular propiedad, también hay otras relacionadas con los isómeros de espín¹, o con el bajo peso molecular, que favorece la difusión y posterior fragilización de los materiales circundantes. En general ese cúmulo de complicaciones es el que se pretende sortear de la mejor forma posible con este trabajo.

El conseguir un ciclo altamente eficiente, sin sobrepasar los límites establecidos por la norma, con la utilización de sistemas y dispositivos reales y económicamente viables, supone un gran paso en el camino de acercar esta tecnología cada vez más al público general y a las empresas o instituciones estatales que puedan hacer grandes apuestas en esta dirección.

Por un lado, sirve como demostración de que una tecnología basada en el hidrógeno es cada vez más palpable y que es (por lo menos), capaz de ser superior que el coche eléctrico de baterías en algunos campos.

Por otra parte, teniendo un modelo altamente modificable, y con facilidad para realizar las simulaciones en todo tipo de plataformas en un tiempo reducido, las opciones de mejora se pueden ensayar una y otra vez, proporcionando así una herramienta clave para el desarrollo de nuevas tecnologías.

Está claro que por sí sola la mejora de los sistemas de almacenaje y repostaje de hidrógeno no son capaces de solucionar problemas radicales como la producción o el gigantesco cambio en la infraestructura que hay que realizar para que de verdad sea una opción para todo el mundo como son los combustibles fósiles, pero en cambio sí que solucionar estos problemas lleva a una mayor confianza (necesaria para hacer una inversión real) y una aplicabilidad más inmediata de dicha tecnología.

5. Descripción de los requerimientos

Este apartado pretende dar a conocer al lector, por una parte, los detalles técnicos para poder realizar la simulación de la manera en la que se plantean los modelos.

¹El hidrógeno molecular se presenta en dos formas isoméricas, una con sus dos espines nucleares de protón alineados en paralelo (ortohidrógeno) y otra con sus dos espines de protón alineados en antiparalelo (parahidrógeno). Estas dos formas se denominan a menudo isómeros de espín o isómeros de espín nuclear [15]. Más información en el apartado de los fundamentos teóricos

El trabajo se basa en el análisis de la tecnología del hidrógeno para poder construir un modelo matemático “realista” y así poder extraer conclusiones de cara a optimizar los procesos de carga y descarga de hidrógeno gaseoso en vehículos ligeros. Por tanto, el desarrollo de dicho modelo debe ser una parte fundamental y es necesario que este cumpla con unos mínimos de rapidez y efectividad.

El compromiso entre accesibilidad, velocidad de computación, complejidad y flexibilidad es una tarea difícil de equilibrar. Al tratarse de conceptos muy amplios, y contrapuestos entre sí, hay que definir correctamente el grado de cada especificación.

Trayendo el problema al caso actual, se trata, como ya se ha mencionado en apartados anteriores, de un desarrollo software cuyo grado de realismo tiene que ser significativo para una fase inicial de diseño. Eso quiere decir que puede abarcar toda una serie de simplificaciones matemáticas y generalizaciones siempre que estén debidamente justificadas y se conozcan sus efectos.

El usuario del modelo debe ser capaz, modificando ciertas cuestiones en el layout, o variando parámetros internos (como las presiones de trabajo, potencia del compresor o intercambiadores de calor, tipo y tamaño de válvulas y tuberías, etc.), de extraer unas conclusiones válidas para saber qué tipo de componente usar en cada sitio, y poder identificar las partes críticas del proceso. De esta forma se le puede asignar una prioridad a cada parámetro y el diseño u optimización se realizan de manera mucho más efectiva.

Dicho esto, queda claro, por ejemplo, que el grado de complejidad no tiene por qué contemplar el flujo de hidrógeno como un flujo de partículas discretas como lo podrían hacer los softwares de elementos finitos, ya que resolviendo numéricamente las ecuaciones de flujo continuo en las diferentes etapas del proceso ya se logra una aproximación suficientemente buena del comportamiento general del hidrógeno.

Esto en absoluto quiere decir que, en fases más avanzadas de optimización de la geometría, selección de materiales, especificaciones mecánicas... de cada componente se deban usar en fases más avanzadas, pero el coste computacional es de varios ordenes de magnitud mayor, y eso entra en conflicto con los demás requisitos planteados.

Es más, la velocidad de cálculo es de vital importancia ya que, al tratarse de un modelo holístico del proceso, son cientos los parámetros (en los apartados técnicos se trata con mayor profundidad) a tener en cuenta para ver sus efectos.

En cuanto al hardware, se cuenta con un ordenador de sobremesa para realizar los cálculos; el cual, a rasgos generales, cuenta con: Un procesador 12th Gen. Intel(R) Core(TM) i5-12500 de 3 GHz, una memoria RAM de 16 GB (con 15.7 usables), memoria SSD de 500 GB y el sistema operativo Windows 10 Pro (64 bits)².

En el ámbito, la integración de MATLAB, Simulink y Simscape ofrece un conjunto de herramientas polifacético que aborda las complejidades inherentes al modelado, simulación y optimización de dichos sistemas. Esta integración es crucial para el análisis preciso y el diseño de los componentes

²Se obvian datos como la GPU y otras especificaciones ya que no son de vital importancia en este caso.

y procesos involucrados en la cadena de suministro de hidrógeno, incluyendo el almacenamiento de gas, la compresión, el intercambio de calor y el almacenamiento de gas en vehículos.

MATLAB sirve como una plataforma central para el desarrollo de algoritmos y análisis de datos, crucial para los procesos de optimización en sistemas de hidrógeno. Su amplio conjunto de funciones matemáticas y estadísticas permite el análisis detallado de parámetros del sistema y métricas de rendimiento. Por ejemplo, en la optimización de soluciones de almacenamiento de gas, MATLAB puede procesar datos experimentales para identificar propiedades de materiales que maximicen la eficiencia de almacenamiento o minimicen los costos. Su capacidad para manejar grandes conjuntos de datos y realizar cálculos complejos lo hace indispensable para desarrollar modelos predictivos que simulen el comportamiento del sistema bajo varios escenarios operativos.

Simulink, por otro lado, proporciona un entorno de simulación dinámica que complementa las capacidades analíticas de MATLAB. Permite modelar el sistema de suministro de hidrógeno en su conjunto, incorporando comportamientos dependientes del tiempo e interacciones entre diferentes componentes del sistema. Esto es particularmente útil para comprender la dinámica transitoria del sistema, como la respuesta de la presión de almacenamiento de gas a la demanda fluctuante. El enfoque de diagrama de bloques de Simulink permite el ensamblaje intuitivo de modelos de sistema, facilitando la simulación de sistemas complejos sin la necesidad de extensa codificación. A través de Simulink, los ingenieros también pueden diseñar y simular estrategias de control para componentes del sistema, optimizando su operación en escenarios de tiempo real.

Simscape mejora aún más las capacidades de modelado al introducir el modelado físico en el entorno de Simulink. Permite la simulación de sistemas físicos dentro de su contexto operacional, incorporando física del mundo real. Esto es crítico para componentes como intercambiadores de calor y compresores, donde la dinámica térmica y de fluidos juega un papel significativo en su rendimiento. Los modelos de Simscape pueden simular el comportamiento físico de estos componentes, teniendo en cuenta factores como los coeficientes de transferencia de calor, propiedades de fluidos y restricciones mecánicas. Este nivel de detalle es esencial para el diseño y optimización precisos de cada componente, asegurando que cumplan con los requisitos específicos del sistema de suministro de hidrógeno en términos de eficiencia, fiabilidad y capacidad.

La sinergia entre MATLAB, Simulink y Simscape facilita un enfoque integral para el estudio y optimización de sistemas de suministro de hidrógeno. Las capacidades de procesamiento de datos y desarrollo de algoritmos de MATLAB proporcionan la base para comprender el comportamiento del sistema e identificar objetivos de optimización. Simulink se basa en esto al ofrecer una plataforma para la simulación dinámica del sistema, permitiendo la exploración de respuestas del sistema a lo largo del tiempo y bajo condiciones variables. Finalmente, Simscape aporta la capacidad de modelar procesos y componentes físicos con alta fidelidad, permitiendo el diseño detallado y la optimización de componentes del sistema basados en fenómenos físicos del mundo real.

Este enfoque integrado no solo agiliza el proceso de desarrollo al proporcionar un entorno cohesivo para el análisis, la simulación y el diseño, sino que también mejora la precisión y eficiencia de los esfuerzos de optimización. Al aprovechar las fortalezas de cada herramienta, los ingenieros pueden lograr una comprensión más profunda del comportamiento del sistema, identificar configuraciones óptimas y estrategias de control, y en última instancia diseñar un sistema de suministro

de hidrógeno que cumpla con las demandas de eficiencia, fiabilidad y escalabilidad.

Las especificaciones técnicas para un uso correcto de dicho software están recogidas en la Tabla 2. En ella se recogen los requisitos mínimos, las recomendaciones y las versiones utilizadas de los componentes más importantes.

Tabla 2: Requisitos y recomendaciones para un buen uso de los softwares MATLAB, *Simulink* y *Simscape* [16]

Ámbito	Mínimo	Recomendado	Utilizado
Sistema Operativo	Win 11, 10 (>21H2), Server 2019, 2022	-	Win 10 Pro (22H2)
CPU	Intel/AMD x86-64, 2 cores	Intel/AMD x86-64, 4 núcleos, AVX2	Intel® Core™ i5-12500 12th Gen (6 cores)
RAM	8 GB	16 GB	16 GB
Disco	3.8 GB para MATLAB, 4-6 GB típica, 23 GB completa	SSD > HDD	SSD 500 GB
Gráficos	-	Tarjeta OpenGL 3.3, 1 GB GPU	-

6. Estado del arte

En este apartado se pretende realizar una breve revisión de las últimas tecnologías del hidrógeno y en concreto las que se abarcan en el campo de las hidrolineras y los vehículos de celda de combustible.

6.1. Producción

La búsqueda de una producción de hidrógeno sostenible y eficiente es fundamental en la transición hacia un paradigma energético más limpio. El hidrógeno, aclamado por su potencial como un combustible limpio, puede ser producido a través de varios métodos, cada uno con implicaciones ambientales y económicas distintas. Los métodos principales incluyen la electrólisis del agua, la reforma del gas natural y la gasificación de biomasa. Estos métodos están en la vanguardia de la investigación y su uso está dividido debido a sus variadas eficiencias, costos y perfiles de emisiones de gases de efecto invernadero. El esfuerzo por refinar estos procesos y desarrollar nuevas tecnologías está impulsado por la necesidad urgente de mitigar el cambio climático y aprovechar el potencial del hidrógeno como un portador de energía versátil.

6.1.1. Electrólisis del Agua

La electrólisis del agua representa una vía prometedora para producir hidrógeno verde, especialmente cuando se alimenta con fuentes de energía renovables. Este proceso, que descompone el agua

en hidrógeno y oxígeno usando electricidad, es inherentemente limpio, siempre que la electricidad provenga de renovables. La eficiencia de la electrólisis varía según la tecnología empleada, con cifras actuales que oscilan entre el 60 % y el 80 %. Sin embargo, el proceso se ve obstaculizado por los altos costos operativos y la naturaleza costosa de los materiales del catalizador requeridos, como el platino y el iridio en los electrolizadores de membrana de intercambio de protones.

Los avances recientes apuntan a mejorar la eficiencia y la longevidad de los electrolizadores, al tiempo que buscan alternativas a los materiales del catalizador costosos. La investigación en materiales novedosos y la optimización del diseño del electrolizador prometen reducir costos y mejorar la escalabilidad de esta tecnología. Además, el desarrollo de proyectos de energía renovable a gran escala podría reducir el costo de la electricidad, haciendo así la electrólisis del agua una opción más viable económicamente para la producción de hidrógeno [17].

6.1.2. Extracción de hidrógeno a partir de hidrocarburos

El reformado de metano con vapor (SMR) es el método predominante para la producción de hidrógeno a nivel mundial, favorecido por su eficiencia económica. Sin embargo, también es una fuente significativa de emisiones de CO₂, dado su dependencia de los combustibles fósiles. El proceso implica la reacción del metano con vapor bajo altas temperaturas para producir hidrógeno y monóxido de carbono, seguido de una reacción de cambio de gas de agua para maximizar la salida de hidrógeno.

Para abordar las preocupaciones ambientales asociadas con la SMR, la investigación se centra en integrar tecnologías de Captura y Almacenamiento de Carbono) para reducir su huella de carbono. Además, los avances en el reformado .autotérmicoz la oxidación parcial ofrecen métodos alternativos que pueden proporcionar vías más eficientes o limpias para la producción de hidrógeno a partir del gas natural [18].

6.1.3. Gasificación de Biomasa

La gasificación de biomasa ofrece una vía sostenible para la producción de hidrógeno, con el potencial de resultados neutros en carbono o incluso negativos en carbono si se combina con mecanismos de captura de carbono efectivos. Este proceso convierte material orgánico en hidrógeno, monóxido de carbono y dióxido de carbono a través de reacciones a alta temperatura con vapor y oxígeno. El uso de biomasa renovable y la posibilidad de integrar la captura de carbono hacen que este método sea atractivo desde una perspectiva ambiental.

Sin embargo, la gasificación de biomasa enfrenta varios obstáculos, incluida la variabilidad de la materia prima, la eficiencia del proceso de gasificación y la necesidad de purificar el hidrógeno producido de impurezas. La investigación está dirigida a mejorar la eficiencia de los gasificadores, desarrollar sistemas más robustos para la limpieza del gas y explorar el potencial de varios tipos de biomasa como materia prima [19].

6.2. Infraestructura de distribución

La infraestructura de distribución para el hidrógeno, un pilar fundamental en la transición hacia una movilidad basada en el hidrógeno, encarna un desafío que abarca dominios tecnológicos, económicos y regulatorios. Las propiedades inherentes del hidrógeno—su baja densidad, alta inflamabilidad y tendencia a causar fragilización en los metales—plantean desafíos únicos que requieren soluciones innovadoras para su transporte y almacenamiento [20]. A pesar de los retos que supone, el desarrollo de una infraestructura de distribución de hidrógeno robusta y desarrollada es una de las facetas que no se puede dejar de lado para desbloquear el potencial del hidrógeno en varios sectores, incluidos el transporte, la generación de energía y los procesos industriales.

Transportar hidrógeno en su forma gaseosa es uno de los métodos primarios actualmente empleados. Esto implica el uso de remolques de tubos de alta presión o tuberías dedicadas, cada uno con su propio conjunto de ventajas y limitaciones. Los remolques de tubos de alta presión ofrecen la flexibilidad de entregar hidrógeno a ubicaciones dispersas sin la necesidad de una extensa red de tuberías. Sin embargo, la compresión del hidrógeno a las presiones requeridas (típicamente alrededor de 200 a 700 bar) es un proceso que consume mucha energía, reduciendo la eficiencia energética general del hidrógeno como combustible. Además, la capacidad de estos remolques es relativamente limitada, haciendo este método menos adecuado para la distribución de hidrógeno a gran escala [21].

Las tuberías, por el contrario, prometen un medio más eficiente de transportar grandes volúmenes de hidrógeno a largas distancias. El establecimiento de una red de tuberías de hidrógeno, similar a la infraestructura de gas natural existente, podría reducir significativamente los costos de transporte y mejorar la accesibilidad del hidrógeno. No obstante, la adaptación o construcción de tuberías para el servicio de hidrógeno no está exenta de desafíos. El pequeño tamaño molecular del hidrógeno y su alta difusividad plantean problemas relacionados con fugas y compatibilidad de materiales, incluida la fragilización por hidrógeno de los metales tradicionalmente utilizados en la construcción de tuberías. Abordar estos problemas requiere avances en ciencia de materiales y potencialmente, el desarrollo de nuevas aleaciones o la aplicación de revestimientos protectores para asegurar la longevidad y seguridad de las tuberías de hidrógeno [22].

La licuefacción del hidrógeno presenta un método alternativo de distribución, particularmente ventajoso por su alta densidad energética por volumen, lo que facilita el transporte y almacenamiento de mayores cantidades de hidrógeno. El hidrógeno licuado se transporta en camiones cisterna criogénicos a -253°C , estado en el cual ocupa significativamente menos espacio en comparación con su forma gaseosa. Sin embargo, el proceso de licuefacción consume una cantidad considerable de energía, aproximadamente el 30 % del valor calorífico inferior del hidrógeno, lo que impacta en la eficiencia general del hidrógeno como portador de energía. Además, la necesidad de equipos especializados de almacenamiento y manejo criogénico añade complejidad y costo a este método de distribución [23].

Las tecnologías y conceptos emergentes, como el uso de portadores de hidrógeno como el amoníaco o los portadores de hidrógeno orgánicos líquidos (LOHCs), ofrecen vías prometedoras para una distribución eficiente del hidrógeno. El amoníaco, por ejemplo, puede ser sintetizado a partir de hidrógeno y nitrógeno y licuado bajo condiciones relativamente suaves, facilitando su transporte y almacenamiento utilizando la infraestructura existente. En el punto de uso, el amoníaco puede descomponerse de nuevo en nitrógeno e hidrógeno, aunque este proceso de reversión actualmente

enfrenta obstáculos en términos de eficiencia y la posible liberación de emisiones nocivas. De manera similar, los LOHCs, que pueden unir y liberar químicamente el hidrógeno, están siendo explorados por su potencial para transportar de manera segura y eficiente el hidrógeno en condiciones ambientales, aunque con desafíos relacionados con la eficiencia de la liberación de hidrógeno y la necesidad de avances tecnológicos adicionales [24].

6.3. Almacenamiento

Los sistemas de almacenamiento de hidrógeno, están meticulosamente diseñados para contener de manera segura el hidrógeno en diversas condiciones, garantizando así su disponibilidad para su uso en vehículos de celdas de combustible. El almacenamiento de hidrógeno se puede lograr de varias maneras, cada método ofrece su propio conjunto de ventajas y desafíos.

Una de las áreas de investigación más prometedoras en el almacenamiento de hidrógeno implica el uso de materiales que pueden absorber y liberar hidrógeno de manera controlada. Estos materiales incluyen ciertos tipos de hidruros metálicos, materiales a base de carbono e hidruros químicos complejos. Los hidruros metálicos, como el hidruro de magnesio (MgH_2) y el hidruro de aluminio y sodio ($NaAlH_4$), pueden almacenar hidrógeno en densidades que potencialmente superan las alcanzables con el almacenamiento convencional de gas o líquido [25]. Los materiales a base de carbono, incluyendo el carbono activado, los nanotubos de carbono y el grafeno, también muestran capacidades prometedoras de almacenamiento de hidrógeno debido a su alta superficie y porosidad [26]. Los hidruros químicos complejos, como el borano de amonio (NH_3BH_3), ofrecen altas capacidades de almacenamiento de hidrógeno y liberan hidrógeno al calentarse[27].

Estos sistemas de almacenamiento basados en materiales pueden operar a presiones relativamente bajas, típicamente en el rango de 10 a 100 bar, reduciendo los riesgos de seguridad asociados con el almacenamiento de gas a alta presión. Sin embargo, la implementación práctica de estas tecnologías aún está en la etapa de desarrollo, con desafíos significativos en términos de su eficiencia, costo y durabilidad [28].

A pesar del potencial del almacenamiento basado en materiales, esta tecnología no se considera en el presente documento. La razón de esta exclusión es que el proceso de reabastecimiento de hidrógeno para vehículos de celdas de combustible de servicio ligero requiere que el hidrógeno se almacene en fase de gas o líquido. Este requisito se debe al diseño actual de los vehículos de celdas de combustible y la infraestructura que los respalda, que están optimizados para el hidrógeno en gas o líquido [29].

El almacenamiento de hidrógeno líquido es una solución potencial para satisfacer los requisitos de almacenamiento para vehículos de celdas de combustible de hidrógeno. En este método, el hidrógeno se enfría a temperaturas extremadamente bajas, típicamente alrededor de 20 K (-253°C), transformándolo en un líquido que ocupa aproximadamente 1/800 de su volumen original en estado gaseoso [30]. Esta alta densidad energética volumétrica, aproximadamente 2.8 veces la densidad energética del gas natural, hace del hidrógeno líquido una opción atractiva para el almacenamiento.

Sin embargo, la energía requerida para licuar el hidrógeno, que puede representar hasta el 30 % del contenido energético del propio hidrógeno, y la necesidad de mantenerlo a temperaturas criogénicas

presentan desafíos sustanciales. Además, la evaporación del hidrógeno líquido debido a la entrada de calor puede llevar a pérdidas y riesgos de seguridad si no se gestiona adecuadamente. Las tasas de evaporación pueden ser tan altas como 3-4% por día para sistemas de almacenamiento más pequeños, aunque esto puede reducirse a menos del 1% por día para sistemas más grandes con aislamiento avanzado[31].

El almacenamiento de hidrógeno gaseoso es el método más utilizado hoy en día, para vehículos de celdas de combustible. Este método típicamente involucra el uso de tanques de alta presión, que pueden almacenar hidrógeno a presiones de hasta más de 700 bar. Estos tanques están diseñados para resistir las altas presiones y están hechos de materiales como compuestos de fibra de carbono, que ofrecen un excelente equilibrio de resistencia, peso y costo [32].

El interior de estos tanques a menudo está revestido con una capa de plástico, como polietileno de alta densidad (HDPE) o poliamida (PA), que actúa como una barrera de gas, evitando que el hidrógeno escape [33]. Los tanques también están equipados con dispositivos de seguridad como válvulas de alivio de presión y discos de ruptura para prevenir situaciones de sobrepresión y/o explosión. Sin embargo, el diseño y la composición material de los tanques divergen significativamente basados en su ubicación dentro de la cadena de suministro de hidrógeno.

En las estaciones de entrega de hidrógeno, los tanques son predominantemente más grandes y construidos con materiales metálicos, diseñados para soportar las presiones necesarias para almacenar volúmenes sustanciales de hidrógeno. Normalmente operan a presiones de hasta 200 bar, una especificación que se alinea con los estándares operacionales y de seguridad para el almacenamiento estacionario. La selección de metales, como acero o aleaciones de aluminio, está impulsada por su capacidad para proporcionar la fuerza y durabilidad requeridas para tales aplicaciones.

Por el contrario, los tanques diseñados para vehículos de celda de combustible de servicio ligero priorizan minimizar el peso mientras mantienen la integridad estructural necesaria para contener de manera segura el hidrógeno bajo presiones que exceden los 800 bar [34]. Este marcado contraste en los requisitos de presión se satisface mediante el uso de compuestos de polímero reforzado con fibra de carbono (CFRP), seleccionados por su excepcional relación resistencia-peso. Esta elección de material permite que los tanques acomoden las altas presiones sin cargar significativamente al vehículo con masa adicional, un factor crítico para mantener la eficiencia y el rendimiento del vehículo. Además, estos tanques integrados en vehículos a menudo cuentan con un revestimiento polimérico o metálico para asegurar que el hidrógeno permanezca impermeable. Este revestimiento puede no ser indispensable en ciertos casos, pero debido a la complejidad añadida en el proceso de fabricación, estos tanques suelen reservarse para la aviación.

En general todos los tipos de almacenamiento de hidrógeno gaseoso están categorizados por tipos y rango de operación, pero esta información se extiende en el apartado teórico.

6.4. Modelos informáticos y simulaciones

Con el incesante avance de las tecnologías de computación, cualquier avance en ingeniería, al igual que en muchos otros campos de la ciencia, tiene uno de sus pilares en la modelización por ordenador. Las herramientas que se emplean para cada campo pueden variar enormemente ya que

se basan en principios radicalmente diferentes.

El nivel de los resultados que se pueden obtener de cada tipo de análisis es igualmente dispar, y acostumbra a ir en proporción con el coste computacional del modelo que se ensaya. En el campo de la ingeniería térmica y mecánica, a grandes rasgos, se pueden diferenciar 3 tipos de modelo dependiendo del tipo de resultado que se pretenda obtener³.

Por un lado, un tipo de modelo muy común tanto en investigación como en la industria es aquel que, haciendo uso de ecuaciones algebraicas y/o métodos numéricos, da como resultado un estado estacionario (o condiciones en un instante determinado) del elemento o conjunto que se está calculando. Por lo general son modelos computacionalmente baratos y de arquitectura simple y sus ecuaciones se suelen aplicar para las propiedades en volúmenes de control o puntos concretos.

A pesar de su simpleza conceptual, la precisión obtenida por estos modelos puede ser elevada ya que pueden implementarse bucles de cálculo (haciendo iteraciones de cálculos para diferentes propiedades hasta que se logre una coherencia dentro de un margen de error deseado), o permite la adición de coeficientes o incluso formulas empíricas, como suele verse en la industria.

Cabe mencionar que es posible la simulación de ciertos comportamientos dinámicos, siempre que las ecuaciones diferenciales se puedan particularizar o resolver de manera que como resultado se obtengan los resultados finales. Aun así no suele ser una casuística muy empleada cuando los resultados son desconocidos ya que dichas situaciones simplifican enormemente la complejidad de los procesos dinámicos reales.

Las herramientas empleadas para simular este tipo de modelos abarcan casi cualquier software de cálculo desde MS Excel, Termograf, EES hasta MATLAB o Wolfram Mathematica. En las referencias [35],[36], [37],[14],[38] y [39] se pueden encontrar modelos de este estilo. En concreto en los tres últimos se pueden ver los casos en los que se aplica una cierta dinámica de manera simplificada.

El que se califica como segundo tipo de modelo es el que se emplea en este trabajo, y aunque comparte muchas de las características con el primero, añade un punto de complejidad que para procesos en los que el trabajo en régimen constante no supone la casi-totalidad, es imprescindible. Estos modelos, los que se crean mediante la herramienta de Simscape por ejemplo, añaden ecuaciones diferenciales resueltas numéricamente (salvo en casos muy específicos en los que la resolución es exacta de la mano del software de Wolfram) al conjunto de ecuaciones algebraicas, y mediante diferentes criterios van logrando la convergencia de estados para los diferentes instantes de tiempo.

A nivel explicativo se podría decir que los modelos de tipo 2, son herramientas que resuelven modelos de tipo 1 cíclicamente para cada valor discreto de la variable tiempo, empleando las ecuaciones diferenciales para ajustar las condiciones de contorno en cada iteración. En el apartado correspondiente a los cálculos se profundiza en los criterios y protocolos que emplea Simscape.

Visto el funcionamiento, no es sorprendente que el coste computacional para un modelo de este tipo se multiplique respecto al primer tipo. Esa es una de las principales razones por las que el uso

³Esta diferenciación no es oficial ni está sujeta a ningún convenio en concreto. Es fruto de la experiencia y comparación de los diferentes tipos de análisis que se han observado a lo largo de la investigación.

de estos modelos no es tan empleado. A ese incremento en el coste es necesario sumarle la incertidumbre en los regímenes de cambios bruscos, debido a que en los casos en los que no se pretenden hacer análisis muy exhaustivos, la modelización de la dinámica puede no ser fiable.

Llevada la cuestión de qué tipos de modelo son los más empleados en el campo de la modelización de las hidrolineras, se ve que para un rango parecido de precisión, no hay uno que sea predominante. Los criterios de elección suelen variar en función de lo investigado, del dominio en el que se realizan los cálculos, y de los datos que se tengan para ajustar un tipo de modelo u otro.

Por lo que se observa en la literatura, los estudios que tratan propuestas más innovadoras en cuanto al protocolo de llenado o el *layout* o los que realizan los cálculos en diferentes dominios simultáneamente tienden a emplear más el segundo tipo de modelo. En las referencias [40], [41], [42] y [43], [44] se encuentran diferentes métodos de aplicar este tipo de modelos.

Por último, se identifican los modelos basados en elementos finitos, los cuales son válidos tanto para modelizar la mecánica de los sólidos y los fluidos, los efectos térmicos, y hasta los diferentes fenómenos originados a nivel molecular y atómico.

Son modelos que no se pueden comparar en coste, aplicabilidad ni precisión a los anteriores. Son simplemente tipos de análisis complementarios, que en el caso de estos últimos pueden proporcionar información de muy alto nivel, con la condición de que un análisis elastohidrodinámico que contemple efectos térmicos, además de ser extremadamente complejo de programar, solamente se puede llevar a cabo en un único instrumento o una única región de todo el sistema de la hidrolinera. Además los tiempos de cálculo pueden ir desde las horas hasta las semanas, e incluso meses dependiendo de lo que se quiera abarcar. Por ello, este tipo de cálculo se emplea en fases más avanzadas del diseño.[45] para tanques de almacenamiento, [46] y [47] para válvulas y [48] en compresores.

Para una mayor exploración de los modelos que se plantean en este ámbito en concreto, se recomienda encarecidamente el estudio que llevan a cabo Matteo Genovese y su equipo en [7], donde clasifica decenas de estudios de los principales grupos de investigación.

7. Fundamentos teóricos

En este apartado se pretenden explicar de manera divulgativa ciertos conceptos asociados al hidrógeno, así como su comportamiento en el entorno que se utiliza, y algunas propiedades a tener en cuenta de cara a evitar errores de comprensión de los resultados.

7.1. Principios físicos del hidrógeno

El hidrógeno es uno de los elementos con más particularidades del universo, y contiene propiedades que lo convierten en único. En este subapartado se explican las bases físicas y químicas con el objetivo de llegar a alcanzar una mayor comprensión en los procesos que se describen a lo largo del trabajo y en el porqué de cada decisión.

7.1.1. La molécula H_2

En este documento solo se estudia la forma gaseosa biatómica del hidrógeno, por lo que, aunque en otras fases se emplee en infinidad de aplicaciones, las explicaciones se centran sobre todo en las propiedades que contiene en ese estado.

El hidrógeno forma moléculas diatómicas en un amplio rango de temperatura y presión. De hecho, como se puede observar en la Figura 2, es la forma que adopta en condiciones normales en la tierra, y es relativamente costoso (energéticamente hablando) conseguir llevarlo a un estado líquido o monoatómico.

Esa estabilidad que logra tener el hidrógeno en su estado biatómico, se debe en gran parte a dos fenómenos. Por una parte, se mantiene en estado gaseoso debido a que las fuerzas intermoleculares que es capaz de formar, son muy débiles. Por otra parte, no se disocia gracias al enlace covalente que crea gracias a la superposición de dos orbitales $1s$; y por tanto a que tiene la entalpía de disociación más alta de entre las moléculas homonucleares de un único enlace: 435 kJ/mol . En cuanto a otras de las propiedades de la molécula, su masa molar es de 2.016 g/mol , es inodoro, incoloro, no tiene sabor ni es tóxico para los humanos.

Uno de sus atributos más usados y evitados al mismo tiempo es su fácil combustión ya que es capaz de asociarse con el oxígeno de la atmósfera (y con otros muchos elementos como el cloro, por ejemplo) provocando una reacción altamente exotérmica. En principio esas reacciones no tienen lugar a temperatura ambiente (ya que como se ha mencionado la molécula es estable en condiciones atmosféricas), pero si se superan los 300°C comienza a formar moléculas de agua [49] Esta propiedad trae consigo la obligatoriedad de mantener unos altos estándares de seguridad.

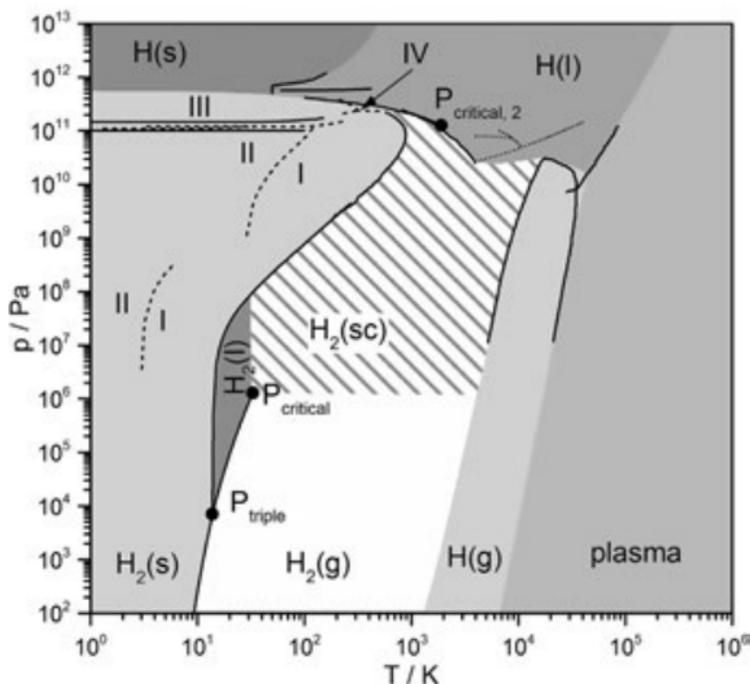


Figura 2: Diagrama de fases para el hidrógeno. Las líneas sólidas corresponden a las transiciones de fase, las líneas de puntos representan los cambios de fase según [50]. Las líneas discontinuas representan los cambios en fase sólida.[51]

7.1.2. Isómeros de espín

Los fermiones, como los electrones, los protones, y en general todas las partículas que conforman la materia, tienen un espín fraccionario ($1/2, 3/2, \dots$); a diferencia de los bosones (como los fotones, gluones...) que son los encargados de transmitir fuerzas y tienen espín entero. En la molécula de H_2 , los espines de los electrones, que ocupan el orbital de enlace, son siempre antiparalelos. Sin embargo, se permiten dos estados de spin en el núcleo. Esos dos estados se hacen llamar *orto- H_2* en el caso paralelo, y *para- H_2* en caso contrario (antiparalelo).

Debido a propiedades cuánticas, los estados *orto* y *para* no se definen de manera absoluta de forma que puedas diferenciar solo uno de los dos. Por tanto, dependiendo de la estabilidad de cada estado, que a su vez depende de la temperatura, se pueden encontrar en diferentes proporciones. [52]

A temperatura ambiente es más común encontrar *orto- H_2* en una proporción $3/4$ a $1/4$. Pero si se cambia la temperatura, o se hace uso de ciertos catalizadores, esa proporción varía como se puede ver en la Figura 3.

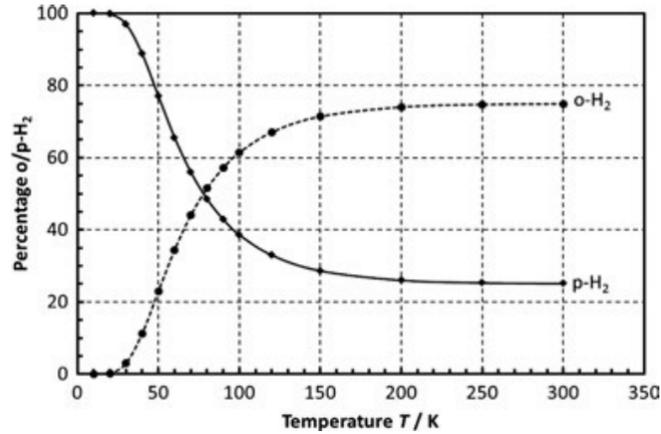


Figura 3: Composición de equilibrio de los isómeros *orto* y *para* del hidrógeno en función de la temperatura. [51]

La proporción de cada uno de los isómeros, a efectos prácticos, se manifiesta de una forma bastante discreta hasta el punto en que en ingeniería es aceptable no contemplar este fenómeno en algunos casos. Aun así, sí que hay que tenerlo en cuenta en termodinámica, ya que tiene efectos significativos en el calor específico y otras propiedades relacionadas. Se puede observar en la Figura 4 que, para temperaturas superiores a 50 K, el *para*-hidrógeno adopta valores del calor específico medido a volumen constante, mayores que el *orto*-hidrógeno.

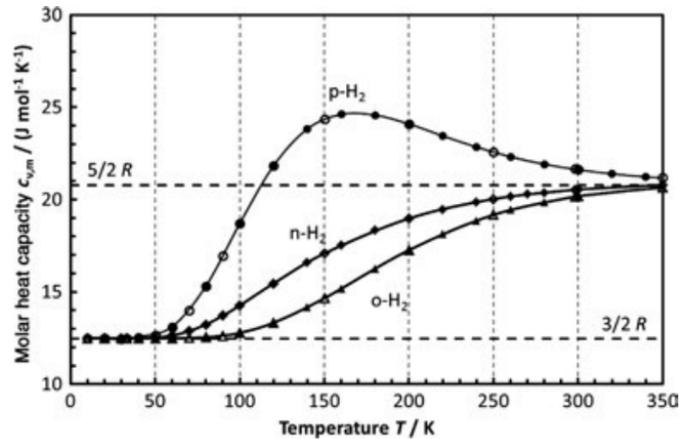


Figura 4: Calor específico medido a volumen constante frente a temperatura en función del isómero de espín. El $n\text{-H}_2$ indica los valores normales de equilibrio [51].

Esa diferencia puede provocar efectos tales como que sea más beneficioso almacenar energía térmica en uno de ellos, o que un mismo proceso logre efectos como el aumento o disminución de temperatura más rápido. Es importante recordar que en el diagrama de la Figura 2, las fases que

se muestran son las que se presentan en equilibrio. Eso origina que, ante cambios rápidos de temperatura, se pueden lograr proporciones fuera de equilibrio que puedan resultar en un mayor o menor rendimiento de un ciclo. En relación con el esto último, es sumamente interesante el concepto de entalpía de conversión; la cual se define como la diferencia energética entre los estados rotacionales ocupados, y puede hacer que mientras se dé la conversión, el sistema absorba una mayor o menor cantidad de calor que lo esperado para el equilibrio. [53].

Además del efecto en el calor específico, cabe mencionar que también se observan cambios en la conductividad térmica, la cual llega a presentar hasta 0.3 W/m K de diferencia entre un isómero y otro dependiendo del rango de temperatura (quedando siempre la conductividad del *para-H₂* por encima del *orto-H₂*).

7.1.3. Propiedades termodinámicas

Previamente se ha mencionado que para este modelo solamente se contempla el estado gaseoso en su forma biatómica homonuclear. Y es que el rango de presiones en las que se trabaja está comprendido entre 0.5 MPa y 100 MPa⁴. Por ende, aunque se llega a la fase supercrítica, no es rentable llegar a licuar el gas. Asimismo, las temperaturas a las que el gas puede llegar por seguridad son de -223.15 K en el límite inferior y de 358.15 K en el superior. En ese escenario, el hidrógeno se comporta de manera significativamente diferente a lo predicho por las simplificaciones de gas ideal biatómico.

La densidad es uno de los parámetros que mejor predicen las teorías más conservadoras. A presión constante, se incrementa de forma cuasi-lineal a medida que aumenta la temperatura. En cambio, con el aumento de presión, la relación se aleja de una cierta proporcionalidad y la pendiente con la que se incrementa la densidad, disminuye. Esa disminución es más pronunciada a temperaturas altas, y es más suave cerca de los 220 K. En la Figura 5 se puede ver su comportamiento en un gráfico tridimensional con la densidad en función de la temperatura y la presión que se alcanzan en el ciclo termodinámico.

Además, en esa misma figura se ha representado una línea que señala los puntos en los que el gas tiene una densidad de 40.5 kg/m³, ya que es la referencia que se toma para determinar que un depósito está lleno en unas condiciones de temperatura y presión determinadas.

⁴El límite superior varía en función de la norma, el protocolo de llenado, el sistema y las condiciones iniciales del entorno y el vehículo. Esta cifra se puede tomar como referencia general. En el apartado de la norma se acota con más precisión

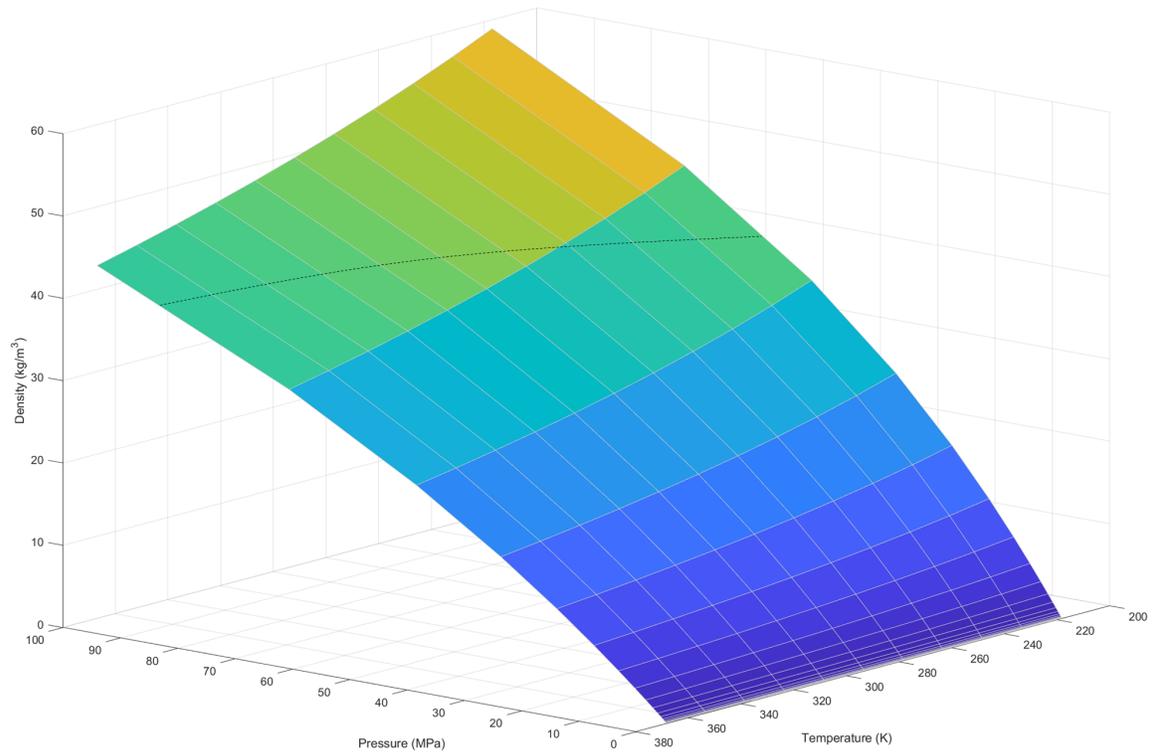


Figura 5: Densidad del H_2 en función de la presión y la temperatura en el rango del ciclo modelizado. La línea de puntos representa la unión de los puntos con $\rho=40.5 \text{ kg/m}^3$.

Se ha calculado, respecto a los datos empleados en las simulaciones, que de media (a temperatura constante) la densidad se puede representar según la función que muestra la Ecuación 1,

$$\rho = 0,8P - 0,003P^2 \quad (1)$$

La entalpía específica es otro valor de referencia a la hora de definir el estado energético de un gas. Es una propiedad que se define como: el flujo de energía térmica en los procesos químicos efectuados a presión constante cuando el único trabajo es de presión-volumen; o, dicho de otra forma, es una propiedad cuya variación expresa el calor intercambiado con el entorno, si ese proceso se hace a presión constante.

La teoría clásica define la entalpía según la Ecuación 2

$$U(S, V, N_i) - V \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_{S, N_i} = H(S, P, N_i) \quad (2)$$

que combinado con la expresión

$$P = -V \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_{S, N_i} \quad (3)$$

Se explicita la definición de la entalpía:

$$H = U + PV. \quad (4)$$

Para un volumen arbitrario, que puede ser afectado por factores externos, si se busca incrementar la presión (con el fin de aumentar la densidad del gas, la cual aumenta al disminuir la temperatura y aumentar la presión), es más eficiente hacerlo con la menor variación posible de la energía interna. Esto permite alcanzar una entalpía más baja y, por ende, invertir menos energía en el ciclo.

Si a esta idea se le añade que según la Ecuación 5, la energía interna depende del calor que se introduce en el sistema y del trabajo que se extrae

$$dU = \delta Q - \delta W \quad (5)$$

En conjunto se vislumbra que si se minimiza el incremento de energía interna, menor es el trabajo que hay que realizar; y esto a su vez, refuerza la tesis anterior.

Si se representa el comportamiento de la entalpía para las P y T posibles, el resultado es el obtenido en la Figura 6.

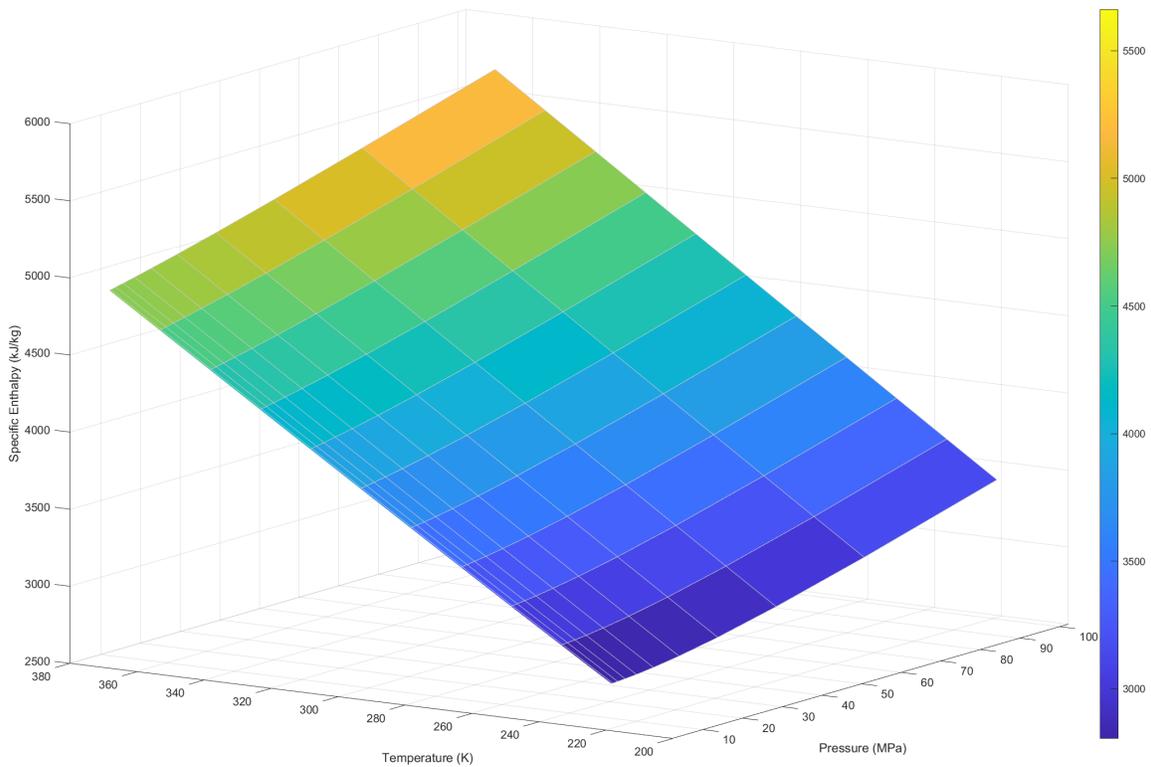


Figura 6: Entalpía específica del H_2 en función de la presión y la temperatura en el rango del ciclo modelizado. La leyenda de colores representa los valores de la entalpía específica (kJ/kg) para clarificar la lectura.

7.1.4. Efecto Joule-Thomson

En contraste con un gas ideal, la temperatura de un gas real puede cambiar en un experimento de expansión/compresión isoentálpica. Las partículas en un gas interactúan de manera atractiva o repulsiva. En el caso de interacciones atractivas, la energía potencial aumenta con el aumento del volumen. Por lo tanto, para preservar la energía interna total (U), la energía cinética de las partículas se reduce, lo que conduce a una disminución de la temperatura. Si las partículas del gas interactúan de manera repulsiva, la energía potencial disminuye con el aumento del volumen. Así, durante la expansión, la energía cinética y la temperatura aumentan. El cambio isoentálpico en la temperatura con la presión se describe mediante el coeficiente de Joule-Thomson (μ_{JT}):

$$\Delta T_H = \int_{p_1}^{p_2} \mu_{JT} dp = \int_{p_1}^{p_2} \frac{1}{C_p} \left[T \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right) - V \right] dp \quad (6)$$

donde C_p es la capacidad calorífica a presión constante. Si μ_{JT} es positivo, el gas se enfría ($\Delta T < 0$) en el caso de una expansión isoentálpica ($\Delta p < 0$). Si μ_{JT} es negativo, el gas se calienta ($\Delta T > 0$). El valor de μ_{JT} es dependiente de la temperatura y disminuye con el aumento de la temperatura. La temperatura en la cual cambia de signo se conoce como la temperatura de inversión. En la Figura 7 se observan valores de μ_{JT} para el rango de temperatura y presión que se trabaja en los modelos que se presentan más adelante.

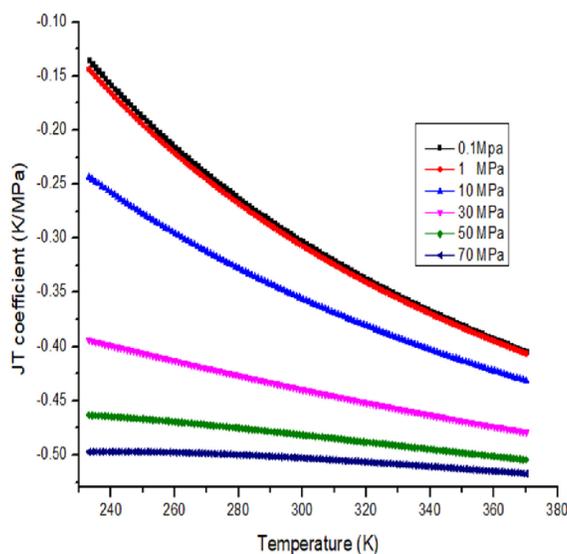


Figura 7: [35].

En las tendencias se observa que a una misma presión, el coeficiente J-T del hidrógeno disminuye con el aumento de la temperatura. Por otro lado, cuanto mayor sea la temperatura del hidrógeno, más tiende a bajar el valor de dicho coeficiente. Para la misma temperatura del hidrógeno, μ_{JT} toma valores cada vez más negativos a medida que la presión aumenta por lo que cuanto mayor sea la presión, menor será el aumento de temperatura después de atravesar una válvula o cualquier elemento que le haga perder presión.

7.1.5. Permeación

La permeación es la penetración de un fluido a través de un sólido. Este proceso pasivo se produce debido al movimiento browniano de partículas, lo que lleva a la transferencia de masa impulsada por el gradiente del potencial químico; lo que a efectos prácticos se puede sustituir por gradiente de concentración. En el contexto del almacenamiento de hidrógeno, para una aplicación inicial de las leyes generales, se asume un estado estacionario simplificado. Se considera, además, que el sistema está bajo condiciones isotérmicas, isobáricas y sin campo magnético.

La permeación implica cuatro pasos consecutivos: adsorción, absorción, difusión y desorción. Se utiliza el modelo llamado "modelo de difusión en solución" [54] para describir el proceso de permeación a través de un material no dañado y homogéneo.

La ley de Henry describe los procesos de sorción y permite calcular la concentración en la superficie S del sustrato permeado basándose en la presión parcial p , que en este caso es la presión del depósito.

$$c = Sp \quad (7)$$

Para describir la difusión, se utilizan las leyes de Fick. La densidad de flujo de partículas unidireccional a través de la membrana se describe mediante su primera ley, y relaciona el flujo difusivo j_x con el gradiente de concentración a través del material, mediante un coeficiente D , llamado coeficiente de difusión.

$$j_x = -D \frac{\partial c}{\partial x} \quad (8)$$

Para aplicar el modelo de difusión en solución, una de las suposiciones es que los procesos de adsorción y desorción son mucho más rápidos que el proceso de difusión, lo cual es cierto para los materiales que se emplean para los diferentes tipos de depósitos de hidrógeno. En ese caso, el factor limitante en el proceso de permeación es el fenómeno de difusión. Paralelamente, se sabe que el coeficiente de difusión es independiente de la concentración, siendo un parámetro constante en relación al término colocado a su derecha en la Ecuación 8; por lo que se puede simplificar la expresión a

$$j_x = -D \frac{\Delta c}{t} \quad (9)$$

siendo t el espesor de la pared del depósito. Por último, si se cumple con todas las condiciones, se pueden aunar la ley de Henry y la primera de Fick, para dar como resultado una expresión del flujo muy simplificada, que se escribe en función de la diferencia de presión, el espesor de la pared, y el coeficiente de permeabilidad, el cual es conocido para diferentes materiales y condiciones [55].

$$j_x = DS \frac{\Delta p}{t} = P \frac{\Delta p}{t} \quad (10)$$

La aplicabilidad de estas leyes unidireccionales depende de la relación entre la longitud de permeación y la superficie permeada. Si esta relación es suficientemente pequeña, la cinética de difusión se puede asumir como unidimensional. Esto es típicamente válido para depósitos a presión, ya que el grosor de la pared es aproximadamente dos órdenes de magnitud más pequeño que el área. En la Ecuación 10, queda de manifiesto que, para una mayor presión en el interior, aumentan proporcionalmente las pérdidas de hidrógeno. Aun así, si se aplica dicha ecuación tomando los datos de [51], se puede extraer que para un depósito de 5cm de espesor de pared, se pierden del orden de 0.8

$\mu\text{g}/\text{m}^2\text{s}$. Tomando esta cifra en cuenta, se demuestra, que no es necesario aplicar efectos de esta índole al modelo durante el repostaje.

8. Modelización y cálculos

Los cálculos realizados durante las simulaciones del modelo se han basado en los principios de la termodinámica clásica y la dinámica de fluidos (dentro del marco newtoniano). En momentos puntuales, en los cuales se explicita en el documento, se han tenido en cuenta teorías o leyes provenientes de otras áreas como la ley de difusión de Fick, el concepto de los isómeros de spin y formulas experimentales o estadísticas.

Primero se comentan las características generales del método de cálculo. Después, se explican ciertos conceptos sobre cada uno de los elementos que componen los diferentes modelos, junto con las ecuaciones utilizadas y la forma en la que se aplican. Por último se justifican las simplificaciones aplicadas.

Todas las simulaciones se han realizado, salvo que se especifique lo contrario, en condiciones de: presión inicial del vehículo $P=0.5$ MPa, temperatura ambiente $T_{amb}=20^\circ\text{C}$, solver: ode23t de paso variable (método trapezoidal), errores relativo y absoluto $\epsilon=10^{-4}$.

8.1. Fundamentos de *Simscape fluids*

Para poder entender el método en el que se plantea la resolución de los modelos y la forma de plantear las ecuaciones, se ve conveniente analizar el protocolo que adopta el software que se emplea.

Como se puede ver en la Figura 8, el proceso de resolución consta de varias fases antes de llegar a la resolución de las ecuaciones. A continuación, se describen los aspectos pertinentes para poder aportar una figura completa de cómo se resuelven los problemas con Simscape.

En primer lugar, la validación toma aspectos básicos que aseguran que cada parte del modelo tiene una única configuración del solucionador, y una única asignación de propiedades.

En la fase de la construcción de la red se implementan nodos en todos los componentes, y les hace cumplir dos normas fundamentales las cuales sirven para comenzar a construir el modelo matemático: dos puertos directamente conectados tienen siempre las mismas propiedades para las variables denominadas como “across”, y para variables denotadas como “through”, la suma de todos los valores que fluyen hacia un punto de ramificación es igual a la suma de todos los valores que salen de ese punto.⁵ Además de los puertos de entrada y de salida de un elemento, la red también sitúa nodos interiores en los bloques que así lo precisen, para aportar una mayor precisión en los casos que los cambios en el fluido sean notables. Con la aplicación de esas normas y la implementación de los nodos, se fija la posición relativa de cada componente y sus ecuaciones en la red, y, por tanto, el orden de aplicación de las ecuaciones que se plantean aguas abajo en el proceso.

⁵Llevando el caso a un ejemplo concreto, las variables across son aquellas que, en un circuito eléctrico, se comportan como el voltaje en las diferentes conexiones. En cambio, las variables through, son las que se pueden equiparar a la intensidad.

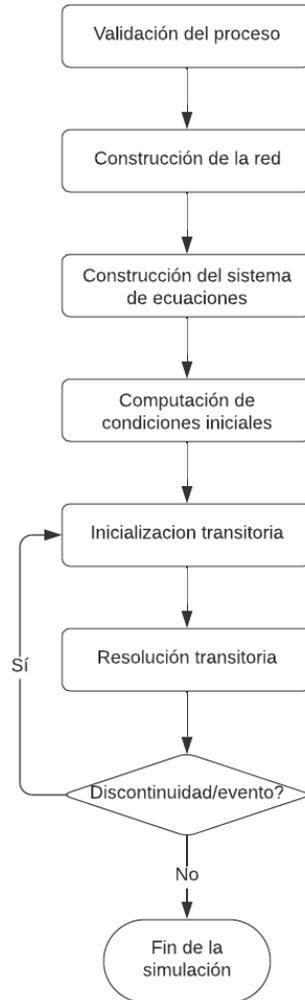
Protocolo de resolución Simulink

Figura 8: Secuencia de simulación que sigue Simscape para resolver sistemas definidos por bloques.

A la hora de definir el sistema de ecuaciones se toman en cuenta la configuración de la red, los parámetros introducidos en cada bloque, y los parámetros globales como las propiedades del fluido. Si el solucionador converge, construye el sistema de ecuaciones y define todas las variables de dos maneras, dependiendo de la forma de las ecuaciones que tengan programados los bloques: dinámicas o algebraicas. Las variables dinámicas son aquellas cuyas derivadas temporales aparecen

en las ecuaciones. El sistema las resuelve integrando numéricamente. Las variables algebraicas son aquellas que no aparecen en forma diferencial y no añaden dinámica al sistema. Así como las variables dinámicas pueden dar como resultado estados independientes de simulación, estas siempre dependen de variables dinámicas, o “input”. La fase de construcción del sistema de ecuaciones finaliza con la creación de un vector de estados que alberga únicamente las variables necesarias para definir completamente el sistema.

Las condiciones iniciales se calculan aplicando la condición de $t=0$ en el sistema de ecuaciones creado en la fase anterior. Hay bloques que permiten editar ciertos valores de iniciación y otros que contienen valores preestablecidos. El ajuste de los valores que no se pueden editar se da mediante un proceso iterativo variando los valores en función de un sistema de prioridades.

Por defecto los valores no editables de forma externa tienen una prioridad baja y en cambio para los parámetros editables es posible ajustar el grado de prioridad. De esta forma el solucionador comienza a calcular si el estado inicial es convergente para los parámetros iniciales, y si no la obtiene varía los valores de menor prioridad en la medida de lo posible. Si no se obtiene la convergencia, el solucionador cambia automáticamente los valores de prioridad alta advirtiendo al usuario. Si al final de dicho proceso obtiene valores consistentes en todos los puntos del sistema, se da por finalizada la fase. En este punto es conveniente la revisión, por parte del usuario, de los valores que se han tomado, para comprobar que no se haya cambiado ninguna condición inicial indispensable.

Existe la posibilidad de hacer cambiar la forma en la que se definen las condiciones iniciales si se requiere trabajar con un sistema de forma estacionaria y no es importante saber lo que ocurre en el periodo de inicio. Como no es el caso que plantea este trabajo, no se va a profundizar más en este aspecto. Después de calcular las condiciones iniciales, o después de un evento (como una discontinuidad resultante de, por ejemplo, la apertura de una válvula, o una parada brusca), el solucionador realiza lo que se denomina como inicialización transitoria. La inicialización transitoria fija todas las variables dinámicas y resuelve las variables algebraicas y las derivadas de las variables dinámicas. El objetivo de la inicialización transitoria es proporcionar un conjunto coherente de condiciones iniciales para la siguiente fase.

En la última fase, el solucionador integra numéricamente las ecuaciones diferenciales continuas hasta que se encuentra lo que denomina como evento (una discontinuidad o un cambio de signo en alguna de las funciones). En ese momento se vuelve atrás fijando los valores de las variables dinámicas y se calculan los valores de las variables algebraicas; lo que supone un nuevo punto de partida para integrar de nuevo las ecuaciones diferenciales. El proceso se acaba cuando se llega al tiempo de simulación fijado.

Concluido el análisis básico del proceso de resolución, es importante entender que la estructura nodal y la forma en que se calcula la dinámica del sistema hacen que las propiedades del fluido en un punto y un momento concretos dependan solo de otros dos conjuntos de datos: las propiedades del fluido en el mismo nodo un instante anterior, y las del nodo contiguo situado aguas arriba en el flujo, en el mismo tiempo.

8.1.1. Balances generales de masa y energía

Las ecuaciones que describen el modelo se construyen de tal forma que los balances de masa y energía se plantean en todos los nodos de la red. Esos nodos tienen asignados unas dimensiones determinadas y actúan como si de un volumen de control se tratase, pero con esa metodología se asumen ciertos factores, tales como que las propiedades de un fluido en todo el volumen que abarca un nodo son iguales, o que un nodo no es capaz de acumular masa y energía (a no ser que se especifique explícitamente).

Para un volumen de control dado, si se realiza el cálculo con un único fluido que no reacciona el balance de masa adopta siempre la forma de

$$\frac{dm}{dt} = \dot{m}_{in} - \dot{m}_{out} \quad (11)$$

Donde $\frac{dm}{dt}$ es el ratio de velocidad con la que cambia la cantidad de masa en el volumen de control, y \dot{m}_{in} y \dot{m}_{out} son respectivamente los flujos máscicos entrantes y salientes. Si se desprecia la acumulación de masa se puede simplificar el problema a que $\frac{dm}{dt}=0$, concluyendo en

$$\dot{m}_{in} = \dot{m}_{out} = \dot{m}. \quad (12)$$

En general los componentes que se emplean para el modelo (a excepción de los depósitos, los cuales son precisamente acumuladores de masa y la ecuación se aplica despreciando la masa entrante o saliente) se pueden considerar lo suficientemente “pequeños” como para que los diferenciales de masa no supongan unos errores perceptibles en los cálculos.

El balance de energía genérico en un volumen de control para un elemento que no reacciona se puede escribir de la siguiente manera:

$$\frac{dU}{dt} = \dot{Q} - \dot{W} + \dot{m}(h_{in} - h_{out}) \quad (13)$$

En la expresión anterior $\frac{dU}{dt}$ representa el ratio de acumulación de la energía interna del fluido en el volumen de control, \dot{Q} representa el flujo de calor entrante en el sistema, \dot{W} es la potencia de trabajo que proporciona el sistema (dicho de otra manera es la derivada temporal del trabajo que se extrae del sistema)⁶ y por último h_{in} y h_{out} son las entalpías de los flujos de entrada y salida.

En el caso particular de Simscape, debido al método de cálculo, la acumulación de energía no se permite en un nodo o un componente el que no esté explícitamente programado para ello. Por tanto, si la relación $\frac{dU}{dt}$ se anula, la expresión general de la energía adopta la forma simplificada de:

$$\dot{W} - \dot{Q} = \dot{m}(h_{in} - h_{out}) \quad (14)$$

Como se puede ver más adelante, hay bloques en los que las ecuaciones de continuidad se particularizan para integrar en ellas otras condiciones adicionales (por ejemplo, en el compresor de desplazamiento positivo). En cualquier caso, cuando no se explicita lo contrario, las Ecuaciones 12 y 14 son las empleadas para realizar los cálculos.

⁶Véase que se ha seleccionado el convenio de signos $U = Q - W$. Dependiendo de las fuentes de información que se escojan, los signos, y por tanto el sentido físico de \dot{W} puede variar de tal forma que si se toma que para un sistema cerrado $U = Q + W$, el trabajo positivo es ahora el que el sistema recibe. En cualquier caso, ambas formas son igual de válidas.

8.2. Depósitos

Según la normativa vigente, no hay apenas limitaciones acerca de las características de este tipo de depósitos. Si estos cumplen con los estándares de seguridad marcados para los materiales resistentes al hidrógeno, las especificaciones de presión y otros mínimos de seguridad como resistencia a impactos, fuego... [56] no se acota ninguna pauta especialmente remarcable en este apartado. Se pueden encontrar dichas especificaciones en [10].

La geometría usada en estos depósitos es habitualmente, de tipo cilíndrico. Esto se debe por un lado a la relativa versatilidad que presentan respecto a los métodos de fabricación, y por otro a la gran capacidad de resistir presiones en su interior. Existen numerosas investigaciones que buscan cambiar la forma para integrarla adecuadamente en el chasis de un vehículo convencional, pero por el momento no ha habido propuestas reales en este ámbito. En la Figura 9 Se pueden observar los 3 componentes de un depósito tipo IV: el refuerzo o parte resistente, el “liner” y el “boss”.

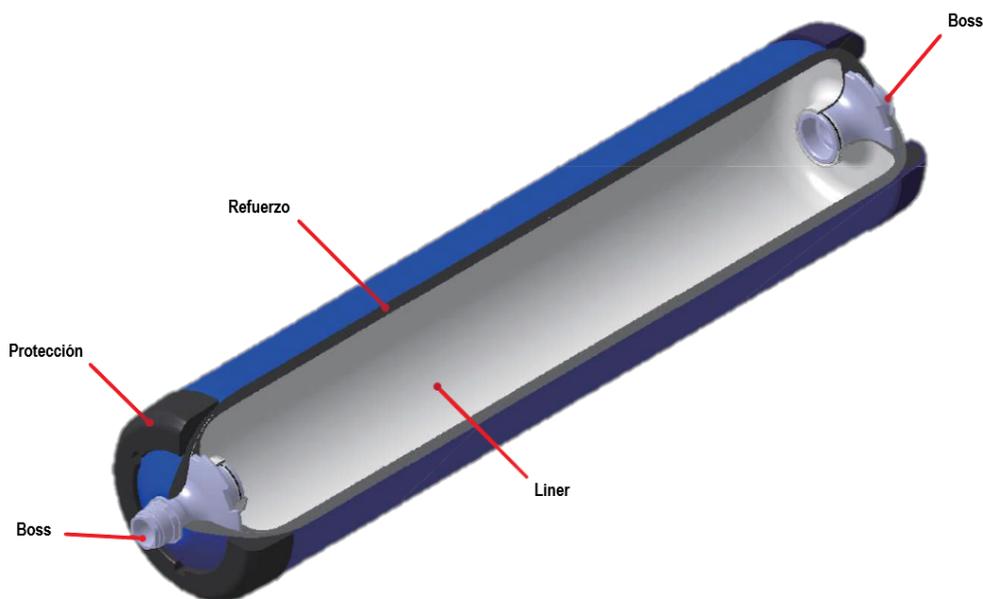


Figura 9: Esquema visual de un depósito de almacenamiento de hidrógeno correspondiente a un depósito de tiempo IV.

Los materiales empleados para los depósitos de hidrógeno, según su tipo, se muestran en la Tabla 3 y la Figura 10. Generalmente para los depósitos de baja presión (LPT) se tienden a utilizar diferentes aceros inoxidables o aluminio de la familia 6000, con un posible refuerzo de composite si las presiones son mayores a 20 MPa (normalmente fibra de carbono con matrices epoxídicas). En cambio, para los depósitos de alta presión como las de un vehículo, la tendencia es a emplear materiales compuestos por su ligereza y resistencia, y evitar los materiales metálicos. El tamaño en estos casos suele ser menor que en los almacenamientos de baja presión.

Tabla 3: Tipos de tanques de almacenamiento de hidrógeno gaseoso a presión. [57],[39]

Tipo	Metal	Composite	Polímero	Presión típica (bar)
I	Acero/Al	-	-	Aluminio: 175 Acero: 200
II	Acero/Al	Composite añadido mediante <i>filament winding</i> ⁷ en la parte cilíndrica	-	Al/f. de vidrio: 263 Acero/f. de carbono: 299
III	Al/ Acero (liner)	Cobertura de composite (fibra de vidrio, aramida o fibra de carbono)	-	Al/f. de vidrio: 305 Al/aramida: 438 Al/f. de carbono: 850
IV	-	Cobertura de composite (fibra de carbono)	Polímero (liner)	350-900
V	-	Composite	-	1000

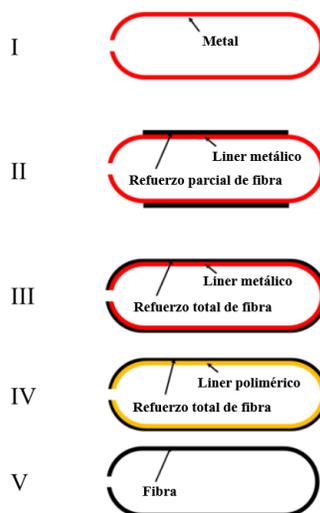


Figura 10: Esquema conceptual de cada tipo de depósito de hidrógeno, según la clasificación de la Tabla 3.

Respecto al volumen y las presiones que puedan almacenar, estas varían dependiendo del tipo de instalación, características generales de la hidrolinera, y demás particularidades, pero en todos los casos es de libre elección. Debido a la falta de una tendencia marcada, o de regulaciones, se han identificado los siguientes factores para tomar como referencia a la hora de dimensionar y seleccionar el tipo de almacenamiento:

1. Costes y requerimientos de fabricación para el tipo seleccionado
2. Presión de generación o presión de suministro
3. Volumen de hidrógeno a suministrar sin recarga de los tanques de baja presión
4. Masa transferida al vehículo objetivo en una descarga

El primer factor que se menciona es general y abarca dentro de sí numerosos condicionantes. En general es difícil de acotar, ya que, dependiendo del momento, el lugar y los medios disponibles, hay que calcular la rentabilidad de cada caso. Aun así, el coste de fabricación se puede determinar en orden ascendente desde el tipo I al tipo V, por lo que es común usar depósitos de tipo I o II para depósitos de baja presión.

Dependiendo del tipo de estación de repostaje, la presión a la que se recibe el hidrógeno puede ser la definitiva o no. En el caso de las estaciones que reciben el hidrógeno desde el exterior (en fase gas), lo hacen a presiones de entre 20 MPa y 50 MPa [58], por lo que es interesante acomodar las instalaciones a la entrada de presión del suministrador para evitar pérdidas de energía [59]

Si el hidrógeno gaseoso se produce *in situ*, la casuística es más flexible. Se ha visto que la generación de hidrógeno de alta presión puede resultar más eficiente si su producción está destinada al repostaje [60]. El uso de estos equipos es objeto de estudio y cada vez se logran cotas más altas de presión, llegando incluso a conseguir una media de presión que ronda valores de entre 30 y 50 MPa, y 70 MPa en los casos más avanzados [61]. Aun así, la producción de hidrógeno a bajas presiones (en torno a 0.6 MPa) sigue siendo mayoritaria en la industria actual y en estos casos la planta de producción suele ir acompañada de un compresor que pueda aumentar la densidad del hidrógeno hasta la cota deseada para que sea almacenado sin ocupar un volumen excesivo.

Respecto al volumen de hidrógeno suministrado sin rellenar los tanques de baja presión, los factores a considerar dependen del desarrollo de la tecnología de los coches de hidrógeno y de la infraestructura de repostaje. Hay varios trabajos en los que se estudian los requisitos para una cadena de repostaje eficiente como [62], [63], [59], [64], por lo que, de cara a construir una estación comercial, son el tipo de referencia a tener en cuenta. Para este trabajo solo se han tenido en consideración los valores de manera orientativa.

La masa de hidrógeno transferida a los vehículos por repostaje sí es una cuestión con consecuencias directas para el proceso. Volviendo a la Ecuación 3 del apartado anterior, se puede ver que la evolución de la energía interna es dependiente de la presión y el volumen. Si a volumen constante se lleva a cabo una despresurización adiabática (tal como pasa en el LPT cuando se empieza a transferir masa al compresor), se ve que la energía interna debe disminuir de manera proporcional a la bajada de presión. En la aproximación de gases ideales, la cual nos es suficiente para entender los fenómenos que ocurre dentro del depósito, la expresión queda de tal forma que la temperatura y la energía interna de un gas también son directamente proporcionales con un factor C_v (calor específico a volumen constante), y por tanto se puede ver que un mayor ratio de descompresión genera una bajada más pronunciada en la temperatura. Este fenómeno puede llevar en alguno de los casos (si el LPT es demasiado pequeño), a bajar del límite inferior de temperatura permitida por las normas actuales. En el apartado de análisis de resultados se discuten posibles métodos para evitarlo, y en la medida de lo posible, ganar eficiencia energética.

Teniendo en cuenta todos los factores mencionados, se ha tomado para el modelo, una capacidad de 60 kg de gas, capaz de almacenar hidrógeno a 20 bar. Si la densidad del gas es de 14.70 kg/m^3 , el volumen necesario resulta en 4.08 m^3 . La presión de 20 bar se ha seleccionado porque se ha querido forzar una situación desfavorable, y así poder sacar conclusiones en un espectro más amplio de casos. Además, se ha comprobado que por ejemplo en uno de los laboratorios más importantes en esta

área, el “Hydrogen Research and Fueling Facility” de la universidad de California en Los Ángeles tiene unas características similares. Esto ayuda a tener datos contrastables con experimentos reales.

Las ecuaciones que se emplean para determinar los fenómenos que ocurren en el interior de los depósitos y en los puertos de entrada/salida, son exactamente las proporcionadas en el apartado de los balances de masa y energía. Al mismo tiempo, la presión del nodo situado inmediatamente antes o después de los nodos situados en las conexiones al exterior, se igualan con las del interior; aboliendo cualquier pérdida de carga en este sentido. En cambio, la temperatura no se considera igual y se calcula a través del balance de energía.

8.3. Compresor

8.3.1. Descripción general

El compresor es una de las partes cruciales del proceso. En la configuración actual de presurización directa, debe tener la versatilidad para ajustar la tasa de presurización (APRR) del destino (con la ayuda de las diferentes válvulas aguas abajo) con gran precisión, ya que las fluctuaciones en el flujo pueden originar fallos de exceso de caudal, presión o temperatura. Además de eso, es imprescindible que la admisión no baje de la que se ha denominado presión mínima admisible (que son 0.5 MPa manométricos), ni que en el transcurso del gas por este, se excedan los límites de temperatura, tanto en sus cotas superiores como en los inferiores.

Los compresores mecánicos son los más comunes hoy en día, sobre todo en aplicaciones de alta presión y caudal moderado. Se basan en transformar directamente la energía mecánica en energía de presión. Dentro de estos, existen diferentes tipos de compresores, pero los de “desplazamiento positivo” son los más utilizados para altas presiones. Estos funcionan reduciendo el volumen de una cámara donde se encuentra el hidrógeno gaseoso, lo que comprime el hidrógeno.

Para el caso que nos ocupa, se busca una configuración con la que se pueda aumentar la presión del LPT, ya preestablecida en 20 MPa, hasta la presión objetivo. Según la SAE J2601 y sus derivadas, la presión máxima alcanzable en un depósito de vehículo ligero de pila de combustible de hidrógeno es de 87.5 (1.25 veces la presión de servicio, que es 70 MPa [65], y a causa de las pérdidas de carga, y efectos propios de cada protocolo de llenado, es común presurizar hasta superar los 90 MPa (aunque la presión del depósito no supere los 87.5 MPa). Algunos compresores de desplazamiento positivo pueden aumentar la presión más de lo necesario para aplicarla en una etapa, pero en el proceso pueden generar temperaturas y presiones que salen de lo establecido por la norma. Por tanto, se opta por un compresor multietapa.

Entre los compresores más utilizados en el ámbito de las hidrolineras, se ha estudiado la posibilidad de implementar: un compresor alternativo, un compresor de diafragma o un compresor lineal [66]. Los compresores alternativos son probablemente los más conocidos por su simpleza y efectividad al elevar la presión significativamente. En el ámbito del hidrógeno se pueden encontrar en multitud de procesos que requieran presiones mayores a 3 MPa, sobre todo las versiones sin aceite [51]. Los compresores alternativos consisten en un sistema cilindro-embolo que presuriza el gas controlando la entrada y la salida del gas en la cámara de compresión mediante dos válvulas automáticas que funcionan fundamentalmente como válvulas antirretorno. Ese ciclo se muestra de forma más clara en la Figura 11

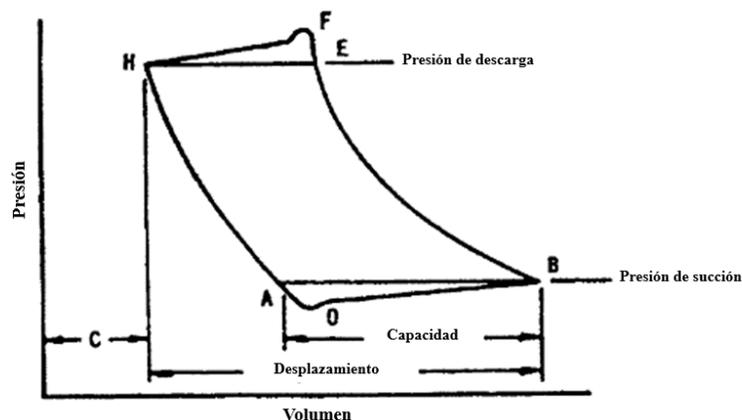


Figura 11: Representación de un proceso termodinámico no ideal correspondiente al ciclo completo de la carrera de un pistón en un cilindro cerrado (Bloch Hoefner, 1996)

Cada vez que el pistón recorre la carrera en uno de los sentidos (expansión completa o compresión completa) se considera el camino BH. El recorrido BEHA es la representación ideal de un ciclo completo donde, B y H marcan los extremos de la carrera (H para cuando el pistón está completamente desplegado y B en la situación opuesta), y los puntos A y E representan las aperturas de las válvulas de entrada y de salida respectivamente. En cambio, el recorrido BEFH es una aproximación más práctica. Dentro de ella, el área AOB representa las pérdidas de carga a lo largo de las válvulas de entrada, al igual que EFH las pérdidas en las válvulas y el puerto de salida. Cuando se amplían dichas áreas se incrementa la demanda de potencia.

Además de las mencionadas, existen otras consideraciones relevantes. Durante la compresión, representada gráficamente como BE, hay que considerar que una pequeña cantidad de gas se escapa continuamente entre las juntas del pistón y en las válvulas de admisión y aunque a este gas se le realiza trabajo, este no se dirige al sistema de descarga. Además, el flujo más allá de las válvulas de descarga permite que el gas que ya se ha suministrado al sistema de descarga regrese al cilindro, lo que da lugar a una nueva compresión. A menos que las fugas sean excesivas, la ubicación teórica del punto E en el proceso de compresión no se ve alterada de manera significativa. Sin embargo, se produce una pérdida global en términos de eficiencia del sistema. En primer lugar, se necesita introducir más gas en el cilindro para compensar el rozamiento de los segmentos del pistón y las fugas en las válvulas de admisión. En segundo lugar, se realiza trabajo sobre una cantidad de gas perdida, y, por último, las fugas a través de las válvulas de descarga deben volver a comprimirse y suministrarse al sistema de descarga.

Otro factor a considerar es el efecto refrigerante de la camisa del cilindro. La disipación de calor a través del sistema de refrigeración hace aumentar la densidad durante la compresión y tiende a desplazar el punto "F" hacia la izquierda, lo que resulta en una disminución de la potencia requerida. Esto representa un ahorro real de potencia, aunque su importancia varía según el tamaño del cilindro y las condiciones operativas. En cilindros pequeños, con gases de baja densidad, relaciones de compresión elevadas, y una superficie de camisa proporcionalmente grande, son las condiciones

en las que mayor es el incremento de rendimiento. Esas son precisamente las condiciones en las que se trabaja con el hidrógeno, por lo que es recomendable añadir un sistema de refrigeración.

8.3.2. Aplicación matemática

El bloque predeterminado de compresor de desplazamiento positivo es el indicado, según el desarrollador, para simular un sistema de pistón alternativo o un compresor de diafragma. El flujo másico se calcula con la ecuación

$$\dot{m} = \eta_V w \frac{V_d}{v_s} \quad (15)$$

donde w es la diferencia de velocidad angular entre los dos puertos físicos del bloque, v_s es el volumen específico en la entrada del compresor, V_d es el volumen de desplazamiento y η_v es la eficiencia volumétrica. Dicha eficiencia se calcula según

$$\eta_V = 1 + C - C \left(\frac{p_{out}}{p_{in}} \right)^{\frac{1}{n}}, \quad (16)$$

con la constante c determinada por

$$C = \frac{1 - \eta_{Vnominal}}{p_{ratio}^{\frac{1}{n}} - 1} \quad (17)$$

En las ecuaciones 16 y 17 se ve reflejado que el modelo toma como referencia las ecuaciones para un sistema politrópico donde n es el exponente. Ese valor, para los compresores de este estilo oscila entre 1 y R , siendo R el cociente entre el C_p y el C_v , que se aproxima a 1.4 en el caso de los gases biatómicos. Cuanto más calor generado en la compresión sea extraído del sistema, más cercano a 1 es el exponente. Toma el valor de 1 si el proceso se puede considerar completamente isotérmico, lo cual es deseable. En cambio, si la cámara de compresión se considera con aislamiento adiabático, de manera que el calor generado no puede escapar, el exponente toma el valor de 1.4. Ajustando este parámetro se consiguen simulaciones en las que no hay presencia explícita de una refrigeración del cilindro mediante una camisa, pero se perciben los efectos de la pérdida de calor.

En la Figura 12 se puede ver la eficiencia volumétrica en cada etapa del compresor utilizado. Se evidencia la necesidad de la implementación de más de una etapa, para así reducir el ratio de presión entre la entrada y la salida, y aumentar el rendimiento. Además, hay que considerar que hay otras razones a favor de las múltiples etapas, como el dimensionamiento del cilindro o la discontinuidad del flujo.

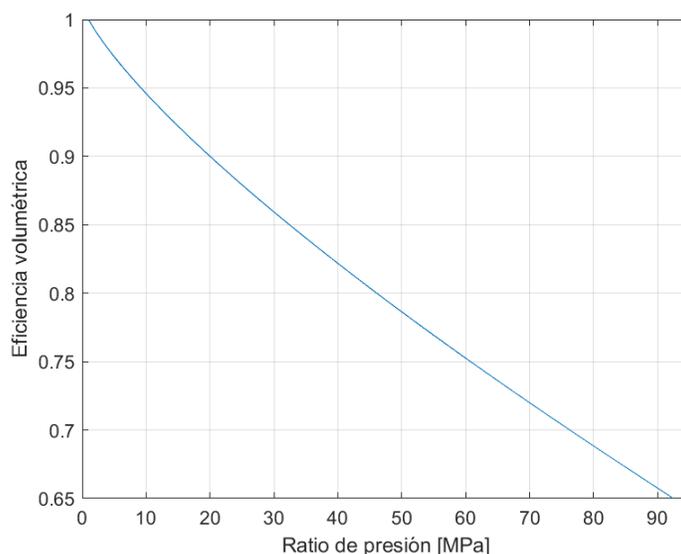


Figura 12: Eficiencia volumétrica de cada etapa independiente del compresor

El rendimiento volumétrico de un compresor de gas es el cociente entre el flujo volumétrico real y el flujo ideal. El flujo volumétrico real es el volumen real de gas suministrado por el compresor por unidad de tiempo, teniendo en cuenta factores como el volumen de holgura, las pérdidas de las válvulas y otras ineficiencias; en cambio, el flujo volumétrico ideal es el volumen máximo teórico que el compresor podría desplazar por unidad de tiempo si no hubiera pérdidas internas y el proceso de compresión fuera ideal.

Si el proceso se supone politrópico, dicho rendimiento se puede expresar en términos de presión de la siguiente manera

$$\eta_V = 1 + PV^{n(1-p_{ratio}^{1/n})}, \quad (18)$$

donde P y V son valores de la presión y el volumen del gas en un instante arbitrario de la fase de compresión, y n es el exponente politrópico del ciclo.

Tomando ahora el gráfico de la Figura 13, un proceso de compresión en una sola etapa se representa con una línea continua desde el punto 1 hasta la presión de salida de referencia p_4 . En las condiciones a las que se trabaja en los compresores alternativos (en los cuales el gas entrante no reacciona) el exponente politrópico solo puede tomar valores de entre k^8 y 1; siendo el primero de ellos, la representación de un proceso isentrópico (siguiendo la línea 1-e), y el segundo un proceso isotérmico perfecto (representado por la línea discontinua entre 1 y 4').

La energía consumida por el compresor es igual al trabajo necesario para comprimir el gas, que equivale al área debajo de cada función en el gráfico P-V. En el caso de comprimir en una sola etapa, si se parte de un mismo punto (se toma como referencia el estado 1), el trabajo mínimo se

⁸ k es en este caso el coeficiente resultante del calor específico a presión constante dividido por el calor específico a volumen constante, que para gases diatómicos suele aproximarse a 1.4.

consigue con el n mínimo. Sin embargo, si se analiza el sentido físico de ese proceso, rápidamente se ve que el flujo de calor saliente del compresor debe aumentarse a cotas inalcanzables en un caso práctico.

Hay dos principales razones por las que es inviable plantear refrigeraciones muy severas dentro de la cámara de compresión en los ciclos que se estudian en este trabajo. La primera es que, para conseguir flujos muy altos de calor, no es económica y energéticamente rentable diseñar una refrigeración con un fluido notablemente por debajo de la temperatura a la que se trabaja con el gas en el compresor. La segunda razón es que, dado que las presiones a las que se trabaja, y los problemas de fragilización por hidrógeno, el abanico de materiales que se pueden utilizar es relativamente reducido, por lo que los criterios de selección no priorizan una alta conductividad térmica. En consecuencia, se puede aspirar a obtener valores de n entre 1.2 y 1.35 en procesos reales. Eso conlleva que para mejorar la eficiencia, es necesario implementar la presurización en fases diferentes y añadir refrigeración entre las diferentes etapas de compresión. Ese proceso ofrece la posibilidad de utilizar elementos más propicios para la refrigeración que las camisas utilizadas para los cilindros.

En la Figura 13 se puede ver la diferencia en el comportamiento entre la compresión en un único paso y en diferentes etapas. En el caso que se representa, la compresión es adiabática en todas las etapas, y el enfriamiento entre fases se realiza hasta recuperar la temperatura inicial. Llevado a la práctica, es muy complicado enfriar el gas hasta la temperatura inicial, ya que para que el cambio suponga un ahorro de energía real, el enfriamiento se ha de dar con un fluido a una temperatura cercana a la del gas en la entrada de la primera etapa.

Se ha mencionado anteriormente que el área comprendida debajo de la gráfica de P-V representa la energía invertida para comprimir el gas. Por tanto, si se diferencian los procesos 1-e y 1-2-3-4, y se realiza una resta, queda claro que el área entre la línea discontinua que define el segundo proceso y el primero, es la representación gráfica del trabajo ahorrado. Ese ahorro se hace proporcionalmente más pequeño a medida que el exponente politrópico disminuye, ya que el punto e se va trasladando hacia la izquierda.

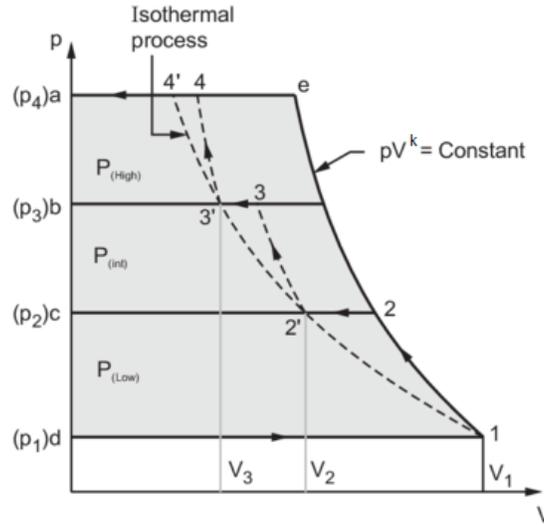


Figura 13: Representación gráfica de la comparativa entre un proceso de compresión adiabático en una sola etapa, en tres etapas con refrigeración intermedia y un proceso completamente isotérmico. [67]

La ecuación de continuidad de masa se aplica tal y como se muestra en su forma general en la Ecuación 11, con la condición de que no se acumula masa en ningún momento del proceso. La ecuación de potencia en cambio se simplifica como

$$\phi_A + \phi_B + \dot{m}\Delta h_t = 0, \quad (19)$$

y el cociente entre la masa y la variación de la entalpía del fluido se iguala a la definición de la potencia mecánica $\dot{m}\Delta h_t = wT$ y T se calcula mediante la siguiente ecuación siguiendo las imposiciones de proceso politrópico:

$$T = \frac{n}{n-1} \eta_V p_{in} V_{despl} \left[\left(\frac{p_{in}}{p_{out}} \right)^{(n-1)/n} - 1 \right] \quad (20)$$

ϕ_A y ϕ_B son los considerados valores de flujo de energía en los puertos de entrada y salida del bloque. Estos se componen de la suma de dos términos principales, resultando, para un nodo situado en el puerto arbitrario A en

$$\phi_A = G(h_A - h_I) + \dot{m}h_A \quad (21)$$

siempre y cuando el flujo sea entrante en A y fluya hacia el nodo I. En la Ecuación 21 el coeficiente G se denomina coeficiente de conductividad térmica y se calcula en cada punto y en cada momento de la siguiente manera

$$G = \frac{kA}{CvL} \quad (22)$$

donde k se refiere a la conductividad térmica del fluido, A es el área de la sección perpendicular al flujo y L es la longitud virtual entre los nodos. Así este coeficiente funciona a modo de parámetro de ajuste o corrección a la hora de evitar discontinuidades o saltos abruptos en los valores de la energía.

El nodo I corresponde al nodo (o nodos) interiores a los que se ha hecho referencia anteriormente. A pesar de que el bloque en cuestión pueda no contener un volumen real, el nodo se coloca igualmente para calcular la diferencia de entalpía entre la entrada y el interior.

8.4. Intercambiador de calor

8.4.1. Descripción general

El intercambiador de calor es junto con el compresor, el elemento que más energía consume de todo el proceso. Las exigencias en este elemento varían en función del protocolo seleccionado para realizar el llenado del depósito de los vehículos de celda de combustible, ya que un menor tiempo de llenado o una mayor presión de destino, requieren una cota de temperatura más baja en la salida de la manguera. En la Figura 14 Se observa el esquema del sistema.

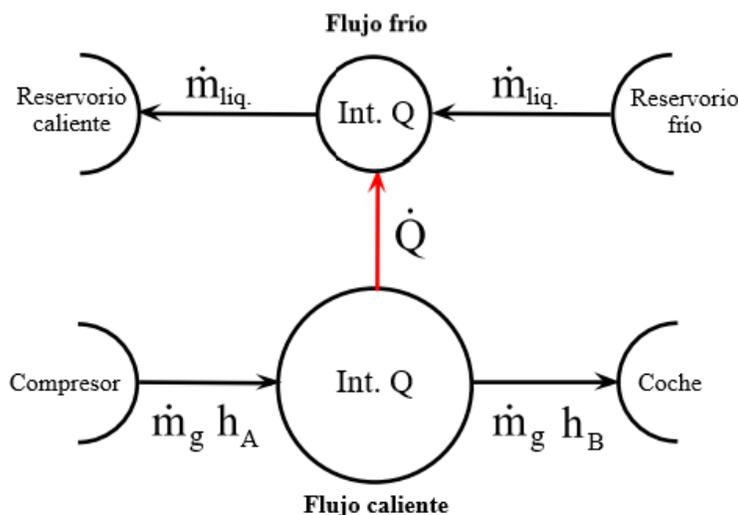


Figura 14: Esquema conceptual de los flujos implicados en el intercambiador de calor, tal y como se emplea en las estaciones de servicio de hidrógeno convencionales

En este trabajo, se ha analizado el escenario más desfavorable en este aspecto, ya que se ha tomado de base el protocolo con las exigencias más estrictas. En concreto, la temperatura a la que se quiere llegar en la entrada del coche es de -40°C siguiendo el protocolo establecido. Para enfriar el hidrógeno a esas temperaturas, aunque la velocidad del gas por una única tubería no supere los 3 m/s el fluido con el que se trabaja para que absorba el calor del gas se enfría primero a -55°C . Esa es la temperatura que se ha seleccionado en este trabajo, determinada por las dimensiones del intercambiador. En este aspecto, hay diversidad de valores tanto en la literatura como en la práctica, comprendidos entre -60°C y -45°C .

No es objeto de estudio, el análisis exhaustivo de la temperatura de enfriamiento en el consumo energético general, debido a que el grado de precisión al que se llega con el modelo, no es el

suficiente como para extraer conclusiones fehacientes. Por tanto, se hace el estudio energético sobre la temperatura que se ha seleccionado. Igualmente, la energía que se ha medido es la que pierde el gas en el intercambiador, y no la energía real que se pueda consumir para realizar el enfriamiento completo, ya que el hacerlo supone un estudio en profundidad de los procesos de enfriamiento para fluidos a temperaturas criogénicas, y el modelizarlo sin realizar dicho estudio puede acarrear que los resultados no sean relevantes.

Entonces, cuando se habla de la energía del intercambiador, se habla de un funcionamiento ideal en el que no hay pérdidas por la parte del líquido refrigerante ni en el ciclo de refrigeración del mismo. Para saber las diferencias que suponen las mediciones frente al consumo real, se ha realizado la comprobación adoptando las condiciones de uso de 2 compresores de diferente tamaño de *Mydax* [68], y los valores de potencia obtenidos para cada caso han sido los siguientes: 74.012 kW frente a 76 kW del catálogo en el caso de una temperatura de entrada de 40°C y -40°C de salida con un caudal de 0.06kg/s, y 29.499 kW predichos frente a 31 kW del catálogo con un caudal de 0.02783 kg/s. Con ello se comprueba que el modelo aproxima satisfactoriamente la energía consumida en el intercambiador, y que el valor real de la potencia media consumida es un valor cercano a 1.027 y 1.05 según los resultados obtenidos. La validez de estos resultados y su rango de aplicación se debaten en su correspondiente apartado. Hay que decir que, los catálogos son bastante optimistas, o que el intercambiador es menos eficiente que el de *Mydax*, porque los coeficientes son demasiado bajos para acarrear con todas las ineficiencias desde la conexión eléctrica, pasando por el motor eléctrico, el compresor del refrigerante... hasta el intercambio de calor en sí mismo.

8.4.2. Aplicación matemática

El método de cálculo seleccionado para el intercambiador de calor es el denominado método de efectividad-número de unidades de transferencia (effectiveness-NTU model). Es el método más empleado cuando no se conocen una o varias temperaturas de antemano, es decir, cuando no se dispone de información suficiente para calcular la transferencia de calor mediante la diferencia de temperatura media logarítmica (LMTD)⁹. Por ejemplo, si se desea deducir las temperaturas de salida de las dos corrientes (gas y líquido refrigerante), se recurre al método NTU [69].

Por otro lado, la eficacia de un intercambiador de calor puede definirse como la tasa de transferencia de calor real con respecto a la tasa de transferencia de calor máxima posible. De manera analítica se puede expresar como

$$\epsilon = \frac{\dot{Q}}{\dot{Q}_{max}} \quad (23)$$

Siendo \dot{Q}_{max} la transferencia de calor en un escenario donde el área de transferencia de calor es infinita. Este método postula que la transferencia de calor es función del número de unidades de transferencia o NTU, que es a su vez una medida de la facilidad con la que el calor se transfiere entre los diferentes flujos del intercambiador, en relación a la facilidad con la que dichos flujos absorben ese calor.

$$NTU = \frac{1}{RC_{min}} \quad (24)$$

⁹El método LMTD es una técnica utilizada sobre todo en intercambiadores de calor, la cual hace uso de las temperaturas de entrada y de salida del fluido caliente y el frío para obtener el flujo de energía calorífica transmitido.

En la Ecuación 24 La C_{min} representa la tasa de capacidad calorífica más pequeña entre los dos flujos, o dicho de otra manera, el cociente entre el flujo másico y el calor específico a presión constante del flujo menos capaz de absorber calor. R es la resistencia térmica calculada mediante el método con el mismo nombre. Para el cálculo de esta resistencia en concreto, se toman en cuenta las resistencias locales, tanto de los efectos convectivos entre fluido y pared, como de los conductivos entre las diferentes capas. Por el método de resolución que utiliza el software (la resolución de ecuaciones de estado en una red de nodos), no se puede considerar la temperatura de la capa límite, ya que no se implementa un nodo específico para esto. Aun así, como bien se especifica en sus debidos apartados, no es un tema de especial importancia ya que el flujo es altamente turbulento y el gas de hidrógeno tiene una de las conductividades térmicas más altas. Expresando la R como una concatenación en serie de las resistencias locales asociadas a los efectos mencionados se llega a la siguiente expresión:

$$R = \frac{1}{U_g A_g} + \frac{F_g}{A_g} + R_p + \frac{F_l}{A_l} + \frac{1}{U_l A_l} \quad (25)$$

donde U es el coeficiente de transferencia de calor de convección (del dominio gas y dominio líquido), A es la superficie de transmisión de calor de cada dominio y F es el llamado factor de suciedad (fouling factor), que determina el flujo de calor por metro cuadrado de una capa adyacente a la pared del intercambiador. En los casos de estudio propuestos aquí, no se considera la posible suciedad porque no suscita interés el empeoramiento del rendimiento de los intercambiadores de calor, causado por este fenómeno.

Respecto a la pared, además de representar un mero valor de resistencia se le atribuye la capacidad de almacenar calor, lo cual implica que el cambio de temperatura va a funcionar con una cierta inercia o retraso. El software ofrece además la opción de añadir dinámica a la evolución de la temperatura en la pared, a costa de añadir carga computacional en forma de ecuaciones diferenciales que el solucionador tiene que integrar en cada evento¹⁰. En nuestro caso no se han contemplado esos efectos.

La efectividad viene condicionada, además de los factores ya mencionados, por el modo en el que fluyen los diferentes fluidos. En este aspecto, el software hace uso de tablas de valores para cada tipo de flujo, y elige valores de efectividad (entre 0 y 1) dependiendo del NTU calculado. Así las formas que toman las curvas de efectividad dependiendo del flujo son de la forma en la que aparecen en la Figura 15.

¹⁰entendiendo evento como se ha definido en el apartado donde se explica el protocolo de resolución

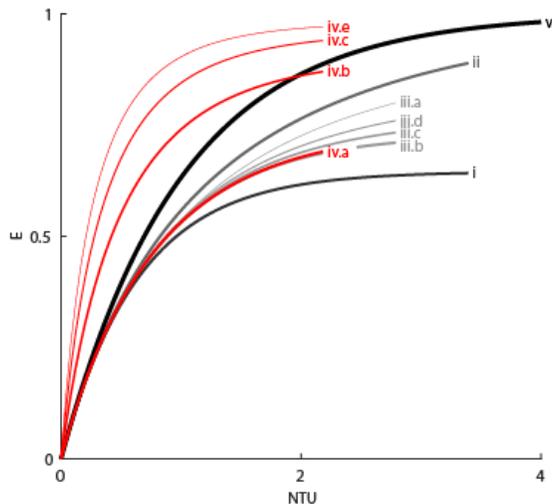


Figura 15: Curvas de efectividad para diferentes configuraciones del intercambiador de calor, según el método E-NTU [70]

Para la figura dada, se muestran las diferentes tendencias según la Tabla 4.¹¹

Tabla 4: Explicación de los diferentes casos mostrados en la Figura 15

I	Flujo único paralelo
II	Flujo único a contracorriente
a	Flujo transversal, ningún fluido mezclado
b	Flujo transversal, ambos fluidos mezclados
III	Flujo transversal, solo mezclado el fluido con menor C
c	Flujo transversal, solo mezclado el fluido con mayor C
d	Flujo transversal, solo mezclado el fluido con mayor C
a	Intercambiadores de carcasa y tubos, 1 flujo
b	Intercambiadores de carcasa y tubos, 2 flujos
IV	Intercambiadores de carcasa y tubos, 3 flujos
c	Intercambiadores de carcasa y tubos, 3 flujos
e	Intercambiadores de carcasa y tubos, 4 flujos
V	Efectividad arbitraria, se pueden introducir tablas manualmente

8.5. Válvulas de control, aislamiento y antirretorno

Hay dos principales válvulas de control en el sistema operadas con el control lógico y una válvula de aislamiento situada en la salida del LPT. Según la norma UNE-ISO 19880-12022, todos los componentes deben tener, por seguridad, una válvula de aislamiento en sus puertos de entrada y salida. Esa condición no se cumple en esta simulación por la misma razón que rige muchas de

¹¹La condición de fluidos mezclados en el flujo transversal se refiere a la capacidad de movimiento lateral (en sentido perpendicular al flujo) del fluido. Así, cuando el fluido no encuentra guías o barreras, tiende a mezclarse y viceversa.

las otras simplificaciones; el coste computacional. El efecto de estas válvulas en un funcionamiento nominal no aporta más que pérdidas de carga locales. A cambio añaden ciertas complicaciones, sobre todo a la hora de converger las condiciones iniciales ya que los parámetros iniciales de este bloque entran en el grupo de los que no se pueden modificar manualmente (más información en el apartado de los fundamentos de cálculo).

8.5.1. Aplicación matemática

El elemento utilizado es un bloque denominado como “orificio” con volumen virtual (no hay un volumen real donde se almacene el gas, sino que se toma en cuenta para realizar los cálculos), constituido por 2 nodos. La opción de cálculo más indicada es la parametrización del orificio mediante el coeficiente de flujo C_v . Por ende, solamente se analizan las ecuaciones correspondientes a este método. Para una mayor información se puede consultar [71].

De tal manera, el parámetro que se controla desde el exterior es el C_v , e influye de la siguiente forma en el flujo másico cuando el flujo es turbulento

$$\dot{m} = C_v N Y \sqrt{(p_{in} - p_{out}) \rho_{in}} \quad (26)$$

En la Ecuación 26, N es una constante de valor 0.007583, Y es el denominado factor de expansión, ρ es la densidad y p es la presión (referida a los puertos de entrada y salida). C_v es el coeficiente de flujo, que a su vez se puede calcular exteriormente como

$$C_v = Q \sqrt{\frac{R_D}{\Delta p}}, \quad (27)$$

donde Q es el flujo volumétrico y R_D es la densidad relativa, calculada respecto a la del agua. El factor de expansión Y se calcula con

$$Y = 1 - \frac{p_{in} - p_{out}}{3 p_{in} F_\gamma x_T} \quad (28)$$

En este caso, la F_γ es el resultado de dividir el exponente politrópico calculado *in situ* entre 1.4, siendo este muy próximo a 1 en el caso del hidrógeno biatómico, y x_T es el valor que se le da al ratio de presión (p_{out}/p_{in}) para cuando el flujo está saturado.

Las expresiones analíticas para los flujos laminar y saturado, son muy similares y no aportan información relevante a la hora de mejorar el entendimiento del modelo. En consecuencia, se omiten.

Un último factor a tener en cuenta se encuentra en las posibles discontinuidades o cambios bruscos en las exigencias. Ante una apertura/cierre brusco, el motor de cálculo puede encontrar errores relativos que se sitúen fuera de los parámetros establecidos si no disminuye enormemente el paso. Por consiguiente, se han ensayado 2 técnicas diferentes:

- La primera consiste en aplicar los cambios con funciones sigmoideas para suavizar el comportamiento del bloque. La parte positiva de este método es que se puede conseguir en todo momento, de manera visual utilizando bloques de Simulink, saber y modificar la respuesta de la válvula. La parte negativa es la necesidad de ajuste de las constantes que se aplican para cada caso particular.

- La segunda posible estrategia, implementada por el distribuidor a partir de 2023 en los bloques orificio, consiste en determinar un factor de suavizado f comprendido entre 0 y 1, y que, mediante una concatenación de funciones cuadráticas, obtiene resultados similares a los obtenidos con las funciones sigmoide. En la Figura 16 se comparan los resultados de ambas estrategias.

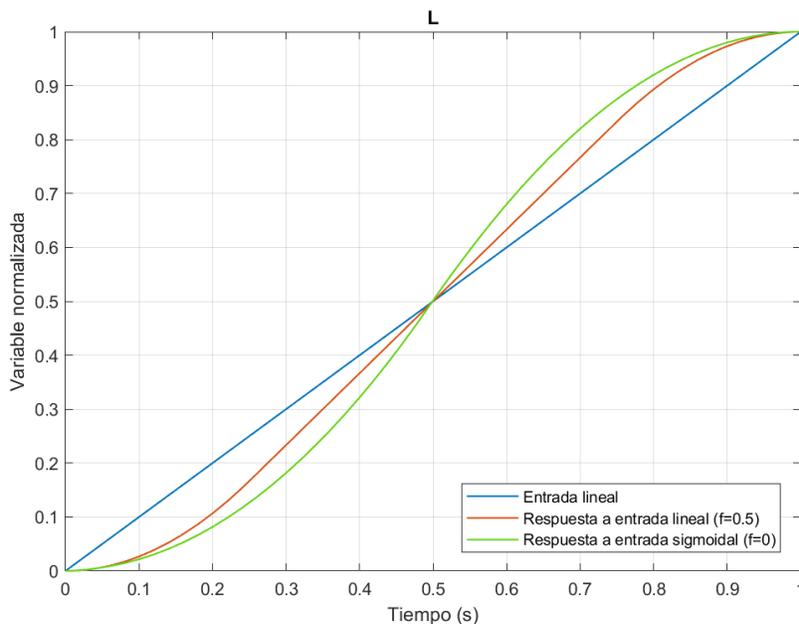


Figura 16: Apertura normalizada de la válvula con el tiempo de apertura situado en 1 segundo. Se comparan la respuesta de dicha válvula aplicando el suavizado para una función rampa en la entrada, y la respuesta a una entrada sigmoideal sin aplicar el suavizado

Computacionalmente la conclusión es clara. Analizando los fundamentos, se puede ver que ambas estrategias añaden la misma carga computacional al solucionador. Aparte de esto, no se ha notado ninguna mejora o cambio en los tiempos de computación ni el comportamiento físico del gas, a la hora de emplear una u otra estrategia. Por tanto, en el modelo final se ha elegido modificar las funciones mediante el suavizado intrínseco del bloque. Las funciones con las que se modifica la respuesta de la válvula, y por tanto las propiedades físicas del gas se encuentran en [72].

El modelo simple cuenta con una válvula antirretorno por cada etapa del compresor (incluida de manera implícita en el bloque de compresor de desplazamiento positivo) y una en el depósito del coche, para evitar los flujos a contracorriente cuando la presión inicial del depósito es mayor a la del sistema. Matemáticamente este tipo de válvulas, se pueden equiparar a las válvulas de tipo “orificio” con la única diferencia de que el grado de apertura se determina automáticamente mediante una función de las presiones de los puertos A y B, y dos parámetros prefijados, tal como se muestra en la siguiente ecuación

$$\hat{P} = \frac{P_{Ctrl} - P_{Crk}}{P_{Max} - P_{Crk}} \quad (29)$$

En dicha formula, la denominada presión de control es la resta de presiones entre los puertos A y B ($P_a - P_b$), P_{Crk} (o diferencia de presión mínima de apertura) es el valor que se establece externamente para que empiece a actuar la válvula, y P_{max} es la diferencia de presión a la que la apertura es máxima. El parámetro \hat{P} , va comprendido entre 0 y 1, de tal forma que si la función toma valores negativos, la válvula simplemente se cierra, y si la diferencia de presión supera el umbral máximo, se queda abierta.

En realidad, para el modo en el que se emplea, no deja de ser una función normalizada para conseguir que el periodo de apertura no sea un escalón, ya que las presiones de apertura y máximas se han configurado con valores muy bajos para conseguir minimizar el impacto de las válvulas en el aspecto de las pérdidas de presión.

8.5.2. Sistema de control lógico

En el modelo se pueden encontrar dos tipos de control que se complementan entre sí. Esa unión se hace por eficiencia operativa respecto a la edición del modelo, el ajuste óptimo de varias entradas y salidas y la flexibilidad al hacer cambios rápidamente.

La primera parte del control está compuesta por todos los bloques de la librería de Simulink que permiten la automatización de los procesos básicos, y estos se muestran integrados en el mismo modelo teniendo en su mayoría conexiones inmediatas con los bloques a los que hacen referencia. Es la forma más básica de construir la lógica que dirige la hidrolinera en este caso, pero sus limitaciones son evidentes a la hora de aplicar ordenes más complejas. La solución al método explicado viene de la mano de la librería de *Stateflow*.

Stateflow es una herramienta que proporciona un lenguaje gráfico que incluye diagramas de transición de estados, diagramas de flujo, tablas de transición de estados y tablas verdadero-falso. Se puede utilizar para describir cómo reaccionan los algoritmos de MATLAB y los modelos de Simulink ante señales de entrada, eventos y condiciones temporales. Está orientado a diseñar y desarrollar control de supervisión, programación de tareas, gestión de fallos, protocolos de comunicación, interfaces de usuario y sistemas híbridos. En general, mediante los gráficos de Stateflow se puede modelar lógica de decisión combinatoria y secuencial que puede simularse como un bloque dentro de un modelo Simulink o ejecutarse como un objeto en MATLAB. Además, la animación gráfica permite analizar y depurar la lógica mientras se ejecuta [73]. Un ejemplo de este tipo de implementación es el que se muestra en la Figura 17.

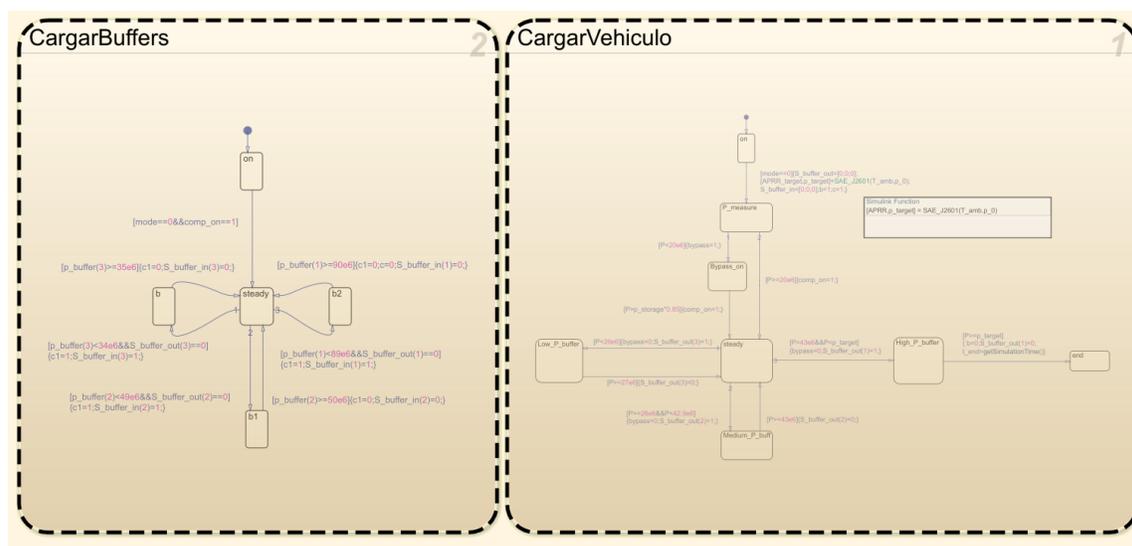


Figura 17: Ejemplo de implementación de la máquina de estados de tipo *Mealy* correspondiente al modelo de presurización en cascada. Cada bloque con borde discontinuo representa un conjunto de estados que se ejecutan paralelamente. Los bloques de línea sólida son los diferentes estados por los que pasa la máquina y las flechas son representación de las condiciones y las ordenes a cumplir para pasar de un estado a otro. El bloque blanco corresponde a una función externa de *Simulink*.

A la hora de implementar la lógica con esta herramienta, se han valorado diferentes estrategias: hacer uso de la herramienta de un modo “libre” aplicando criterios convenientes según el caso, aplicar las normas para una máquina de Mealy o seguir las normas de Moore.

Una máquina de Mealy es una máquina de estados finitos que tiene un valor de salida en lugar de un estado final. Para una entrada dada, la máquina genera una salida correspondiente. La salida de la máquina de Mealy depende del estado actual, así como del símbolo de entrada actual; y a diferencia de otros autómatas finitos que determinan la aceptación de una cadena concreta en un lenguaje dado, las máquinas de Mealy determinan la salida en función de la entrada dada. [74]

En contraposición, una máquina de Moore es una máquina de estados finitos, pero los valores de salida actuales los determina solamente su estado actual. Esta es la mayor diferencia con la máquina de Mealy, cuyos valores de salida están determinados tanto por su estado actual como por los valores de sus entradas. Al igual que en otras máquinas de estados finitos, en las máquinas de Moore, la entrada suele influir en el estado siguiente. Así, la entrada puede influir indirectamente en las salidas posteriores, pero no en la salida actual o inmediata. Ambos tipos de máquinas se consideran 6-tuplas¹².

En informática y programación de ordenadores, un tipo de datos es una colección de valores de datos especificados por un conjunto de valores posibles, operaciones permitidas sobre estos valores y/o una representación de estos como tipos de máquina. A su vez en lenguajes de programación y

¹²Más información en el anexo I

teoría de tipos, un producto de tipos es otro tipo compuesto en una estructura. Los operandos del producto son tipos, y la estructura de un tipo producto está determinada por el orden fijo de los operandos en el producto. Una instancia de un tipo de producto conserva el orden fijo, pero por lo demás puede contener todas las instancias posibles de sus tipos de datos primitivos. La expresión de una instancia de un tipo de producto será una tupla, y se denomina "tipo tupla" de expresión. Un producto de tipos es un producto directo de dos o más tipos.

Si se comparan entre sí los rasgos principales se pueden extraer tal y como se muestra en la Tabla 5 [75].

Tabla 5: Resumen de las diferencias entre una máquina de estados de Moore y de Mealy

Máquina Moore	Máquina Mealy
La salida depende sólo del estado actual	La salida depende tanto del estado actual como de la entrada actual
Coloca la salida final en la transición	Coloca la salida final en la transición
Se necesitan más estados comparativamente	Se requiere un menor número de estados
Se requiere menos hardware para la implementación del circuito	Se requiere un hardware mayor y más complejo
Reaccionan más lentamente a las entradas (un ciclo de reloj más tarde)	Reaccionan más rápido a las entradas
Salida síncrona y generación de estados	Generación de salida asíncrona
La salida se coloca en los estados	La salida se coloca en las transiciones
Fáciles de diseñar comparativamente	Difícil de diseñar
Si la entrada cambia, la salida no cambia	Si la entrada cambia, la salida también cambia

8.6. Solucionadores

La resolución del sistema de ecuaciones algebraicas y la integración numérica de las ecuaciones diferenciales se realiza según el método con el que se configure el solucionador o "solver". Una mala elección puede llevar a tiempos de cálculo elevados, errores de interpretación de resultados o la imposibilidad de resolver un sistema resoluble. Eso origina que haya variedad de estudios relacionados con reducir el error que pueda acarrear el hecho de elegir un método de resolución u otro. En principio, como primer paso, para resolver la red física que se plantea en este trabajo, se ha seguido el diagrama de bloques de la Figura 18. En ella se ven las recomendaciones principales que se hacen en primera instancia, si la selección del solver no es automática.

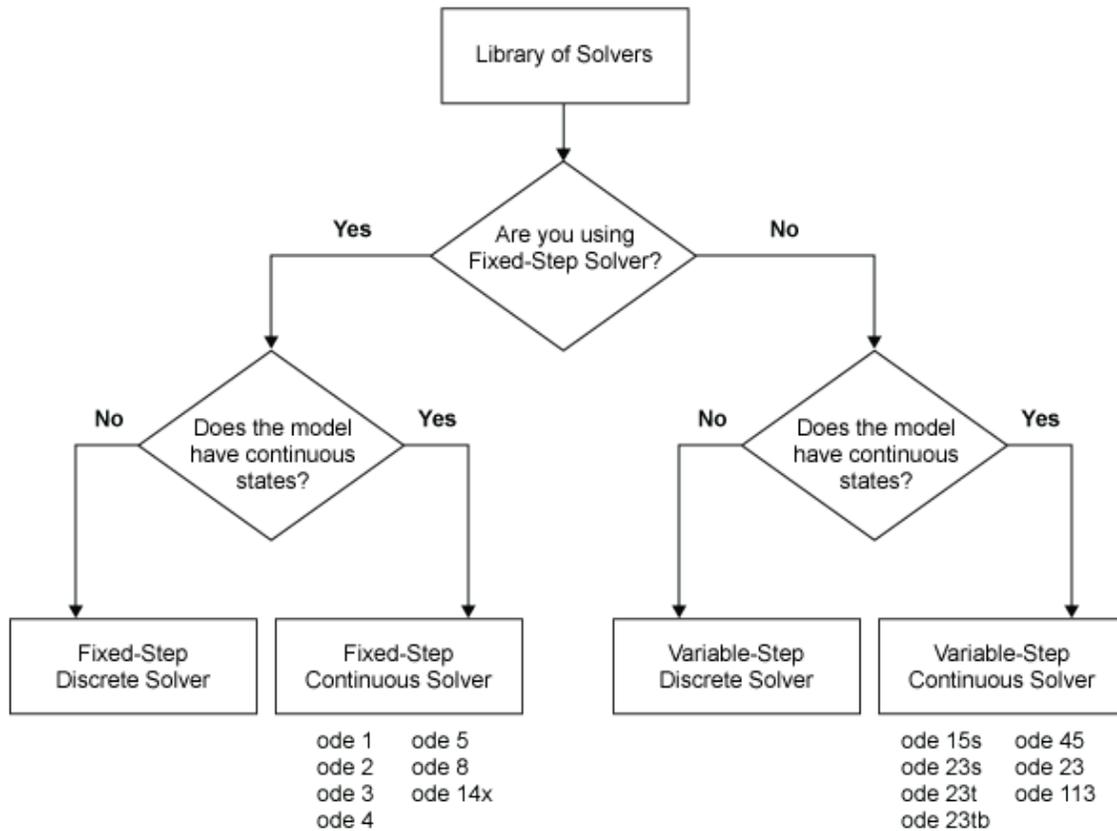


Figura 18: Diagrama de flujo recomendado para seleccionar un solucionador para una primera simulación en simulink.[76]

La opción más versátil al hacer una primera aproximación es la selección de un solucionador de paso variable, ya que el software va ajustando momento a momento el paso necesario para respetar los criterios de error relativo y absoluto. De entre ellos, la Tabla 6 recoge los métodos matemáticos detrás de cada tipo de solucionador. La información que compone la tabla se ha obtenido de [77] [78], y [79].

Tabla 6: Resumen de los métodos numéricos de paso variable disponibles en *Simulink*

Solver	Método numérico	Naturaleza	Observaciones
ode 15s	Método de Gear	implícito	Amplia utilidad en problemas rígidos. Baja precisión.
ode 23	Método Runge-kutta de Bogacki y Shampine	explícito	Si se utilizan tolerancias de error poco precisas o se resuelven problemas moderadamente rígidos. Baja precisión
ode 23s	Formula de Rosenbrock modificada (orden 2)	implícito	Si se utilizan tolerancias de error laxos para resolver sistemas rígidos y la matriz de masa es constante (si la hay).
ode 23t	Regla del trapecio	implícito	Si el problema es sólo moderadamente rígido y necesita una solución sin amortiguación numérica. Baja precisión.
ode 23tb	Método TR-BDF2	implícito	Si se utilizan tolerancias de error laxas para resolver sistemas rígidos.
ode 45	Dormand-Prince	explícito	Amplia utilidad en problemas no rígidos. Precisión media
ode 113	Método Adams-Bashforth-Moulton	implícito	Si se utilizan tolerancias de error estrictas para problemas no rígidos. Puede dar resultados muy precisos dependiendo del tipo de problema

El sistema que se analiza contiene varios momentos (como las aperturas y cierres repentinos de válvulas con gases de alta presión, comienzo del compresor...) que, con un pequeño cambio en alguna variable, el efecto en otras es muy significativo. Eso hace del sistema de ecuaciones un problema notablemente rígido. Además, como se puede observar en varias de las gráficas, se emplean diferentes elementos que pueden generar oscilaciones rápidas en ciertas propiedades como la presión o la temperatura (como el control del PID o el golpe de ariete en alguno de los casos). Para evitarlas, es interesante analizar esas oscilaciones, pero también por su efecto en las propiedades del

gas en algunos componentes. Por lo tanto, no se quieren amortiguar numéricamente. Dadas estas pautas, se elige como solucionador principal el ode23t, con resultados satisfactorios.

Conceptualmente es uno de los métodos más sencillos, ya que integra la ecuación diferencial aproximando el área debajo de una función al área que abarca el trapecio que forma la unión entre dos valores, y el eje de abscisas. De tal manera, que si la función mantiene una dinámica estable, se pueden tomar pasos muy anchos manteniendo el error y el coste computacional bajos; y si la función oscila o varía bruscamente, bastará reducir el paso para captar la dinámica correctamente. Matemáticamente la forma final que toma es la siguiente:

$$y_{n+1} = y_n + h \left[\frac{1}{2}f(t_n, y_n) + \frac{1}{2}f(t_n + 1, y_n + 1) \right], \quad (30)$$

donde y es la variable que se pretende calcular, n representa el estado, siendo $n-1$ el estado inmediatamente anterior a n , y lo contrario para $n+1$. h es el tamaño del paso o incremento (la diferencia entre t_n y t_{n-1}).

A pesar de la fundamentación teórica se ha querido realizar un análisis de sensibilidad en el modelo base con la intención de verificar la validez de los resultados que se obtienen con el solucionador ode23t. Para una correcta comprobación se sigue el procedimiento propuesto en [80]. En dicho artículo, Miller y Wendlandt proponen como punto de partida un análisis con paso variable para finalizar con una simulación a tiempo real. El análisis en tiempo real, también conocido como “hardware in the loop”, en caso de que se realice correctamente, presenta notables ventajas para sistemas como los que se emplean en este trabajo. Principalmente se comprueba la validez del sistema de control lógico, que, aunque no se haya desarrollado para implementarlo directamente en un sistema real, un comportamiento que no se acerque a la realidad en este aspecto condiciona todos los resultados.

Para conseguir dicha simulación existen ciertas condiciones o retos que suponen el acondicionamiento del modelo, una correcta selección de los ajustes, métodos y parámetros del solucionador y en algunos casos, la utilización de un hardware con mejores prestaciones. Una de las principales razones para realizar el análisis en el modelo base es que se ha tratado especialmente para lograr costes de computación bajos. En otras de las propuestas que se hacen en el apartado de resultados no se pueden lograr velocidades de cálculo lo suficientemente altas con el equipo que se dispone. En la Figura 19, se observa el tamaño de paso que se ha empleado a lo largo de la simulación. Para profundizar en la formulación del error y demás consultar [77].

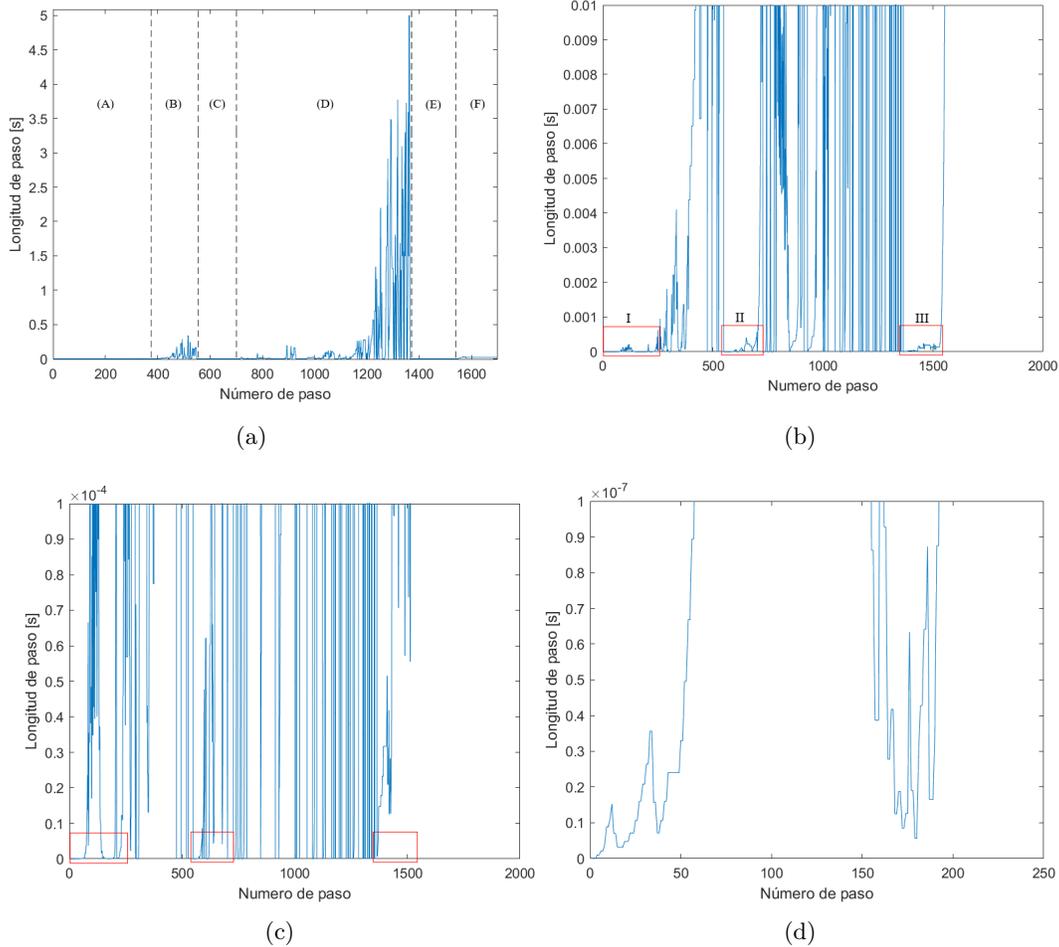


Figura 19: Longitud de paso de la simulación del modelo principal a diferentes escalas. a) Vista general del tamaño de paso durante toda la simulación del modelo principal. b) Vista en detalle para identificar las zonas críticas. c) Detalle de las zonas críticas. d) Representación de la longitud de paso en la zona más crítica.

En la figura 19 a), se muestran diferentes regiones. La apertura de las válvulas, el inicio del compresor y el intercambiador de calor se ven reflejados en el valle inicial (A). Como es de esperar, este es el momento en el cual más varía la dinámica del sistema y por tanto más veces tiene que entrar en juego el integrador. El incremento en la longitud del paso que se muestra en torno a 500 (B), representa una cierta rapidez en el cálculo, que viene dada por un periodo cuasi-estacionario en el que se consigue estabilizar el flujo en el momento de igualar presiones entre el LPT y el depósito del vehículo. El valle contiguo a este pico (C), representa el periodo en el que se modifican los valores de control de manera más rápida para llegar a un funcionamiento nominal del sistema. Por último, es muy reconocible el progreso hacia las zonas donde se estabilizan todos los parámetros de control (D) y la abrupta caída en el momento en el que se cierran las válvulas y se apaga el sistema

(E). El cierre total se da en el paso 1530. Lo que se simula en los siguientes pasos no es relevante y se debe principalmente a flujos residuales, escapes de válvulas y efectos térmicos (F).

Cabe mencionar que a pesar de que en esta figura se muestra el eje x como un continuo, en la realidad los valles en los que dicho valor es muy pequeño apenas está transcurriendo tiempo de simulación. Por tanto, los periodos de apertura y cierre no pueden equipararse, en tiempo, a los periodos más estables. Para la selección del paso a fijar cuando se emplee el solucionador de paso fijo, hay que seleccionar valores que se acerquen a los más bajos. La figura 19 b), representa el mismo periodo hasta el cierre, ampliando la escala en el eje Y e ignorando los valores más altos. En ella se ven resaltadas las 3 zonas críticas. A medida que se baja la escala del eje y, se llega a la figura 19 c), donde la región III prácticamente desaparece, la II mantiene una franja inicial en la que el paso no es lo suficientemente pequeño, y la I se parte en dos mitades.

En último lugar, la figura 19 d), muestra la escala de las últimas fracciones de la zona I. Nótese que la escala en ese momento es de 10^{-7} segundos, y que es inviable realizar la simulación a tiempo real. Para el cálculo estándar el tiempo transcurrido hasta la finalización del ciclo es de 185.23 segundos, el de cálculo real con el hardware actual es de 12.13 y el número de pasos necesarios para realizar la simulación hasta ese punto es de 1530.

La selección del solucionador de paso fijo viene dada por la naturaleza implícita que exige la rigidez del problema. Solo se encuentran 2 solucionadores para problemas rígidos dentro del paso fijo: ode 14x (método de extrapolación) [81] y el método de Euler inverso. En la Figura ?? Se pueden ver los costes computacionales (normalizados para ode 1) y se pueden discernir sin problema las ventajas y desventajas de cada solucionador en este aspecto.

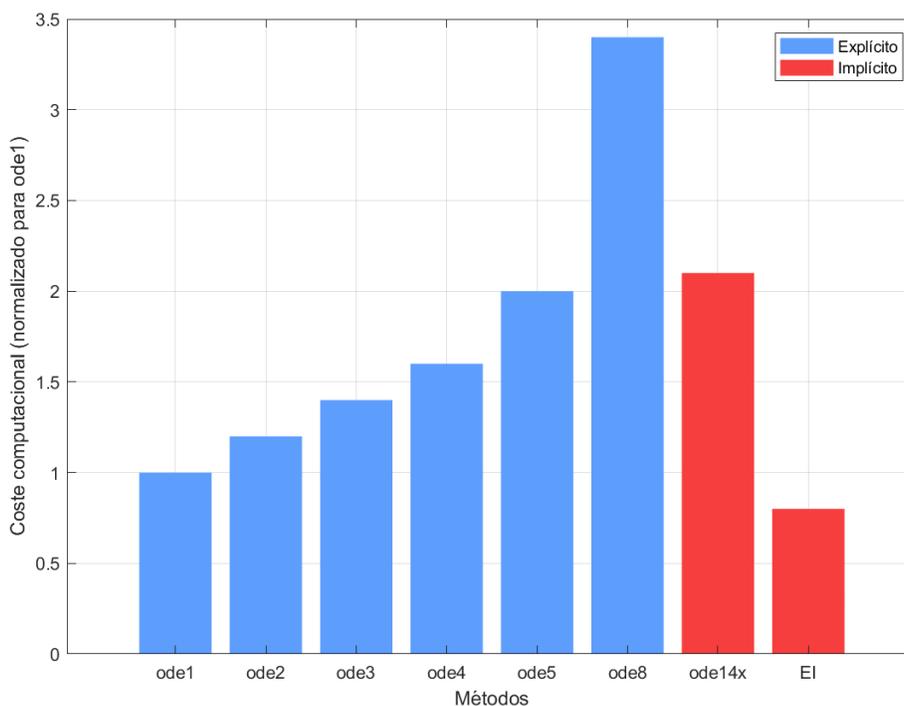


Figura 20: Comparación del coste computacional de los métodos numéricos de paso fijo. EI = Euler Invertido. [80]

En vista del coste computacional, lo lógico es que si el cálculo en tiempo real es realizable en los valles donde la exigencia computacional es mayor, esto será de la mano del criterio más barato. En consecuencia, las pruebas se han hecho con el método de Euler inverso.

Para determinar el paso con el que se debería simular el modelo en la versión definitiva, se ha realizado una serie de pruebas comenzando por un tamaño de $1/100$ s hasta llegar a 10^{-5} s. Por desgracia, los resultados de la prueba cuando se ha fijado el tiempo de paso en $1/100$, $1/1000$, y 10^{-4} , la convergencia no se ha logrado. Con el paso fijado en 10^{-5} s, los resultados obtenidos en las energías, temperaturas y presiones son idénticos, lo cual indica que el solucionador de paso variable es lo suficientemente preciso hasta en los puntos donde el paso es mayor.

Aun así, la duración del análisis es superior a la que debería, por la rápida dinámica de los flujos de gas a presiones diferentes. El análisis en tiempo real debe tener un hardware con un mayor rendimiento. Es interesante comentar que, pese a los intentos de estabilizar la agresiva dinámica del sistema, no ha sido posible reducir lo suficiente los puntos débiles donde los pasos deben ser más cortos para lograr una continuidad en los cálculos.

En la Figura 21 Se muestra la tendencia de un sistema especialmente ajustado para reducir lo máximo posible las oscilaciones iniciales, el efecto de dichos cambios en el coste energético y por último la tendencia que toma el tamaño de paso en esa simulación modificada.

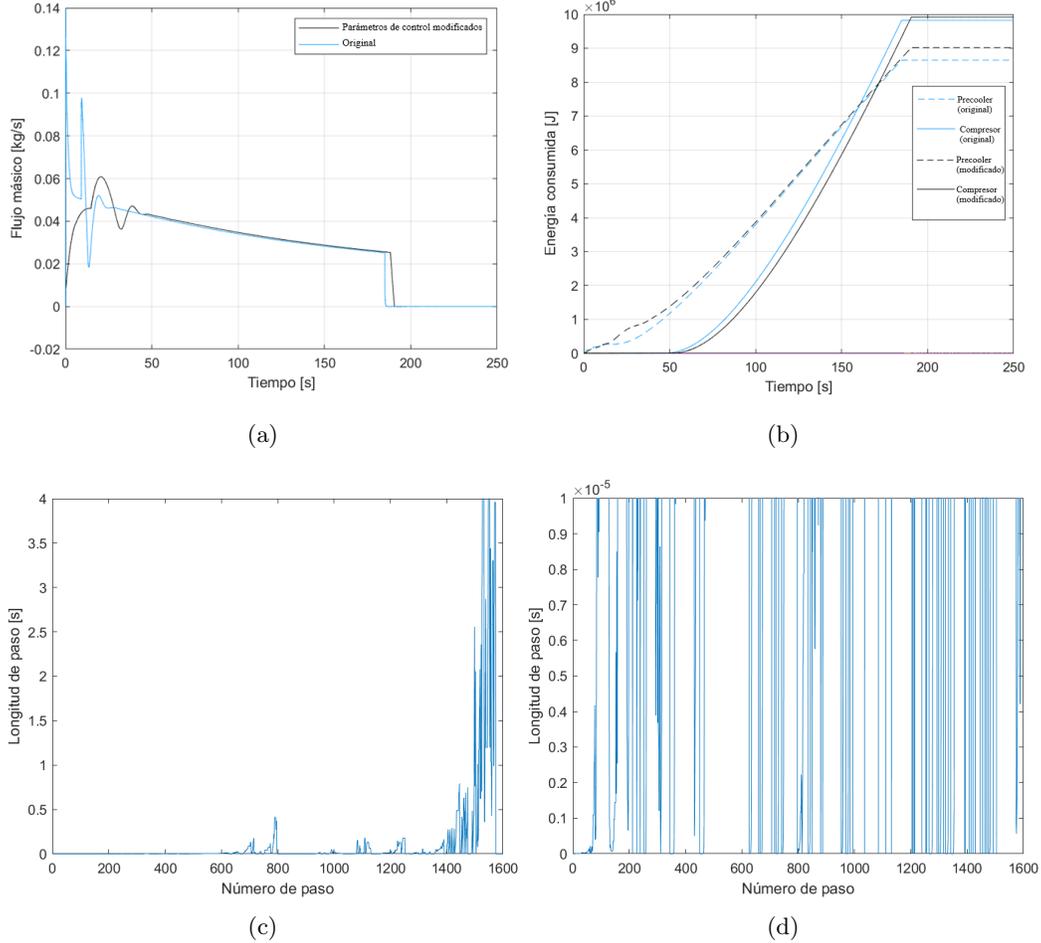


Figura 21: Análisis de la longitud de paso, con solucionador de paso variable, del modelo principal optimizado. a) Comparativa del flujo másico del modelo principal optimizado para una dinámica más suave y sin optimizar. b) Comparativa de las energías consumidas. c) Longitud de paso en vista general para el modelo optimizado. d) Longitud de paso con la escala ajustada a 10^{-5} s

Del conjunto de imágenes se pueden extraer varias conclusiones. Primero, en la figura 21 a), se aprecia el flujo másico entrante en el depósito del vehículo, que es innegablemente más suave que en la versión original. La ligera oscilación se debe a un cambio en el control, ya que en el instante donde se produce comienza a ser más restrictiva la válvula de control de APRR y no la del flujo másico que es la que actúa en el inicio. Por lo demás, desde que el sistema se estabiliza, la tendencia que siguen ambos sistemas es casi idéntico.

En segundo lugar, las Figuras 21 c) y d) sirven para demostrar que la hipótesis de que el fenómeno que origina la necesidad de implementar una longitud de paso más corta, es la rapidez con la que varían las propiedades en el sistema original, es falso. En la primera de ellas se observa la equiva-

lente a 19 a), donde se aprecia claramente que no hay un ahorro notable de coste computacional. Observando la segunda se confirma la tesis que se acaba de presentar, ya que cuando se reduce el eje Y al orden de 10^{-5} , hay muchos valles donde el paso debe ser inferior a estos valores para obtener un resultado fehaciente. Además, la dispersión con la que aparecen dichos valles lleva a pensar que no solo necesitan tiempos cortos los periodos transitorios.

Vistos los argumentos propuestos, en este apartado se concluye que las exigencias computacionales en el dominio gaseoso, con la implementación de más de un sistema de control simultáneo, son muy elevadas, aunque el sistema sea relativamente simple.

En estudios futuros sería interesante plantear alternativas aún más simplificadas, o adoptar estrategias que consigan recrear un escenario similar con un bajo coste. Por ejemplo, analizar elementos aislados o forzar una dinámica del sistema, ya precalculada, para analizar solamente el sistema de control determinando así si el solucionador influye realmente en los cálculos.

8.7. Simplificaciones

Las simplificaciones mostradas en este apartado solo se refieren a las que se hacen a la hora de construir el modelo de manera ajena al método de cálculo en sí mismo. Estas se centran principalmente en las pérdidas de carga y transferencias de calor. Las simplificaciones intrínsecas de cada bloque, respecto a un funcionamiento real, o las que son propias del sistema de cálculo nodal, se explican directamente en los apartados correspondientes.

8.7.1. Pérdidas de carga

Se omiten para los modelos propuestos la gran mayoría de tramos de tuberías, las válvulas y sistemas de emergencia y, por lo general, todos los componentes que no toman parte activamente en la simulación. Los elementos mencionados, incrementan considerablemente el número de variables y suelen ser fuente de errores de convergencia. Además de suponer un gasto innecesario de recursos computacionales. Prueba de la falta de necesidad de modelizar todos los elementos pasivos de manera fiel, es la ínfima variación de energía consumida por el sistema para llegar a la misma presión que el modelo principal, que se muestra en la Figura 22. Se calcula que las diferencias en el tiempo de finalización, presión final y temperatura final son menores al 0.5 %.

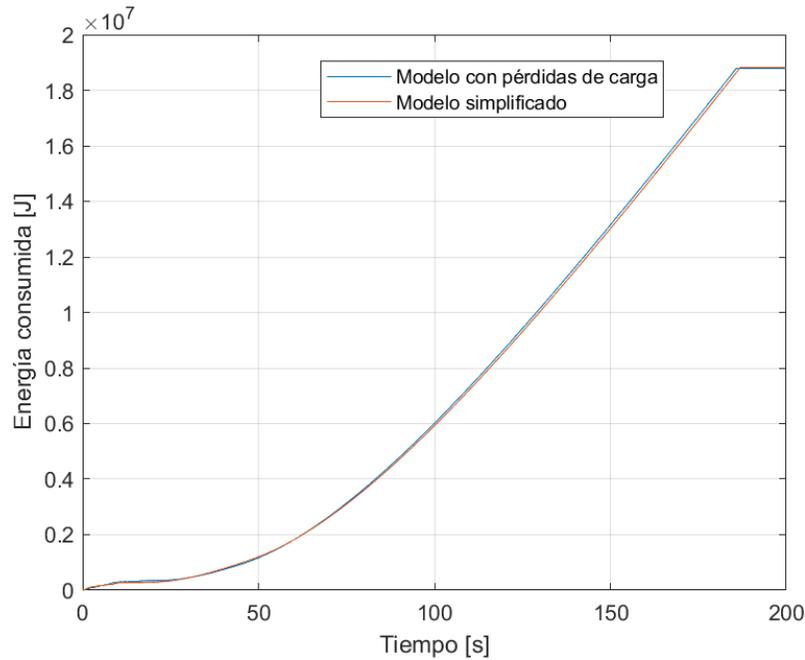


Figura 22: Comparativa de la energía consumida en el compresor, en el modelo principal y el modelo con pérdidas de carga en todos los tramos de tubería y válvulas.

Para el cálculo del modelo con pérdidas de carga se han colocado tuberías con una longitud total equivalente a 10 m divididos en tres tramos, se han implementado codos en cada entrada y salida de los elementos, e *ídem* para las válvulas de aislamiento.

8.7.2. Transmisiones de calor con la atmósfera

El elemento más complejo a la hora de determinar la transferencia de calor hacia el exterior del sistema, de los diferentes componentes, es el coeficiente de transferencia de calor. Dicho coeficiente se suele aplicar en base a mediciones experimentales, ya que las aproximaciones puramente teóricas no son capaces de predecirla. Aun así, es sensible a la casuística y, por tanto, es improbable encontrar el caso concreto que se quiera estudiar directamente documentado en la literatura.

Una de las alternativas más utilizadas para conseguir resultados precisos es la aplicación de las correlaciones de números adimensionales. En concreto el uso del número de Nusselt. El número de Nusselt es un número adimensional que relaciona la transferencia de calor por convección y la transferencia por conducción:

$$Nu = h \frac{L}{k}. \quad (31)$$

Se aprecia que, conociendo dicho número, la conductividad térmica de un material en concreto, y características geométrica, se obtiene el coeficiente h . Es en ese punto donde se comienzan a plantear diferentes correlaciones, que como se ha mencionado, se basan en casos muy simples y son capaces

de relacionar mediante otros números adimensionales como el número de Rayleigh, Prandtl, Reynolds, Grashof. . .

Para la resolución de este problema concreto, se han obtenido las correlaciones para depósitos presurizados [82] y las correlaciones para tuberías interiores con flujo turbulento [83]; y se ha programado un bloque para calcular *in situ* el valor del coeficiente. Para el del exterior, se ha tomado el valor de $h=10 \frac{w}{m^2s}$ en todos los elementos, considerando convección natural con el aire en superficies cilíndricas (tanto para el caso de las tuberías, como los depósitos).

A efectos prácticos, con las pérdidas de calor contempladas en la manguera, los depósitos y los tramos de tuberías, no suponen apenas ningún cambio en el comportamiento del modelo (Figura 23). No es de extrañar tal fenómeno, ya que, en todo momento, excepto en la manguera y el depósito del coche, se tienen temperaturas muy cercanas a las exteriores; originando que la transferencia de calor despreciable.

Respecto a las únicas zonas en las cuales son apreciables las transferencias de calor se obtienen las siguientes conclusiones. El tramo de la manguera absorbe calor por razones evidentes, ya que además de tener una diferencia de temperatura de 65°C (en el escenario que se toma como referencia), el valor medio que toma el coeficiente de convección del hidrógeno respecto de las paredes es de $1739 \frac{w}{m^2s}$. Esos números impulsan un calentamiento del gas en este tramo que se traduce directamente en una bajada de la eficiencia del proceso y consecuentemente un aumento en la energía consumida en el intercambiador de calor. Sin embargo, la gráfica que muestra la energía consumida por el precoolers no denota un cambio sustancial. Se cree que ese efecto no es tan pronunciado porque, por un lado, el tiempo de estancia del gas en la manguera es del orden de 0.4 s, y por otro, el depósito del vehículo pierde calor, amortiguando el efecto de calentamiento en la manguera. El incremento neto medio de calor que sufre el gas es de 0.02566 kW.

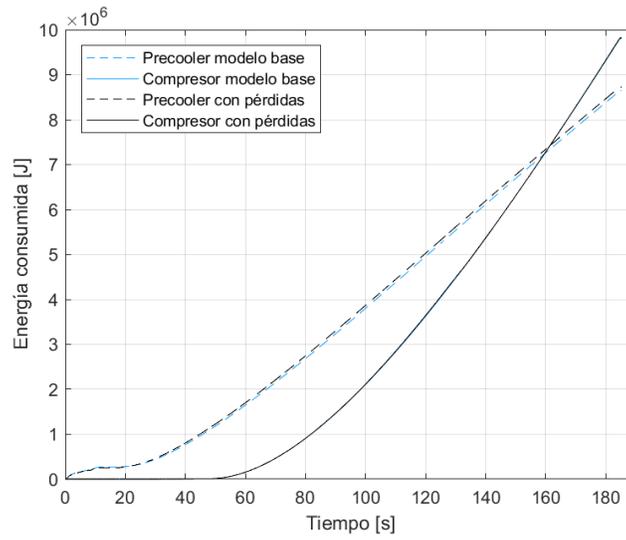


Figura 23: Comparativa de las energías consumidas en el precooler y el compresor, en el modelo principal perfectamente aislado y con pérdidas de calor

8.7.3. Efecto de la dinámica térmica en la pared del intercambiador de calor

En este aspecto, se ha comprobado el efecto de la temperatura en el punto de salida del intercambiador con la dinámica térmica activada (con los datos obtenidos de [84]) y desactivada obteniendo los resultados de la Figura 24.

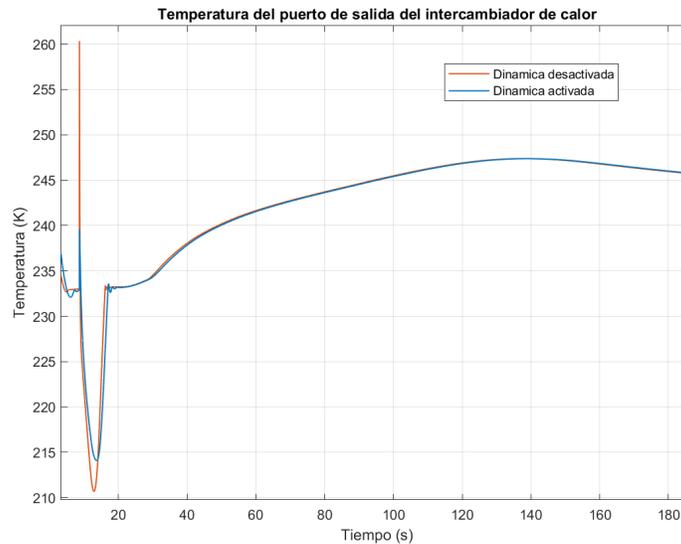


Figura 24: Comparativa de la temperatura del hidrógeno en la salida del intercambiador de calor, calculado para el modelo principal.

En la Figura 24 se aprecia claramente que el efecto de la pared retrasa ligeramente el efecto del enfriamiento en el intercambiador, y que además obtiene picos más amortiguados. Aun con esos ligeros matices, no es necesario realizar un análisis estadístico para determinar que el rendimiento, en régimen estable (a partir de los 20 segundos aproximadamente) es indudablemente el mismo. En el caso del periodo de iniciación, las diferencias de temperatura se toman como normales ya que en este periodo la masa de gas saliente del intercambiador es variable, y en algunos momentos casi despreciable; lo que origina que, con una muy baja energía, puedan calcularse cambios de temperatura muy bruscos, aunque estos no tengan una aportación significativa en el cómputo general de la simulación.

En este punto cabe mencionar que igualar las temperaturas puede ser provocado por el controlador que regula el caudal del líquido refrigerante. Para comprobar que no es el caso y que la tesis de que el efecto dinámico de la temperatura en la pared del intercambiador es despreciable, se ha medido la energía en las mismas condiciones para los casos en los que se ha medido la temperatura de la figura. Se han obtenido los valores de $8.560e6$ J para la dinámica activada, y $8.576e6$ J para la dinámica desactivada. Esos resultados suponen un cambio del 0.187% en la energía consumida, lo cual indica que se puede tomar como iguales.

9. Análisis de los resultados

En este apartado se pretenden, describir, comentar y analizar, por un lado, los modelos en su estado definitivo tras toda la investigación tanto bibliográfica como experimental, y por otro, los resultados numéricos extraídos de estos para poder extraer conclusiones generales acerca del proceso del repostaje de hidrógeno.

Para ello, primero se comentan observaciones iniciales, son importantes para la comprensión de los datos, luego se presentan los 6 modelos definitivos y, al final, se analizan las tendencias observadas. Para este último apartado, se subdividen las propuestas en dos grupos, quedando por un lado los modelos más simples y por otro, los más innovadores.

9.1. Observaciones preliminares

A falta de información bibliográfica concreta, se han realizado diferentes análisis de partes independientes para esclarecer fenómenos no esperados identificados durante el proceso de experimentación. Para ello se diseñó un sistema de dos depósitos unidos directamente mediante una válvula habilitando una transferencia de masa entre los tanques, accionada por una diferencia de presión inicial (Figura 25).

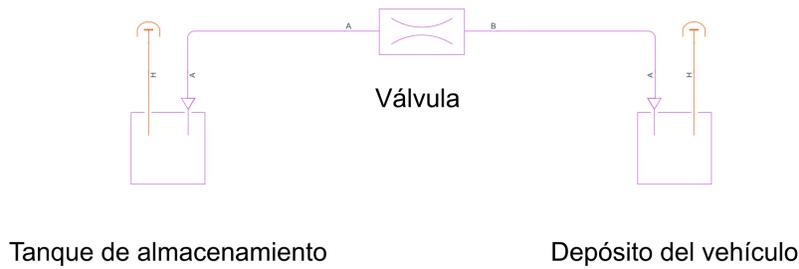


Figura 25: Esquema del modelo simplificado.

La primera conclusión extraída de las mediciones en el dominio térmico y en el gaseoso dentro del depósito resultan en una misma temperatura, concluyendo que no hay un desajuste entre los dos dominios ni en las ecuaciones utilizadas.

Las imágenes de las gráficas de la Figura 26 de una descarga de un tanque a 80 MPa a otro de 0.5 mediante una válvula con un controlador PID, activada en el segundo 1 y habilitando un flujo máximo de 0.06 kg/s. Las temperaturas de menor a mayor: temperatura en el interior del tanque (línea que se solapa con las mediciones en los dominios gas y térmico), temperatura medida en el punto inmediatamente después de salir del tanque y antes de entrar a la válvula. En el caso de la presión se observan únicamente 2 tendencias ya que no hay diferencia entre los depósitos y los puertos contiguos. Por otra parte, las mediciones en el dominio térmico y en el gaseoso dentro del mismo depósito resultan en una misma temperatura, concluyendo que no hay un desajuste entre los dos dominios ni en las ecuaciones utilizadas.

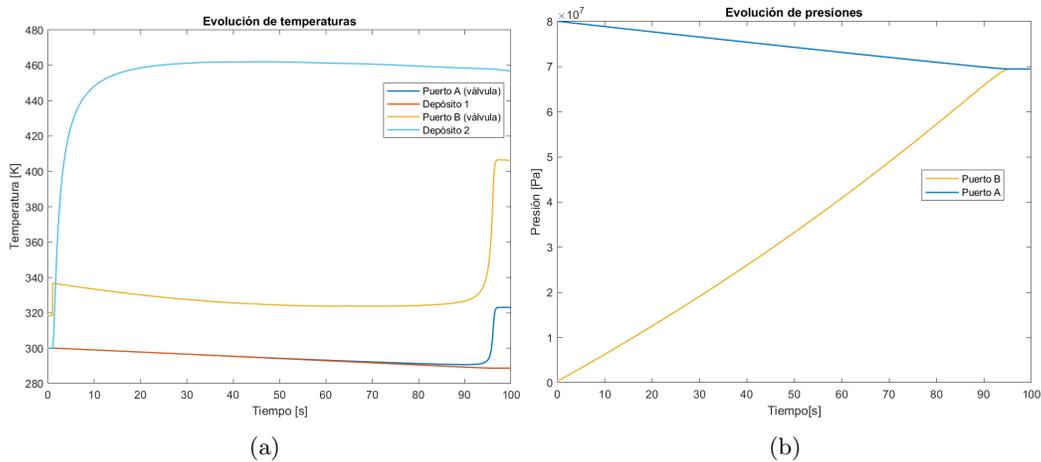


Figura 26: Evolución de las temperaturas y las presiones en todos los nodos que componen el modelo simplificado

Como ya se ha mencionado anteriormente la transferencia de calor al exterior está limitada por un escudo térmico perfecto en todos los elementos, por lo que cualquier variación de la temperatura,

es fruto de los efectos dentro del sistema.

La temperatura en el depósito 1 o depósito de origen, sigue una tendencia decreciente a medida que se descarga. Esto simplemente se explica mediante la Ecuación 14 anulando el trabajo realizado, ya que es nulo. Es un fenómeno que se observa en los modelos desarrollados, y es fruto de algunas ideas que se exponen más adelante para lograr mejorar el rendimiento del ciclo. La temperatura del depósito 2, se explica mediante la presurización que sufre el gas en dicho depósito. Al despresurizar el fluido en la válvula, y presurizarlo en un compartimento cerrado, se incrementa la temperatura de manera brusca en el momento inicial. Posteriormente, al inyectar un flujo de gas “frío” de manera constante, el incremento de temperatura se ve amortiguado, y finalmente llega al punto de igualar presiones, donde por transferencia de calor mediante el puerto de entrada, se acentúa ligeramente el decrecimiento de la temperatura¹³.

La temperatura del puerto A, como es de esperar, sigue, casi hasta el final, la tendencia de la temperatura dentro del depósito. Se ha visto que la presión es la misma en los dos primeros puntos, por lo que el cambio abrupto dado al final solo puede ser la influencia de la transferencia de calor en la válvula. Aun así, una subida tan pronunciada en el momento anterior a igualar las presiones probablemente es un error numérico provocado por el decrecimiento del caudal másico en ese mismo instante. Lo mismo ocurre con el final de la tendencia en la temperatura del puerto B. En cambio, dicho puerto padece otra anomalía en el inicio de la simulación; y es que la temperatura inicial, aunque se fija en 300K para ambos depósitos, comienza en 318K (incluso antes de abrir la válvula).

Tras analizarse variando las presiones y temperaturas iniciales, se concluye que ese incremento, depende de las presiones iniciales y es un error proveniente directamente del método de cálculo. Como se explica en el apartado teórico, hay elementos que cuentan con un volumen real, y otros simplemente contienen nodos para poder aplicar ciertas ecuaciones en esos puntos. Las condiciones iniciales de esos puntos que no representan un volumen (como son los puertos A y B en este caso), no pueden ser fijados manualmente, y el software los calcula tras la primera iteración del sistema de ecuaciones. Por esa misma razón, aunque ambos tanques (inicial y final) partan de la misma temperatura, el sistema interpreta que, en la válvula, mediante las pérdidas residuales o “leakage”, en el inicio se están dando unos cambios de presión, que se transmiten en forma de un incremento de temperatura en ese punto.

De los últimos dos fenómenos se extraen dos conclusiones extremadamente importantes:

- Las propiedades que durante todo el tiempo de simulación contienen un sentido físico real, son las asociadas a volúmenes reales. Si se observan las propiedades del gas en cualquier nodo que no represente un volumen, la veracidad de los datos no está asegurada, ya que lo que se está observando puede ser un “artificio” matemático para que el sistema de ecuaciones se pueda resolver.
- Desde el momento en que el flujo másico en un sistema de gases, las temperaturas tienden a tomar valores medios ponderados en función de los valores de los nodos inmediatamente contiguos, y se ordenan de manera escalonada para llegar de la temperatura de un extremo a otro de la forma más continua posible. Por tanto, se puede esperar que la temperatura en

¹³La transferencia de calor entre puertos se comprueba mediante análisis de igual presión pero diferente temperatura con los resultados mostrados en el apéndice IV

los extremos en esos momentos no sufra ningún cambio brusco, pero sí puede suceder en los puntos intermedios, aunque se esté tomando un volumen real como referencia.

9.1.1. Ubicación relativa de las válvulas de control

La ubicación de las válvulas de aislamiento la determina la normativa; en cambio, las válvulas principales de control pueden implementarse flexiblemente si se respetan las condiciones de seguridad. En el caso del modelo actual se ha visto conveniente colocar 2 válvulas de control: una válvula de flujo y una de APRR.

La válvula de control de flujo en el final del subsistema de la estación de servicio, es imprescindible para controlar que no se dispare el caudal en ningún momento. En cambio, la válvula de control de APRR puede no parecer trivial, dado que el compresor ya viene controlado por el mismo parámetro. Aun así, el volumen de gas entre el compresor y el vehículo es lo suficientemente grande como para que un cambio en el rendimiento del compresor tenga un retraso en llegar al depósito, y lo mismo pasa para las inercias del motor, etc. Por tanto, se decide colocar una válvula de este tipo.

Tomando como base el modelo simplificado de la válvula, e implementando un intercambiador de calor de las mismas características que en el modelo simple, se han estudiado las variantes de mantener presurizado el fluido mientras se enfría o el hecho de que la válvula reguladora de flujo se sitúe aguas arriba del intercambiador de calor o “precooler”. Desde el punto en que se igualan las presiones entre el vehículo y la estación, no deberían existir caídas de presión en dicha válvula, pero sí se aprecia un cambio de rendimiento en el proceso hasta llegar a ese momento.

Primero hay que considerar el fenómeno de calentamiento por la expansión en la válvula, originado por los valores del coeficiente J-T negativos. Para el rango de temperaturas y presiones con el que se trabaja, dicha expansión genera un incremento de temperatura del orden de 37°C (como se observa en la parte estable de la Figura 26 a) y a su vez es coherente con los valores medidos en [44]) cuando la diferencia de presiones es de 80 MPa y va decreciendo a medida que se disminuye el salto. En este punto, cabe destacar que el coeficiente J-T aumenta (se acerca a 0) según la temperatura del fluido baja, y el salto de temperaturas es menor cuando el fluido llega a la válvula más frío.

Enfocando el problema directamente desde el intercambiador de calor, es interesante ver que el caudal necesario del fluido refrigerante (y por tanto la potencia necesaria para enfriar el hidrógeno a la temperatura deseada), es ligeramente mayor, cuando se hace de forma presurizada (con temperatura objetivo de -40°C en la salida del intercambiador y no en la entrada del depósito). En la Figura 28 se muestra la tendencia.

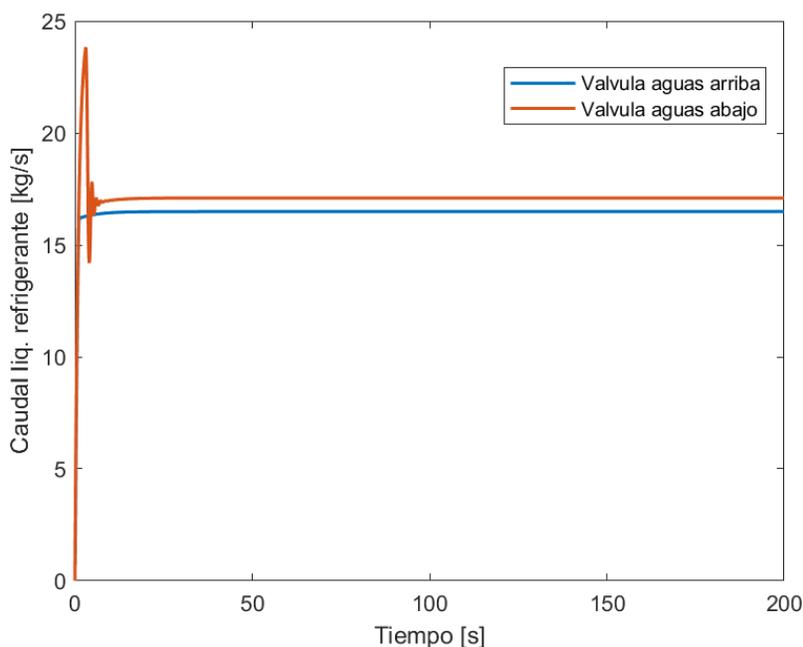


Figura 27: Caudal del líquido refrigerante necesario para bajar la temperatura de entrada en el depósito a -40°C situando un intercambiador de calor aguas arriba y aguas abajo de la válvula de control

El caudal en régimen estacionario, en el caso de que la válvula se sitúa después del precool, es de 17.1 kg/s mientras que el mismo proceso de enfriamiento en el primer caso necesita 16.5 kg/s .¹⁴

Los factores a considerar son: una mayor conductividad térmica para el flujo presurizado y un perfil de temperatura más homogéneo dentro de los tubos, que contribuye a un enfriamiento más eficiente por un lado, y un incremento del calor a presiones más altas por otro, por lo que hay que extraer más energía del hidrógeno para bajar su temperatura. El tiempo de estancia en el propio intercambiador es un factor a considerar, pero en ambos casos se sitúa los $0,4 \text{ s}$.

A modo de conclusión, el cómputo general de los fenómenos listados, da como resultado una mayor eficiencia para el enfriamiento sin presurizar (válvula aguas arriba). Esto ocurre a pesar de que el efecto J-T se ve ligeramente incrementado, y que el incremento de presión haga que el calor específico aumente. Y es que hay que tener en cuenta que, a una mayor temperatura en la entrada, más rápida y eficiente es la transferencia de calor. Si el calentamiento por expansión se sitúa después del intercambiador, la temperatura a la que hay que bajar el gas es aún más baja, y por tanto, más costosa de alcanzar.

¹⁴Las oscilaciones iniciales del primer caso son causadas simplemente por un mal ajuste de los parámetros del PID. La magnitud del caudal del líquido refrigerante tiene solamente carácter comparativo; los valores de presión y de caudal son diferentes a los que se dan en los demás modelos.

9.2. Descripción de los modelos finales

En este apartado se explican de manera descriptiva todos los modelos propuestos, y se plantean imágenes esquemáticas con el objetivo de facilitar la comprensión de los conceptos detrás de los resultados numéricos que se exponen más adelante.

9.2.1. Modelo principal

El que se ha calificado como modelo principal, es el que se ha tomado como referencia a lo largo de todo el trabajo, y es el que se ha tratado de justificar en cada punto. Es un modelo optimizado para hacer cálculos rápidos, pero manteniendo cierta fidelidad para sacar conclusiones válidas. También es el modelo que sirve de base para todos los demás, por lo que las comprobaciones que se le han hecho para determinar si el análisis final es fidedigno o no, se pueden extrapolar casi totalmente a las demás propuestas.

En cuanto al rango de operación, se ha conseguido versatilidad en los análisis en todo el espectro que contempla la norma, permitiendo así estudiar todos los casos posibles. La comprobación de todos los análisis se muestra en las gráficas del anexo IV, donde se enseñan el gasto energético tanto del compresor como del intercambiador de calor, el estado de carga (SOC) y el tiempo de llenado, partiendo desde los -42°C de temperatura ambiente y 0.5 MPa de presión inicial del vehículo, hasta los 48°C de temperatura ambiente y 70 MPa de presión.

El diagrama que contiene los principales elementos de este modelo se muestra en la Figura 28 a). Todos los elementos están situados de izquierda a derecha siguiendo el flujo del hidrógeno. Además, en la Figura 28 b), se detalla el cambio que produce el modelo principal con bypass, a la altura del compresor. La válvula bypass solamente se activa al 100% cuando la presión inicial del vehículo es menor a la del LPT en el inicio de la carga. Cuando esa condición no se cumple, permanece cerrada haciendo que el modelo sea equivalente al principal.

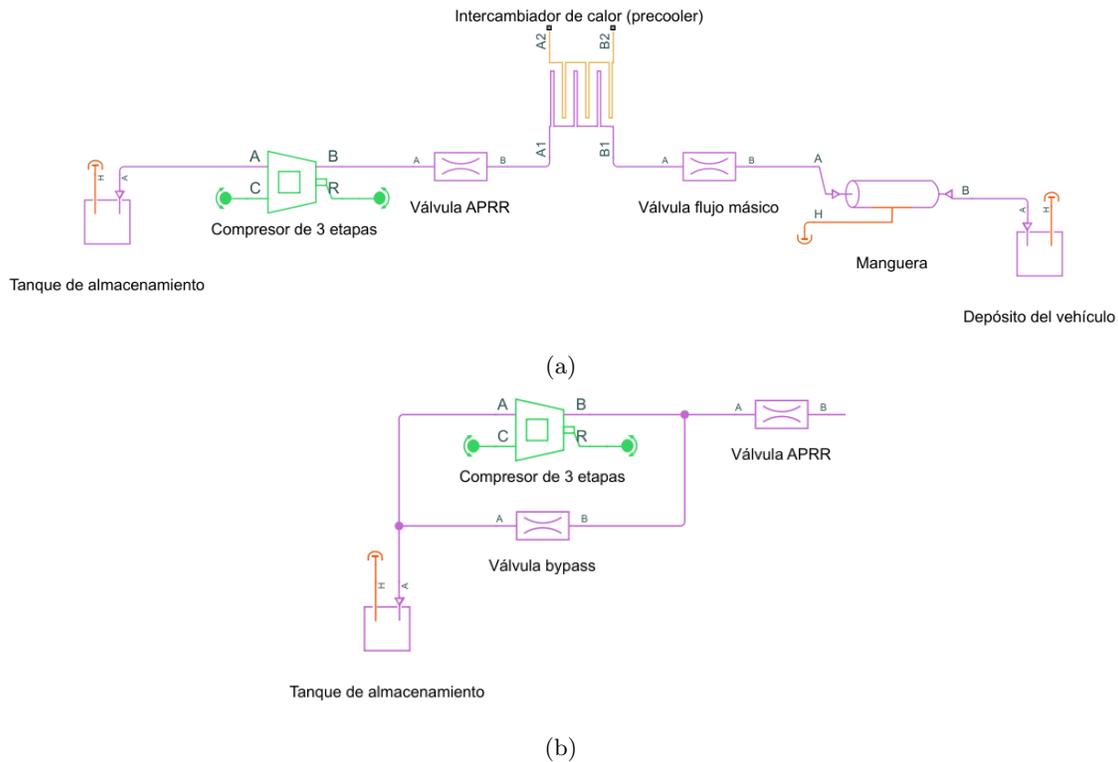


Figura 28: Representación esquemática de los modelos creados en *Simscape*. a) Esquema completo del modelo principal. b) Esquema parcial, hasta la primera válvula de control del modelo principal con bypass.

9.2.2. Modelo de presurización en cascada

La alternativa más utilizada a la compresión directa, aplicada en el modelo simple, es la compresión en cascada representada en la Figura 29. La principal diferencia de este tipo de configuración es el uso de tanques de alta presión situados después del compresor. Con este cambio se consigue rellenar el depósito del vehículo directamente desde los depósitos de alta presión a través de una válvula obteniendo un mayor control sobre el flujo que cuando se realiza directamente con el compresor. Además, para evitar saltos de presión demasiado grandes, normalmente se opta por incluir 3 o más depósitos de diferentes presiones que trabajan de manera escalonada.

Evitar la compresión directa tiene dos consecuencias principales. Por un lado, el incremento de temperatura por comprimir el gas se da en un paso previo, lo cual implica que las exigencias del precooling pueden ser inferiores, o que el flujo hacia el depósito del vehículo pueda ser mayor (para el mismo intercambiador de calor). Por otro lado, las presiones a las que se cargan los tanques de alta presión son siempre iguales, y el hecho de rellenarlos por encima de la presión objetivo del vehículo, requiere un mayor gasto energético.

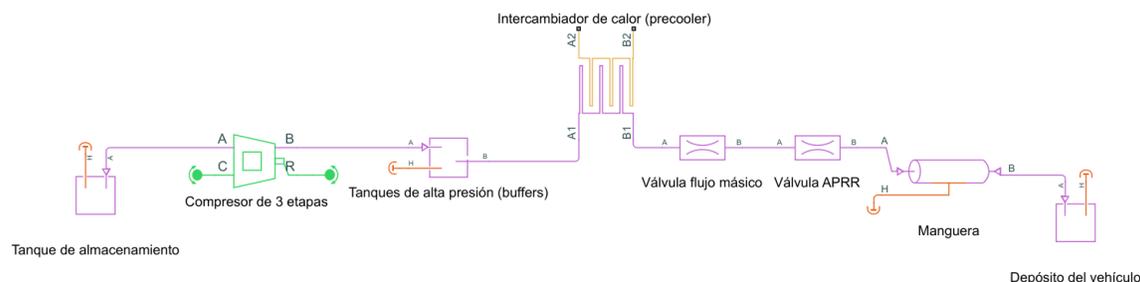


Figura 29: Representación esquemática del modelo de presurización en cascada

9.2.3. Modelo con presurización líquida o presurización inicial. Los tanques de alta presión o *buffers*, a pesar de estar representados en un único bloque acostumbran a ser grupos de 3 o más depósitos a diferentes presiones.

El diseño que se propone en el caso de la Figura 30, incluye varios cambios en el concepto con el que se presuriza el depósito. La idea se plasma sobre el modelo base de compresión directa, pero es igualmente aplicable para la presurización en cascada. Más adelante se plantea la forma en la que se podría implementar.

En esencia, con esta idea se pretenden evitar los cambios bruscos de presión para conseguir que el gas se caliente lo menos posible, sobre todo en la primera etapa del proceso (la fase donde se igualan las presiones del sistema de la estación y el depósito). Eso se pretende conseguir mediante la compresión inicial del depósito del coche mediante el concepto de pistón líquido, y retirar ese mismo líquido a medida que se añade hidrógeno. Como se plantea en el modelo, la inyección del líquido al depósito en el momento inicial se realiza con un mecanismo de cilindro-embolo, que puede actuar con el peso del coche en una placa de presión. Ese sistema se situaría en la estación misma, y el líquido de presurización se inyectaría a través de la manguera.

Además de conseguir un menor calentamiento inicial del gas en el depósito, también puede aumentar el caudal en la fase en la que el compresor está funcionando, acortando los tiempos de llenado. Eso se consigue gracias a que hay un caudal de líquido de presurización que, al retirarse, posibilita mantener la tasa de presurización fijada por el protocolo, aunque se aumente el caudal volumétrico de hidrógeno. Cabe decir que hay casos (sobre todo a temperaturas ambientales bajas), que el límite impuesto por el protocolo de 0.06kg/s, es más restrictivo frente a la tasa de presurización o APRR, y por tanto es evidente que no puede darse el aumento del caudal.

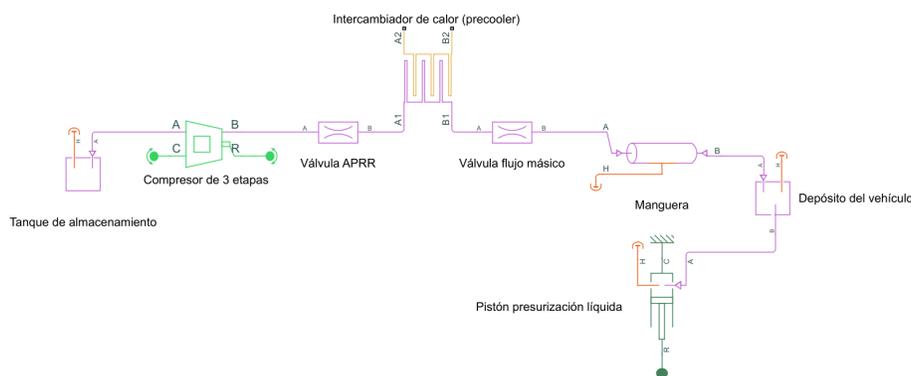


Figura 30: Representación esquemática del modelo de presurización inicial

9.2.4. Modelo de refrigeración cruzada

El modelo de refrigeración cruzada propone el aprovechamiento del fenómeno de enfriamiento que sucede en el tanque de almacenamiento de baja presión. La idea misma alberga numerosas cuestiones, y por si sola puede ser objeto de estudio en un futuro. Varias de las cuestiones que se pueden plantear tienen que ver con: dónde implementar el enfriamiento, si este tiene que ser aplicado directamente con un circuito propio, o debe actuar como preenfriamiento de alguno de los otros ciclos de refrigeración o cual es la dimensión óptima de los tanques de almacenamiento. Este último para conseguir el equilibrio entre pérdida de presión (causando a su vez una mayor exigencia en el compresor) y un enfriamiento óptimo acorde a las dimensiones y características del sistema de refrigeración.

Respecto a dónde es más indicado implementar el enfriamiento, hay a su vez diversos enfoques que se plantean como posibilidades futuras. Por un lado, es indiscutiblemente más barato y fácil de implementar la refrigeración cruzada en algún punto intermedio del circuito, antes de llegar a la manguera. Así, no hace falta modificar el depósito del destino para poder implementar esta opción. Atendiendo a criterios básicos se puede acotar con mayor precisión los lugares donde esta implementación es más efectiva.

La zona entre el LPT y el compresor queda descartada ya que la temperatura del gas es prácticamente la misma en el depósito y en esta zona. Podría ser interesante implementarlo directamente en el circuito de refrigeración interna del compresor para provocar que el proceso de compresión se asemeje aún más a un proceso isotérmico, pero se ha dejado esta idea para una posible valoración futura. A nivel casi anecdótico, se ha probado a intercambiar la refrigeración del compresor en el modelo simple, por la refrigeración cruzada, y para las dimensiones y temperaturas con las que se trabaja, el gasto energético disminuye menos de un 2%. En cualquier caso, es una opción a valorar en una fase más avanzada de desarrollo.

Otra de las posibles opciones, es refrigerar el gas antes de introducirlo en el precooling. Esta opción funciona como la anterior y se puede realizar con un intercambiador de calor auxiliar. Al igual que en el ejemplo anterior, para unas dimensiones arbitrarias del intercambiador, se han obtenido mejoras casi despreciables en el rendimiento. Se ve que, con una bajada de la temperatura en este

punto, solamente se ahorra en la parte donde más eficiente es el precooling, y por tanto, la diferencia de temperaturas a la salida es mínima para la misma energía invertida. En el supuesto de que existiese alguna configuración en la que se diseña el precooling para mejorar la eficiencia en un rango concreto, podría valorarse esta opción.

Por último, se descarta por completo el tramo entre el precooling y el final de la manguera por ser la parte del circuito donde menos temperatura tiene el gas.

La principal razón (aparte del carácter tan abierto del problema) por la que se decidió estudiar la hipótesis de introducir la refrigeración en el depósito del vehículo a través de la manguera, es que energéticamente es más eficiente que los anteriores. Esto sucede por la simple razón de que al refrigerar el hidrógeno *in situ*, no es necesario reducir la temperatura de la salida del precooling hasta los -40°C para lograr los mismos efectos. Aunque se plantean retos más complicados como refrigerar un fluido en un depósito térmicamente aislante, o que sea el vehículo el que tenga que tener las características para este tipo de refrigeración. El esquema del modelo aplicando la refrigeración en el vehículo se muestra en la Figura 31.

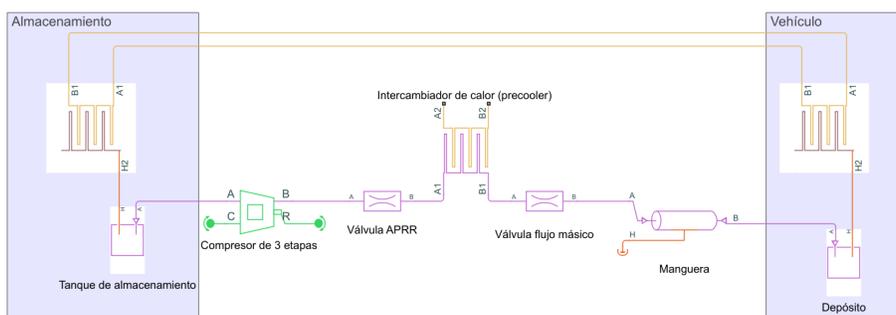


Figura 31: Representación esquemática del modelo de refrigeración cruzada

9.2.5. Modelo completo

Este modelo aúna los conceptos aplicados por separado en los planteamientos de refrigeración cruzada y presurización líquida. La conjunción de estas dos ideas, es suficiente, al menos para las condiciones genéricas seleccionadas, una transformación en la forma de aplicar la energía que posibilita eliminar por completo el precooling. Como se puede apreciar en el esquema del modelo, representado en la figura 32, la instalación se simplifica a costa de hacer más compleja la manguera y el depósito del vehículo, pero no hay ningún elemento innovador adicional más allá de lo comentado.

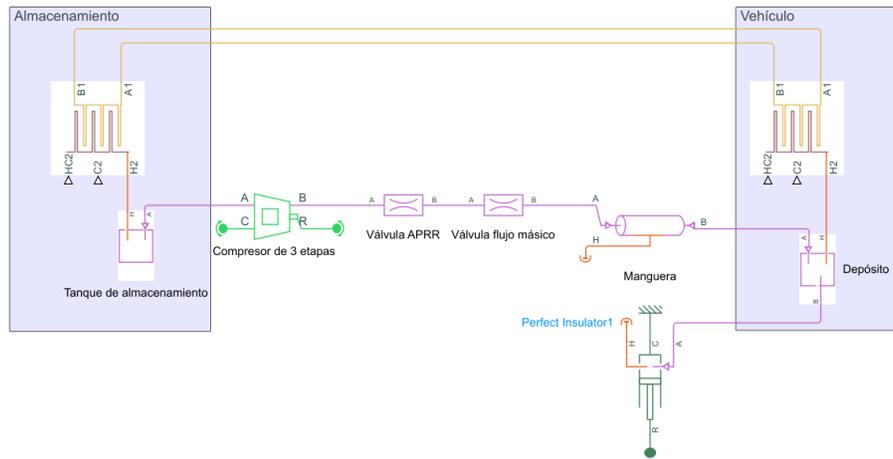


Figura 32: Representación esquemática del modelo completo

9.3. Tiempo de finalización

El tiempo transcurrido en el proceso de repostaje a condiciones concretas es uno de los parámetros principales a considerar para leer correctamente la información proporcionada en estos aparatos. Se han tomado medidas del caso estándar en todos los modelos propuestos (Figura 33) para poder extraer conclusiones. A nivel informativo, se agregan las gráficas correspondientes a todo el rango de temperaturas ambientales y presiones iniciales del vehículo en el anexo IV.

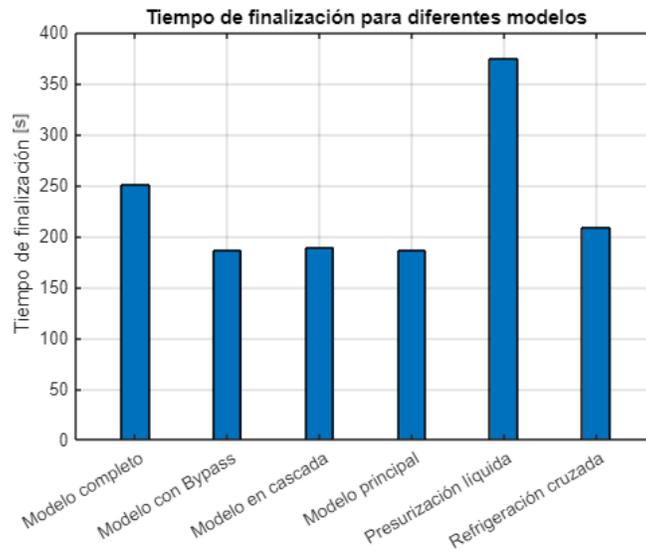


Figura 33: Tiempo de finalización del repostaje para los diferentes modelos en condiciones estándar.

El tiempo está condicionado por el protocolo de llenado que se ha adoptado, ya que este define la tasa de presurización del depósito del vehículo. Se aprecia perfectamente en los modelos más simples, que no se puede bajar de la barrera de los 185 s para el volumen de hidrógeno que se pretende transferir. En principio, si se ignorase el protocolo de llenado propuesto por la SAE, se podrían alcanzar cotas más rápidas de llenado mediante el aumento de la potencia en el compresor y el intercambiador. También se pueden observar, en los casos donde se implementa la presurización líquida, que los tiempos pueden ser más largos. En esos modelos se ha seguido de igual manera la tasa de llenado, con la diferencia de que el comienzo no se da en el segundo 0.

En general, se considera interesante el estudio de nuevos protocolos de llenado y el análisis de la efectividad de la velocidad de llenado, dado que un ligero incremento en el tiempo de funcionamiento del compresor o el intercambiador, puede acarrear gastos de energía excesivos.

9.4. Comportamiento de los tanques de almacenamiento

Los tanques de almacenamiento de hidrógeno a baja presión suelen ser elementos sin cambios de un modelo a otro, excepto cuando se implementa la refrigeración cruzada. En el comportamiento del modelo simplificado a una bajada de presión (en un depósito rígido) tiene como consecuencia una bajada de temperatura proporcional, si esa bajada de presión la causa la pérdida de hidrógeno.

En los modelos más completos (Figura 34) se puede ver que las gráficas de presión y temperatura son cercanas y que por tanto se cumple la afirmación de la bajada de temperatura proporcional a la presión. Además, exceptuando el modelo en cascada todas las bajadas de presión, un vez comienzan, son lineales y continuas. Esto es causa directa de que al presurizar a una velocidad constante, el caudal que se extrae también lo es (aunque este muestre una tendencia ligeramente decreciente), fenómeno que a su vez le da sentido a la mínima concavidad de la rampa en el primer modelo.

Esa misma tendencia se puede ver amortiguada en los modelos en los que la bajada de temperatura es más pronunciada. En esos casos, como en el modelo con bypass o el de presurización líquida, el decrecimiento generalizado de la temperatura del gas contribuye a un menor volumen específico y por tanto a una bajada de presión.

Un último factor que afecta a la tendencia de las presiones y temperaturas en el LPT, es la refrigeración cruzada. En este caso, los tanques de baja presión reciben más energía por la transferencia de calor del sistema refrigerador. Esa energía hace subir ligeramente la temperatura (o mejor dicho amortigua la tasa decreciente de bajada de temperatura) y da un aspecto más cóncavo a las curvas como la del modelo de refrigeración cruzada o el completo. En este último no se muestra de forma tan clara dicha tendencia por lo que cabe pensar que la transferencia de calor no se está realizando de manera satisfactoria, o las temperaturas durante el proceso de llenado del depósito no son excesivamente altas.

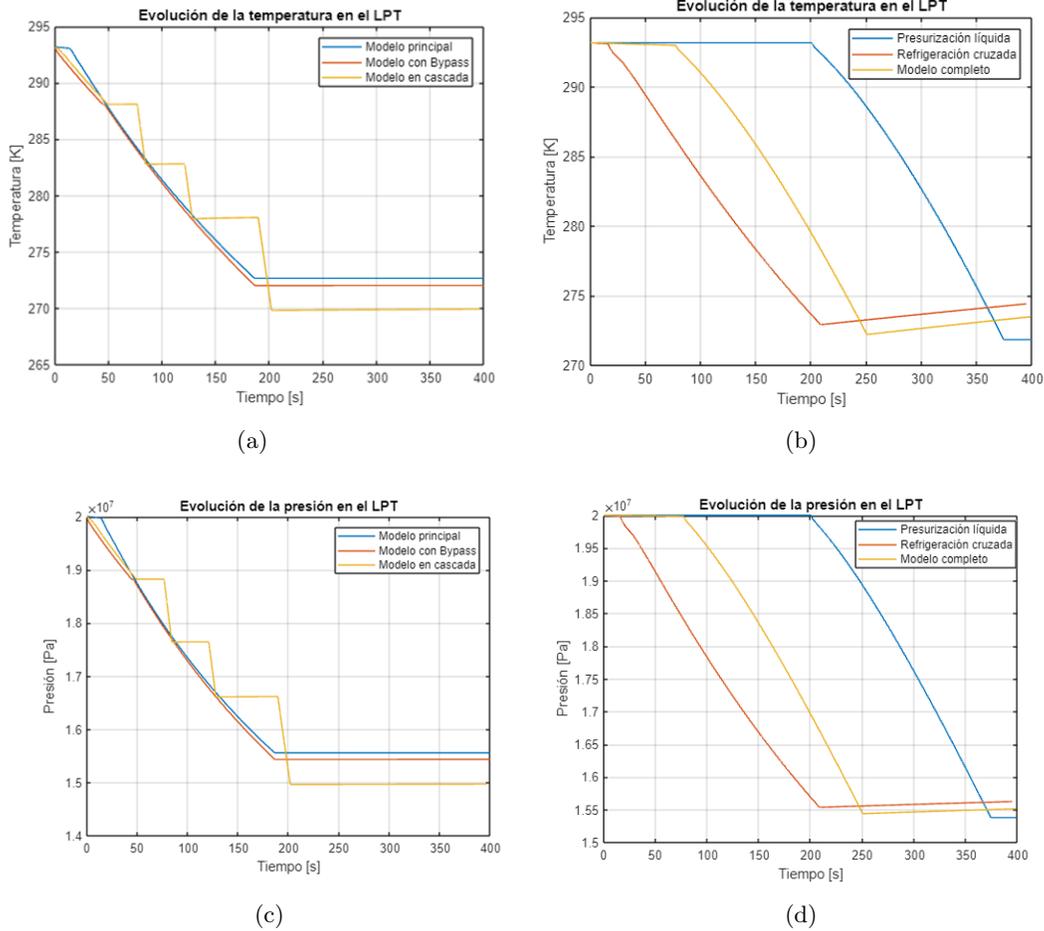


Figura 34: Evolución de la temperatura y la presión de los tanques de almacenamiento de baja presión

Un comportamiento interesante de analizar es el del modelo de presurización en cascada. Las bajadas de la presión y la temperatura de manera escalonada son cada una correspondientes a la carga de los HPT (Figuras 34, a) y c), y las pausas entre las caídas son los lapsos de tiempo que toma el vehículo en llenarse (una por cada depósito). El llenado de los tanques de alta presión se hace inmediatamente después del vaciado de esos depósitos, de tal forma que la estación funciona como 2 partes independientes. El sistema de carga de los HPT, y el sistema de carga del depósito del coche. El único punto de encuentro entre los dos sistemas, es que un tanque de alta presión no debe estar cargando y descargando al mismo tiempo. La primera rampa corresponde a una idea adicional implementada al modelo tradicional de presurización en cascada, y consiste en realizar el llenado inicial del depósito mediante el bypass. En este caso el conducto auxiliar va directamente desde el LPT al intercambiador de calor, haciendo que el LPT funcione como un buffer adicional, en lugar de realizar la presurización directamente desde el HPT de menor presión.

La bajada de presión y temperatura del gas en este modelo se achaca a que el sistema de control no toma en cuenta la inercia del compresor y genera un sobrellenado en los HPT, que se traducen en una mayor extracción de masa del LPT en el primer ciclo. Este efecto, si se simulasen ciclos consecutivos, se anularía dado que se partiría desde una presión ligeramente mayor a la correspondiente en cada HPT. En ese supuesto, las cotas mínimas de presión y temperatura se equipararían a los demás modelos.

A modo de anotación, los valles que se muestran en la Figura 35 son más pronunciados en los tanques de más alta presión simplemente porque el volumen de estos es más pequeño.

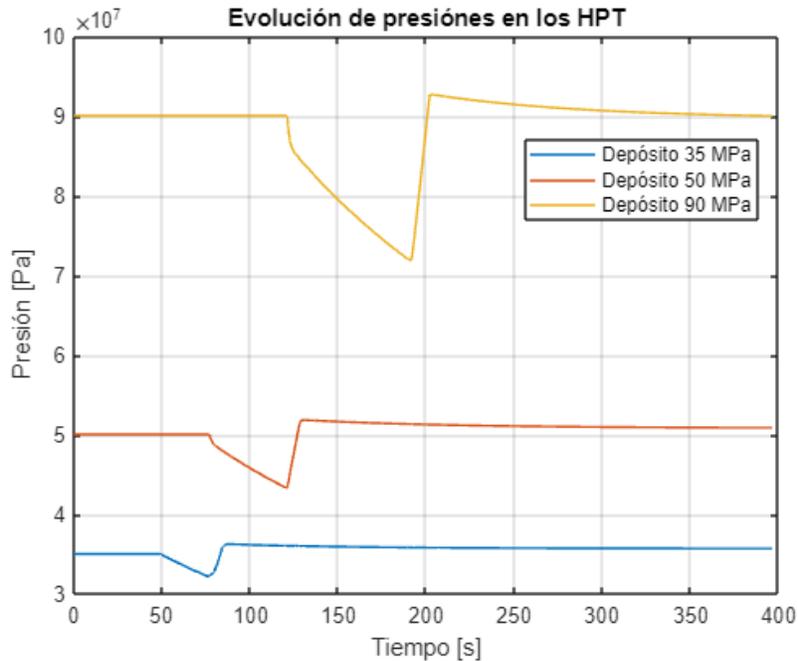


Figura 35: Evolución de la presión de los tanques de alta presión en el modelo de presurización en cascada.

Por último, para completar el análisis de las tendencias en los tanques de almacenamiento, hay que comentar que, una vez llegado al límite del tiempo de llenado, las temperaturas deben mantenerse constantes en todos los casos. Que esto no suceda en los modelos que incluyen la refrigeración cruzada, es simplemente porque no se ha modelizado un corte físico en el sistema de refrigeración, y por tanto, aunque el flujo de refrigerante se corte, el líquido remanente sigue intercambiando calor con el gas del depósito.

9.5. Comportamiento de los sistemas de compresión

El compresor es el elemento más importante y complejo para modelizar de toda la planta. Es el responsable del mayor gasto energético (junto con los sistemas de refrigeración), y a su vez es el objeto de la mayoría de investigaciones, enfocando el problema tanto por el aspecto de la eficiencia energética como de materiales resistentes a una atmósfera de hidrógeno a altas presiones.

Es evidente, que la modelización de dicho componente es una tarea prolongada a lo largo de las diferentes fases del diseño de una planta de repostaje de hidrógeno; y en consecuencia, se deben tomar los valores obtenidos en las gráficas de manera orientativa. A pesar de todo ello, tal como se justifica en apartados anteriores, el orden de magnitud de la energía consumida es correcta. Además, como el compresor implementado en todos los modelos es el mismo, hace que las conclusiones extraídas de las comparativas son igualmente acertadas.

9.5.1. Fenómeno de caída de la potencia

Previo al análisis, se ha querido plantear una reflexión adicional sobre las tendencias de la potencia, pues ha sido fuente de varias confusiones durante la realización del trabajo. En varios de los modelos se observa una tendencia de la potencia, cuya tasa de crecimiento disminuye, e incluso llega a ser negativa. Pese a ser contraintuitivo, la caída del par demandado por el compresor en cotas de presión muy altas o niveles de exigencia es razonable.

Por un lado, si se valora la aportación que hace el término de la masa en el cómputo total de la energía mecánica, se ve que esta empieza a disminuir al cabo de un tiempo. Es lógico pensar que esta aportación pueda disminuir ya que se compone del producto entre el flujo másico y la entalpía. El compresor, a partir de un punto no puede seguir manteniendo un nivel de flujo y empieza a disminuirlo. Ese fenómeno causa que la tasa de presurización en el depósito baje (aunque siga en todo momento siendo positiva), y a su vez la energía producida por la compresión baja su tasa de crecimiento. Esto último redundará en un menor crecimiento de la temperatura. Aun así si se mira el comportamiento de la temperatura, se ve que llegado a un punto, esta comienza a disminuir aunque ninguna de las tendencias mencionadas anteriormente lo haga; y es en este punto cuando hay que recordar que el flujo entrante tiene una temperatura muy inferior al que se encuentra en el depósito, y por tanto, sí que es posible la tendencia de la temperatura resultante sea decreciente, a la vez que su energía interna, y en consecuencia la entalpía.

Por otro lado, se observa también que el coeficiente G disminuye. Ese coeficiente solo depende de k , C_v y otras constantes por lo que simplemente parece que, al disminuir la temperatura, a pesar de que la presión siga subiendo, la conductividad térmica disminuye o C_v crece.

9.5.2. Potencia y energía

La medición de la potencia demandada en el compresor se realiza directamente midiendo la velocidad angular y el par que aplica un motor ideal a las 3 etapas. La energía se calcula mediante la integración de la potencia respecto del tiempo.

En la Figura 36 se encuentran las potencias que exigen los 6 modelos propuestos y las velocidades angulares asociadas a cada uno.

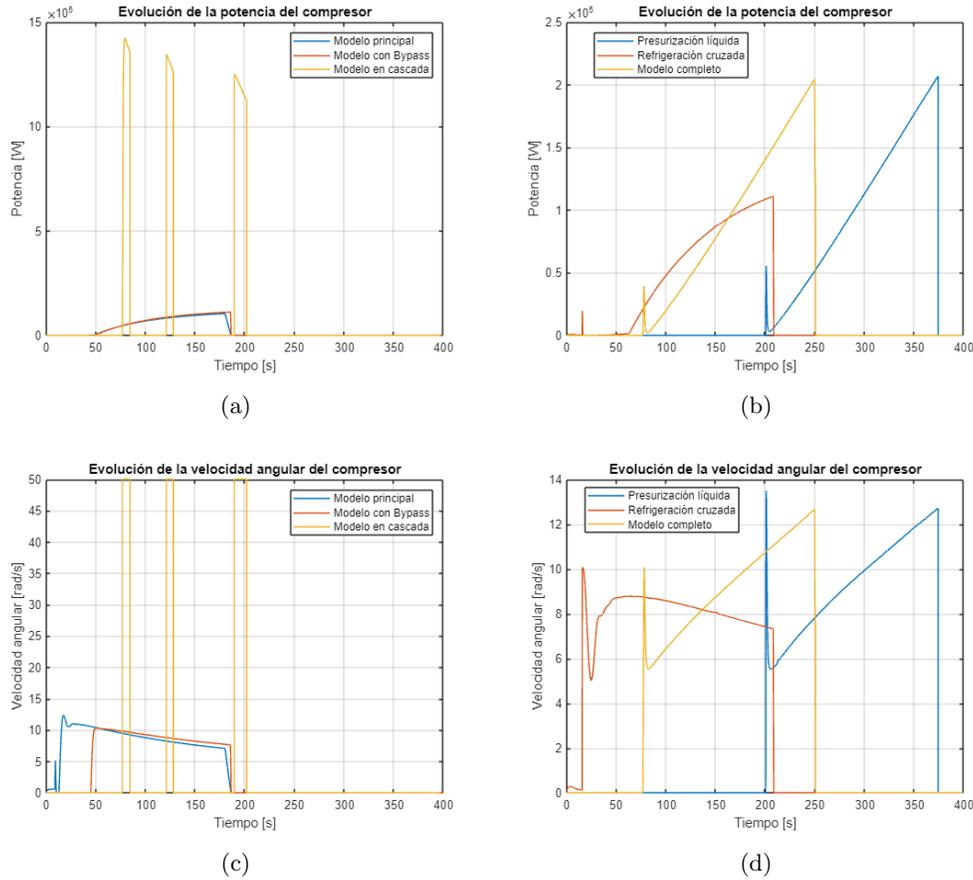


Figura 36: Evoluciones de la potencia y velocidad angular del actuador del compresor durante todo el tiempo de simulador. a) y b) corresponden a la potencia. c) y d) a la velocidad angular.

Poniendo el foco en los modelos más básicos de la Figura 36 a), se encuentran dos tendencias de la potencia solapadas para los dos primeros modelos. Es interesante ver que a pesar de las pequeñas desincronizaciones, la potencia tanto en magnitud como tiempo, se puede calificar como iguales. Si se mira la tendencia de la w en el modelo principal en la Figura 36 c), puede parecer que ambas gráficas no se corresponden debido al crecimiento prematuro de la velocidad. Pero ese incremento se debe a que el propio gas empuja el compresor por el flujo originado de la diferencia de presiones entre el LPT y el vehículo.

Se percibe una pequeña diferencia en el momento en que ambas simulaciones llegan a su fin. Simplemente se debe a que, como se puede ver en el análisis del caudal en el apartado correspondiente al depósito del coche, en el periodo de iniciación hay ciertos picos de caudal para el modelo principal que el modelo con el bypass los controla de manera más suave, provocando que los tiempos de finalización se acorten ligeramente. Aun así, el pico máximo de potencia apenas varía. Los valores máximos que toman el modelo principal y el modelo con bypass son 102.67 kW y 106.37 kW res-

pectivamente.

La potencia demandada por el compresor en el modelo de repostaje en cascada es completamente diferente a todos los demás. Primero, se observa que los picos de demanda son hasta 12 veces más altos que en los casos más simples. Este fenómeno no es tanto una parte negativa del modelo en si mismo, sino de la lógica que se le implementa. En esta se contempla un llenado a 0.06 kg/s (el límite permitido por la norma en régimen estacionario), lo que supone una carga más rápida pero más exigente. En este sentido, uno de los cambios a implementar, sería el de poder aumentar los tiempos de llenado de cada tanque de alta presión justo hasta el punto en el que la suma de los tiempos de llenado de los dos primeros tanques llegue exactamente a su fin cuando acabe de llenarse el deposito del coche. Si después de hacer eso, el último deposito se llena a un ritmo igual al actual, el proceso, se comportaría exactamente igual. También se pueden implementar los mismos tiempos de llenado y ampliar el tiempo de espera entre un repostaje y otro si fuera necesario.

Un último factor interesante a comentar en el modelo de compresión en cascada, es que la mayor exigencia de potencia, no está directamente asociada con el tanque de mayor presión, y que esta no es constante. Respecto a la primera afirmación, en las Figuras 36 b) y c) donde aparecen las velocidades angulares se demuestra que el compresor llega a un estado de saturación en el que la velocidad angular, en los tres momentos de presurización llega a un límite y actúa básicamente como una función escalón. Al saturarse, la cantidad de gas impulsada por unidad de tiempo disminuye drásticamente con la presión de salida del compresor. De hecho, lo hace a una proporción mayor a la que lo hace la fuerza necesaria para comprimir el gas, y por tanto, a igualdad de velocidad angular, el par que ejerce el compresor es menor. La segunda afirmación es la representación gráfica de lo explicado en el subapartado de la caída de la potencia.

Las tendencias mostradas en la figura 36 b), se pueden a su vez subdividir en dos. El modelo de refrigeración cruzada reproduce fielmente el comportamiento del modelo principal, con una pequeña variación en el pico de la potencia. Se ve que el máximo es ligeramente superior (en torno a un 4.7%) al modelo con el bypass, lo cual se explica mediante dos principales fenómenos. Por un lado, el gas en el inicio entra con una densidad menor, lo que provoca que para llegar a la misma cota de caudal másico, la velocidad angular necesaria es superior aunque el par disminuye ligeramente amortiguando el efecto). Por otro lado, se tiene que contemplar el cómo afecta el enfriamiento en el depósito a la medición del APRR, aumentando ligeramente el caudal másico que puede entrar en el depósito para conseguir la misma tasa de presurización.

El modelo completo y el modelo de presurización se comportan de manera muy similar. Respecto a la lógica del accionamiento del pistón que actúa sobre el líquido que presuriza el depósito del coche, se han estudiado dos variantes que, son equivalentes en la magnitud de la potencia demandada. La principal diferencia reside en la velocidad en la que el pistón recupera la posición inicial. La primera lógica consiste en que el pistón comprime el gas de forma que provoca un calentamiento lineal, y se retira a una velocidad constante, llegando a su posición original en el instante exacto que finaliza el repostaje. En la figura 37 se muestra el recorrido del pistón. El porcentaje de compresión residual es una medida que se toma solo para cerciorarse del buen funcionamiento del modelo matemático, ya que se han visto problemas cuando esa cota llega a 0. En el modelo real evidentemente hay que retirar el 100% del líquido.

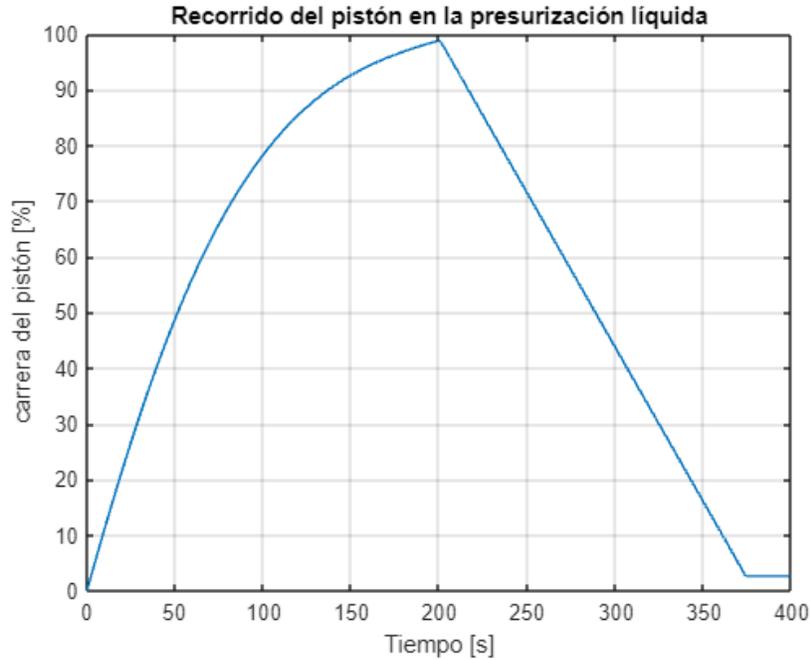


Figura 37: Evolución de la compresión del pistón en el modelo de presurización líquida

El ajuste de la velocidad de retirada del pistón se ha realizado de forma aproximada, ya que la implementación de una velocidad constante que coincida exactamente con el final del repostaje de manera precisa y automática, implica la resolución de una ecuación diferencial que puede dar varios problemas al implementarlo con un sistema de control que no actúa de manera instantánea.

La diferencia en los momentos en los que se demanda la potencia radica en que la compresión a una tasa constante es mucho más rápida en el caso en el que el sistema de refrigeración cruzada está implementado, ya que existe desde el inicio una reducción de la temperatura que se transmite en una bajada de presión. Los gráficos que muestran la evolución de la energía consumida se representan en la Figura 38 y los valores finales en la Tabla 7.

Tabla 7: Energías consumidas por el compresor para todos los modelos propuestos en condiciones de contorno estándares

Modelo	Energía consumida por el compresor [kJ]
Principal	9927.17
Bypass	10393.60
En cascada	33712.35
Presurización líquida	17196.10
Refrigeración cruzada	10314.54
Completo	16795.61

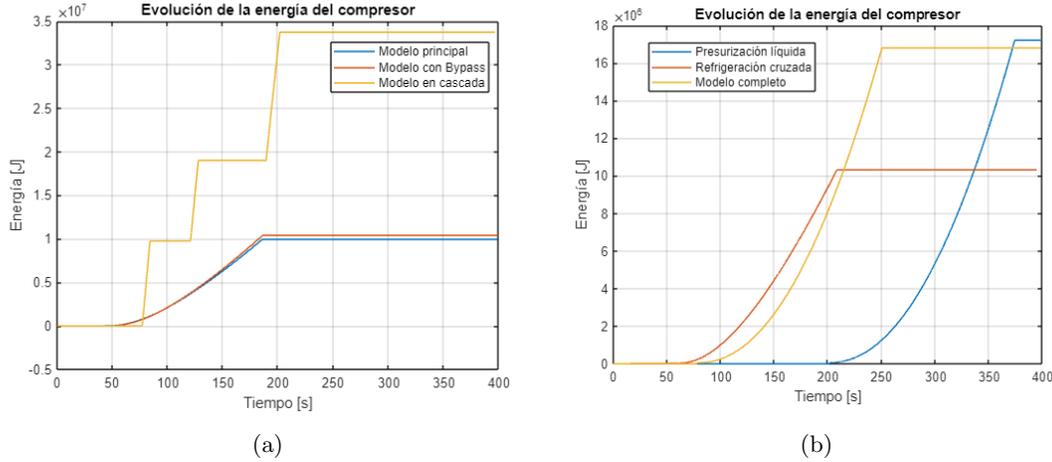


Figura 38: Evolución de la energía consumida en el compresor en todos los modelos propuestos

Las conclusiones que se pueden extraer de estos datos son parecidas a las expuestas en anteriores líneas. La tendencia general es uniforme para todos los modelos. Esto es síntoma de un comportamiento en absoluto sorprendente, pues la forma que toman todas las gráficas se corresponden directamente con una función potencial; consecuencia de que a medida que la presión sube, la energía para comprimir el gas también lo hace. Ordenados de menor a mayor energía, en un primer nivel se sitúan en primer lugar el modelo principal, su versión con bypass y el modelo con refrigeración cruzada con diferencias imperceptibles entre sí, después el modelo completo y el de la presurización líquida, y por último con el doble del gasto que el anterior, el modelo de repostaje en cascada.

Para el primer grupo es lógico que estos modelos se sitúen en esta posición ya que por un lado, el volumen de cámara se ha ajustado teniendo de base el modelo principal, y por otro, son los modelos que más energía gastan en el precooling. En cuanto al segundo grupo, la presurización líquida provoca un desplazamiento de la energía consumida del precooling al compresor. Esto es así porque evita el salto de presiones inicial, el cual provoca una subida drástica de la temperatura, ahorrando trabajo en el precooling. Sin embargo hace que el compresor trabaje a presiones más altas desde el principio. Esa es la razón por la que la demanda de potencia aparece de forma casi lineal en lugar de ser amortiguada como en los demás casos. En último lugar se sitúa el modelo en cascada. Según lo comentado anteriormente, se pueden identificar dos razones principales para que el gasto de energía con este esquema sea tan elevado:

- Se ha visto que la potencia se aplica de manera drástica hasta el punto en el que hay que limitar la velocidad del compresor manera externa. Si se optimizase el protocolo de llenado de los HPT probablemente se obtendrían valores más comedidos por trabajar en un rango mucho más eficiente. Prueba de ello es, por ejemplo, que solamente con la carga del primer tanque de alta presión (el de 35 MPa) se gaste tanta energía como con una carga completa en el modelo principal.
- También existe una ineficiencia intrínseca de tener que cargar a cantidades fijas de presión

para luego provocar de nuevo grandes depresiones a medida que se abren los diferentes tanques de alta presión.

Resulta curioso que la forma más eficiente de funcionamiento en esta forma de cargar hidrógeno, sea llevar al infinito la cantidad de tanques con saltos de presión infinitamente pequeños, para cargar con el compresor exactamente a la presión que se descarga el tanque. Esa forma es exactamente la que se consigue con la presurización directa. Para más detalles de funcionamiento, se han expuesto las presiones y temperaturas en las diferentes etapas del compresor en el Anexo III.

9.6. Comportamiento de las válvulas de control

El análisis del comportamiento de las válvulas y su efecto ayuda a encontrar fallos en el sistema de control o mejorar los criterios lógicos con los que actúan los automatismos a lo largo del sistema. Se divide el tema en 2 subapartados. Además de la explicación principal se han añadido en el anexo III las gráficas que muestran la variación de la temperatura entre los puertos A y B de cada válvula. No se considera esencial comentar las tendencias debido a que las aportaciones a las temperaturas son fruto de varios fenómenos simultáneos y un análisis generalizado del comportamiento no aportaría información relevante.

9.6.1. Fracción de apertura: vista general del funcionamiento

Para obtener una vista general de los rangos de funcionamiento de las válvulas, se emplean las gráficas que se muestran en la Figura 39. En ellas se muestra la orden de salida de los controladores PID asociados a cada una de las válvulas de control. Se toma directamente esta señal, puesto que la respuesta de las válvulas no tiene asociada ninguna inercia ni retraso.

Tomando la Figura 39 a), se pueden discernir 3 áreas principales para cada modelo: una fase inicial de equilibrado de presiones donde se regula el caudal que atraviesa la válvula mediante una apertura parcial, un periodo de funcionamiento nominal, y por último un área, posterior al tiempo de finalización, donde la respuesta de la válvula es indiferente ya que no existe ningún flujo dentro del circuito.

En el modelo principal la primera fase es notablemente más corta que en los otros dos, debido a que el compresor actúa a modo de regulador de caudal desde el momento en el que el volumen situado aguas abajo de la válvula en cuestión, está finalizando el proceso de igualar presiones. Esto mismo se corresponde con la aparición de la velocidad angular provocada por el gas, comentado en el apartado anterior. Para los otros dos modelos representados, se emplea el uso del bypass. Por tanto, el estrechamiento inicial se asocia directamente a la fase de equilibrado de presiones, como si de un repostaje en cascada se tratase.

Para la segunda fase de funcionamiento nominal, la diferencia la marca el uso del compresor. Este elemento también se implementa con un control que regula el APRR, por lo que en el mejor de los casos, lo que se busca es que las válvulas puedan estar completamente abiertas. En este sentido se puede ver en las tendencias para los primeros dos modelos, que el sistema de control logra con éxito esta tarea. En el caso del modelo en cascada, la regulación del APRR se hace desde esta válvula, por lo que la aparición de 3 escalones consecutivos (aparte del primero asociado a la fase inicial) se asocia a la descarga de cada tanque de alta presión. Se puede calificar como exitosa la regulación del caudal en régimen estable, pero se encuentran errores en los cambios de tanque. Existen pasos

intermedios en los que el flujo se reduce a 0 por un instante para poder realizar con seguridad la apertura del nuevo tanque. En esos momentos, la válvula identifica la caída del caudal y tiende a abrirse drásticamente, provocando los picos que se representan en la figura 39 a). Ese mismo fenómeno ocasiona que cuando se abre el nuevo tanque, la posición de la válvula completamente abierta, lo que a su vez provoca una excesiva subida en el caudal (en la Figura 28 se ven los efectos en la forma de escalón que adopta el inicio de cada descarga), como consecuencia se produce un cierre repentino que, en una válvula real, podría acarrear problemas de fatiga. Esto se puede solucionar optimizando el sistema de control lógico.

Realizando el mismo análisis para los casos de la figura 39 b), se divide en 2 grupos:

- Por un lado, el modelo de refrigeración cruzada, actúa de manera similar a los modelos con compresor de la figura 39 a), pero en este caso, la primera fase se anula completamente. Se sabe que este modelo no tiene un sistema de bypass, por lo que es prácticamente muy cercano al modelo principal en la parte inicial.
- Por otro lado, pasando directamente a la figura 39 d), se aprecia que la válvula de control de masa si esta actuando, a diferencia del modelo principal (figura 39 c). Se puede afirmar que la aportación de estos dos fenómenos causa la no actuación de esta válvula.

El patrón que siguen los últimos dos modelos, basados en la compresión inicial del depósito, muestran un comportamiento es comparable a todos los modelos que contienen un compresor, con una única diferenciación. Se conoce que dichos modelos logran una compresión del depósito del vehículo en un primer momento, sin que exista ningún flujo de gas. La lectura de la válvula APRR, que se basa en la tasa de presurización, presenta un cierre en el momento en que la presión en el depósito aumenta a un ritmo más acelerado de lo establecido. Ese periodo coincide en ambos modelos con el final de la compresión del depósito, momento donde el APRR es más alto. El tiempo que la válvula regula, es lógico que sea mayor en el caso del modelo completo, dado que la compresión es más rápida. Por otra parte, cuando el pistón llega al final de su carrera y comienza a retroceder (el compresor empieza a inyectar gas), la válvula se abre completamente hasta el final.

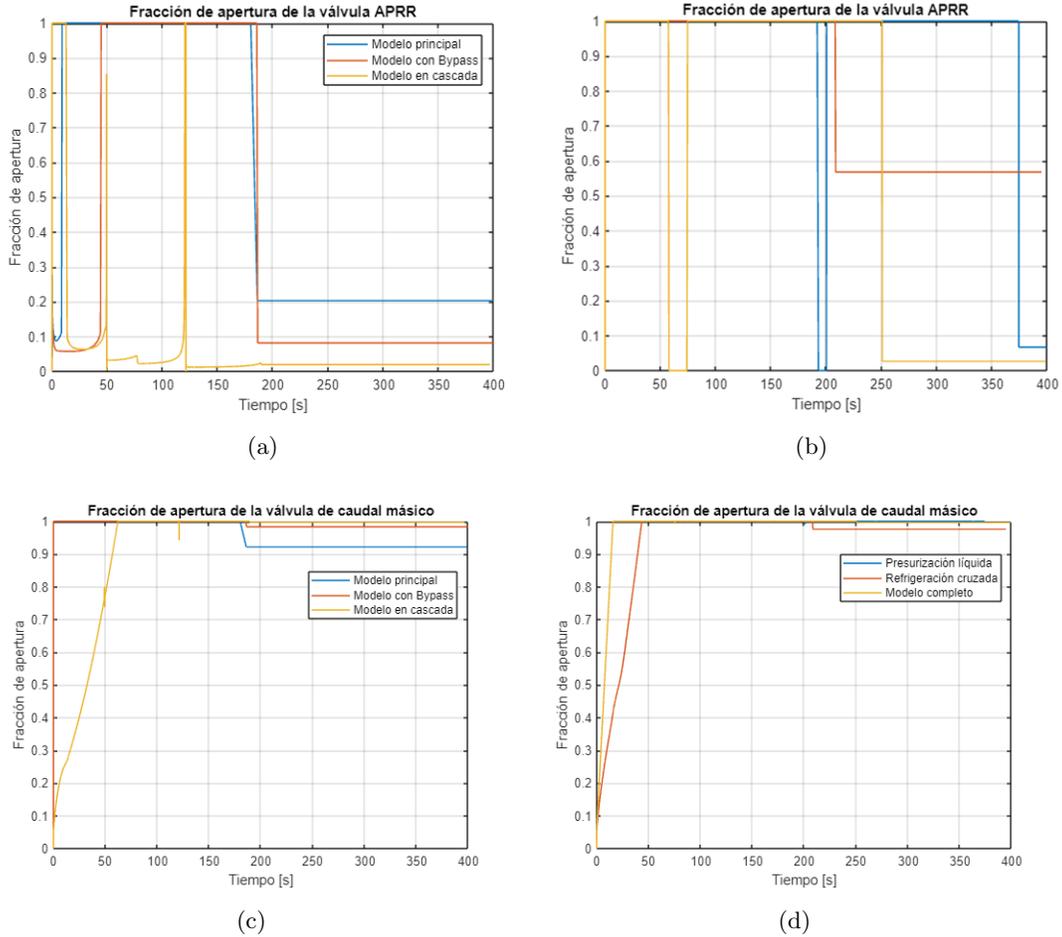


Figura 39: Evoluciones de la fracción de apertura de las válvulas de control.

Las gráficas que muestran la apertura de las válvulas de masa enseñan que, para la temperatura ambiente seleccionada, la condición limitante la impone el APRR. Además, también se concluye que estos elementos solamente actúan a modo de sistema de seguridad por si se dispara algún valor en el flujo. Es posible que, en algunos modelos a temperaturas ambiente muy bajas y depósitos muy grandes, las funciones de las válvulas se intercambien pasando a ser la de control de flujo la que imponga las mayores restricciones.

9.6.2. Caída de presión en las válvulas

Este subapartado sirve para mostrar de forma más clara qué válvula es la que está realmente actuando en un momento dado. En la Figura 40 a) se muestra la diferencia de actuación en la primera fase del modelo principal y el del bypass, en la forma de los triángulos rojo y azul. Un funcionamiento óptimo acarrearía un triángulo de ángulo recto perfecto. Pero, sobre todo en el modelo principal, se ve que en el final del triángulo que la punta se corta con una línea más o menos

vertical. Ese fenómeno significa que la apertura en los puntos cercanos a la igualdad de presiones entre los dos puertos la apertura es demasiado grande, provocando picos de flujo.

El modelo en cascada muestra 4 triángulos correspondientes cada uno con el LPT y los 3 HPT, dando lugar a dos anomalías respecto al funcionamiento óptimo. Por un lado, el primer pico cabe esperar que sea exactamente igual al rojo, pero en cambio es más redondeado y pequeño. La explicación se muestra en la Figura 40 c), donde se ve que la válvula de control de masa también está actuando en ese instante (probablemente por la falta de velocidad en la apertura). La otra falla en el funcionamiento, se da en el valle que aparece en el segundo 75, el cual debería llegar a 0 por la ausencia momentánea de flujo. Eso significa que la apertura del tanque de 50 MPa se da demasiado rápido, pudiendo causar algún problema de reflujo.

En lo que a los modelos representados en la figura 40 b), el único detalle a comentar se encuentra en el pico que muestra el modelo completo en el segundo 55. No debería aparecer una caída de presión, ya que no se espera la aparición del flujo hasta después del final. Puede deberse a la fase de iniciación del compresor, que comienza a funcionar ligeramente antes de la apertura de la válvula del depósito. En cualquier caso, una válvula de aislamiento adicional se ve necesaria para solucionar el problema. El modelo de presurización líquida en cambio, realiza la presurización sin flujo de gas, tal y como se espera.

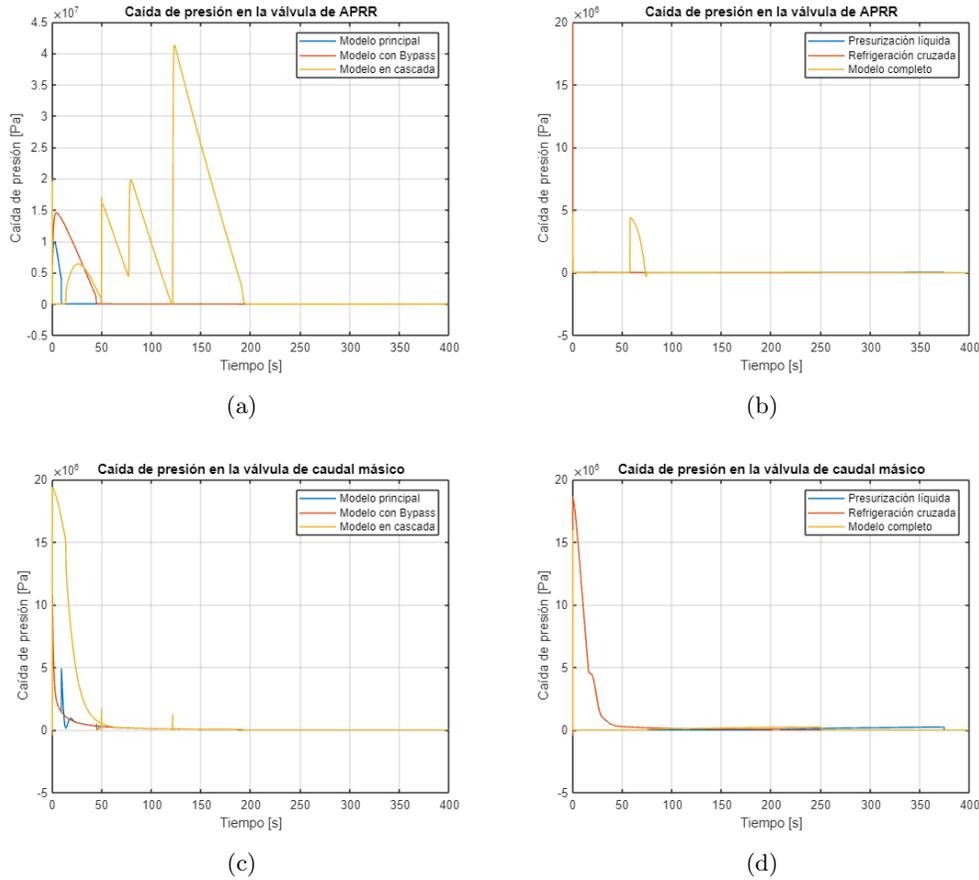


Figura 40: Evolución de la caída de la presión en las válvulas de control

Las Figuras 40 c) y d) muestran que, por una parte, la aportación de la válvula de control de masa, tiene una participación mayor a lo esperado en el modelo principal por otro lado, en los modelos en los que la dinámica es más lenta la caída de presión se da en esta válvula. Y que, por último, también cumplen la función de seguridad. Esto se observa en los pequeños picos aparentes en el modelo en cascada y el inicio del principal.

9.7. Comportamiento del intercambiador de calor

El intercambiador de calor es, junto con el compresor, el elemento en el que más atención se ha prestado a lo largo de todo el trabajo. En este apartado se analizan las variaciones de presión y de temperatura entre la entrada y la salida para comprender su funcionamiento en diferentes escenarios, y se compara la energía consumida para cada modelo. Cabe recordar que el modelo completo no cuenta con un intercambiador, por lo que no tiene presencia en el análisis. Para todos los demás modelos las características son las mismas aun cuando los comportamientos son notablemente dispares.

9.7.1. Presión y temperatura

La diferencia de presión no se ha analizado en todos los modelos. Se ha tomado el modelo principal como ejemplo (Figura 41), para demostrar que, frente a los grandes cambios de presiones, presentes en cada uno de los componentes, los valores aquí no son significativos.

El pico inicial de variación de presión no se toma como un valor representativo, ya que se teoriza que es fruto de un ajuste meramente matemático causado por los picos transitorios de caudal. A medida que avanza la simulación y se estabiliza el flujo, se ve que el valor de la caída baja hasta tomar valores menores a 2000 Pa durante todo el régimen cuasi-estacionario. Esa variación, frente a las presiones de aproximadamente 70 MPa que se obtienen en el depósito, supone un 0.0029 %¹⁵.

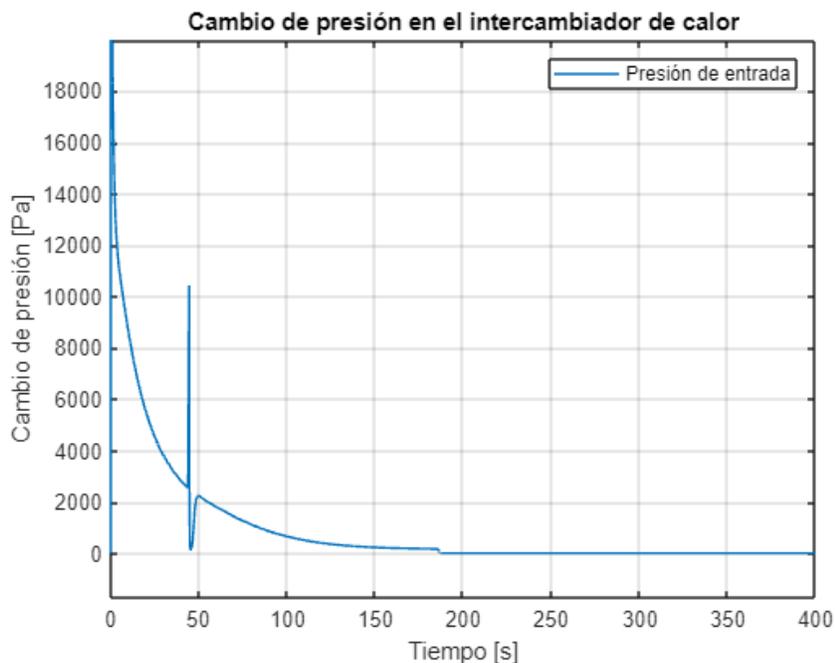


Figura 41: Variación de presiones en el interior del intercambiador de calor en el modelo principal

El análisis de las diferencias en las temperaturas se plantea en términos generales sin desentrañar las razones detrás de cada matiz. Porque al igual que sucede en las válvulas, las influencias simultáneas de las condiciones en los nodos colindantes, las variaciones de presión, las diferencias en el caudal másico y los coeficientes que rigen el intercambio de calor con el líquido refrigerante, hacen de cada pequeña variación un problema a analizar por separado. Dicho esto, se analiza la evolución de las temperaturas de los modelos representados en las Figuras 42 a) y b); no sin antes mencionar que la salida del precooler casi en todo momento se mantiene constante a $-40\text{ }^{\circ}\text{C}$ para los primeros 3 modelos, y se controla mediante el incremento de la temperatura en el depósito para

¹⁵Incluso tomando la presión inicial del LPT y comparando el pico máximo de 18 kPa, la caída supone un 0.09 % de la presión de almacenamiento

los otros dos.

En primer lugar, llama la atención la gran diferencia que muestran el modelo principal y el modelo con el bypass. En el inicio la tendencia de la estructura que contiene el bypass es relativamente estable pero el modelo principal llega a tener una bajada en la temperatura tal, que la diferencia se aproxima a 0 K. Esto, como se puede observar también en el modelo de refrigeración cruzada en la figura 42 b), se corresponde al paso del hidrógeno por el compresor. El gas, impulsado por la caída de presión, pasa por el compresor perdiendo energía (y por ende, temperatura) en el proceso.

En una segunda fase en la que el compresor funciona en su régimen nominal, se observa claramente que aunque el sistema sea el mismo para los dos modelos a partir de ese punto, dan tendencias dispares. Hasta la fecha no se ha podido corroborar si en realidad la suavidad que aporta el sistema de bypass, es tan beneficioso en comparación con el sistema que no tiene.

Si se recupera la información donde se comentan las presiones y temperaturas del LPT (Figura 42), las diferencias entre estos dos modelos en las propiedades del gas en este punto no varían de forma tan acentuada, como para marcar una diferencia tan grande. Lo que se observa es que en casi todo momento el gas en el modelo con bypass se mantiene entre 0 y 2 K por debajo en cuanto a la temperatura, y entre 0 y 0.2 MPa por debajo en presión. Hay que recurrir a las Figuras 65 y 66 del anexo III. donde se muestran las temperaturas de la tercera etapa del compresor para ver que la tendencia de subida de la temperatura en el modelo principal es más acentuada.

Es posible que para las características concretas que se le han dado al compresor, del modelo con bypass sean más adecuadas y el compresor transmita la energía comprimiendo de manera más eficiente. Aun así, no se encuentran argumentos suficientes para afianzar esa hipótesis, por lo que el cambio de temperaturas, y la subsecuente diferencia en las energías consumidas en el intercambiador, no se toman como fiables. Se plantea como opción más probable que, debido a la rápida dinámica del modelo principal en algunos puntos, el sistema pueda estar cometiendo errores en el cálculo de las temperaturas de la tercera etapa del compresor. Por la misma razón, se toman como valores más consistentes los resultados que muestran en este apartado el modelo con bypass.

Las variaciones de temperatura que muestra el modelo de presurización en cascada, son esperables. El primer valle del primer instante es indiscutiblemente un error matemático debido a un flujo próximo a 0 en el momento de apertura del sistema; y lo mismo ocurre en las líneas verticales que aparecen en los cambios de tanque. Aun así, se asume que la cantidad de masa a la que se atribuyen las propiedades erróneas es insignificante y no tiene efectos apreciables en la evolución del sistema. Por lo demás se observan cuatro rampas (una por tanque) que parten de la temperatura ambiente y la diferencia de temperatura decrece por el fenómeno de enfriamiento en los tanques a medida que se vacían.

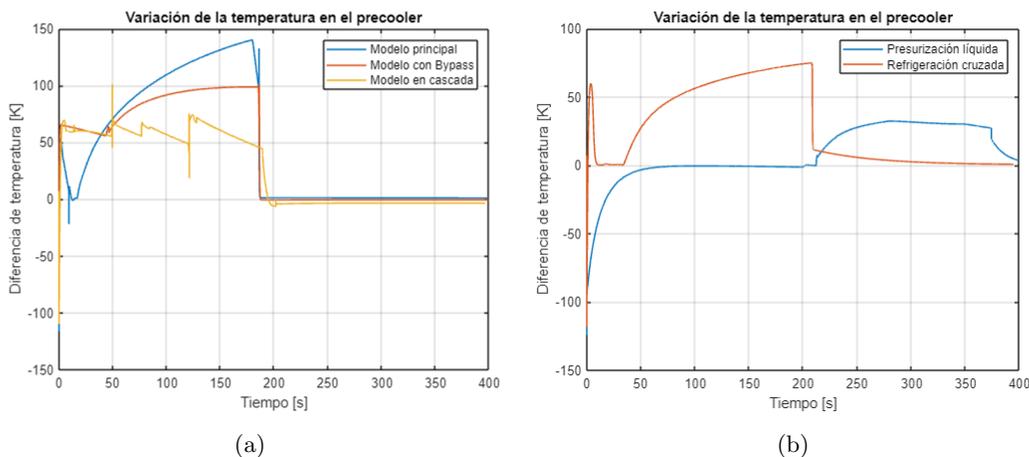


Figura 42: Variación de la temperatura entre la entrada y la salida del precooler

Los efectos observados en el modelo de refrigeración cruzada de la Figura 42 b) son en su totalidad comparables al modelo principal, con la diferencia de que la temperatura de salida en este caso es en torno a 270 K gracias al post-enfriamiento en el depósito.

La tendencia del modelo de presurización líquida se puede tomar como nula hasta llegar al tiempo de simulación donde el pistón llega a su punto máximo en el segundo 200, ya que cualquier flujo hasta ese instante es causado por las filtraciones en las válvulas que están configuradas para ser del orden de 10^{-6} kg/s. Después de este punto, las diferencias entre la entrada y la salida son más bajas que cualquier otro puesto que el sistema de control permite temperaturas a la salida del precooler de entre 307 y 336 K.

9.7.2. Energía y potencia

La expresión de la potencia consumida en el precooler, ilustrada en la Figura 43, depende directamente de la variación de temperatura, y al mismo tiempo, del caudal con el que se alimenta el líquido refrigerante. En este caso, la medición de la potencia se realiza directamente sobre el líquido refrigerante, ya que si no, habría que contemplar todo un sistema de refrigeración adicional que enfriase el propio líquido. A pesar de que el hecho de añadir un sistema de refrigeración completo y fundamentado, podría dar resultados de potencia más precisos, se ha comprobado que ese sistema solo aporta errores de cálculo superiores a los cometidos en el estado actual del modelo. Teniendo en cuenta la carga computacional que supone un sistema de refrigeración completo, y que el foco de la investigación reside en el consumo total de la energía, se ha decidido no modelizarlo.

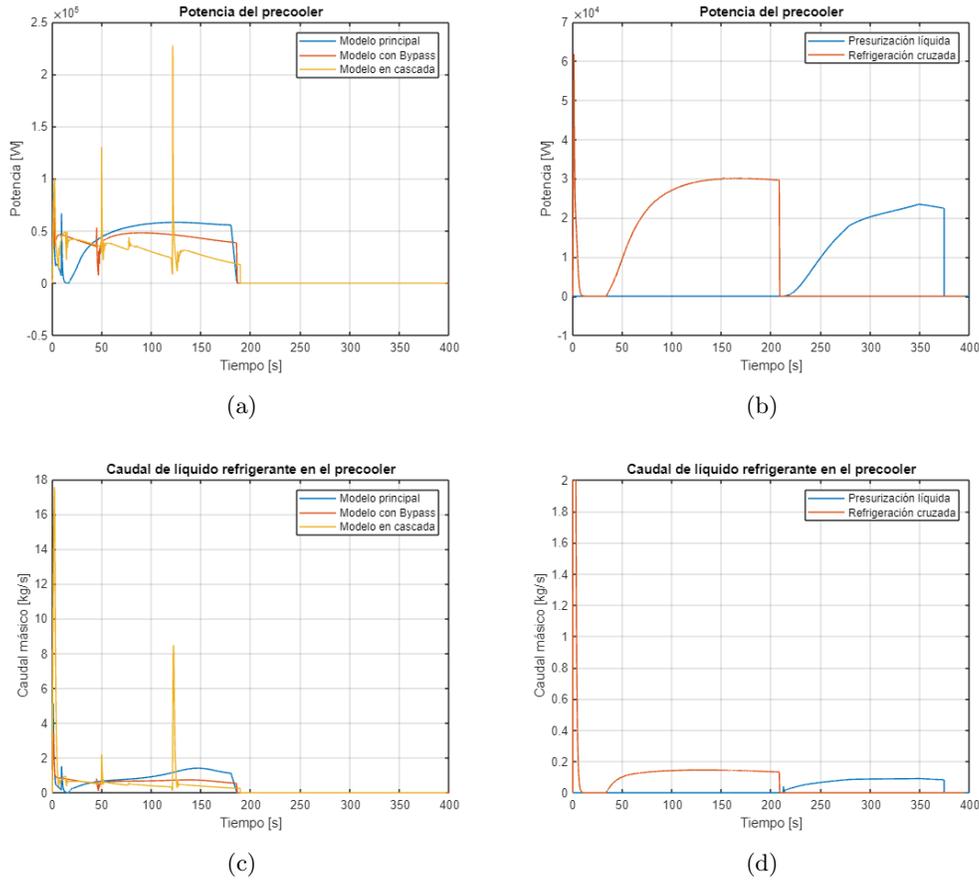


Figura 43: Potencia y caudal de líquido refrigerante en el intercambiador de calor

Volviendo al esquema empleado, las expresiones de potencia calorífica reales se espera que sean, más continuas, pudiendo amortiguar los picos más altos con la implementación de un pequeño reservorio de líquido enfriado, y por otro lado, que aparezcan ligeramente desplazadas a la izquierda en el tiempo.

No se aprecian comportamientos anómalos respecto a las mediciones de variación de temperatura. El único error, asociado una vez más a un sistema de control demasiado simple, es el que provoca los picos de caudal en los instantes donde la temperatura muestra valores inusualmente altos. Ese problema se puede solucionar, filtrando matemáticamente la señal entrante al PID (se muestra la propuesta de filtro directamente en forma de bloques de Simulink en la Figura ??), o asociando un flujo límite para cada condición de contorno.

Respecto a la magnitud de la potencia exigida, existe una diferencia de hasta un orden de magnitud entre los modelos convencionales y los de refrigeración cruzada y/o presurización líquida. Queda de manifiesto por tanto el objetivo de ahorrar energía en el precooling (a costa de desplazar el trabajo

al compresor).

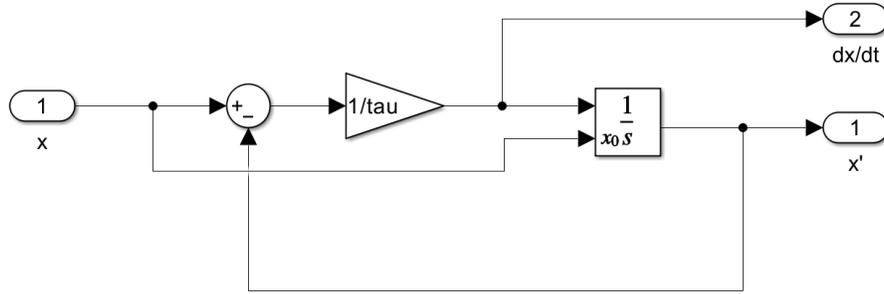


Figura 44: Configuración interna del bloque que se emplea a modo de filtro de las fluctuaciones

Es interesante ver en la Figura 45, que la aplicación de la energía toma valores que ascienden de forma lineal, a pesar de lo errática que pueda parecer la aplicación de la potencia.

Según las gráficas de las temperaturas, en este caso la ventaja la toma el modelo del bypass respecto al modelo principal, aunque la diferencia sea un 7,17%. Donde se ven notables mejoras, de hasta un 29.57% de ahorro energético respecto al modelo principal, es el modelo en cascada. Ese ahorro es una de las principales razones por las que se investiga este modelo, además del aumento en el control del flujo. Pese a que el ahorro sea considerable, no hay que olvidar que el análisis se puede considerar como primera carga del día, por lo que los depósitos de alta presión se inician a temperatura ambiente. Si se realizase el mismo análisis con las condiciones de temperatura finales, la temperatura de los HPT sería considerablemente más alta, ocasionando que el precoolier tuviera que realizar un mayor trabajo.

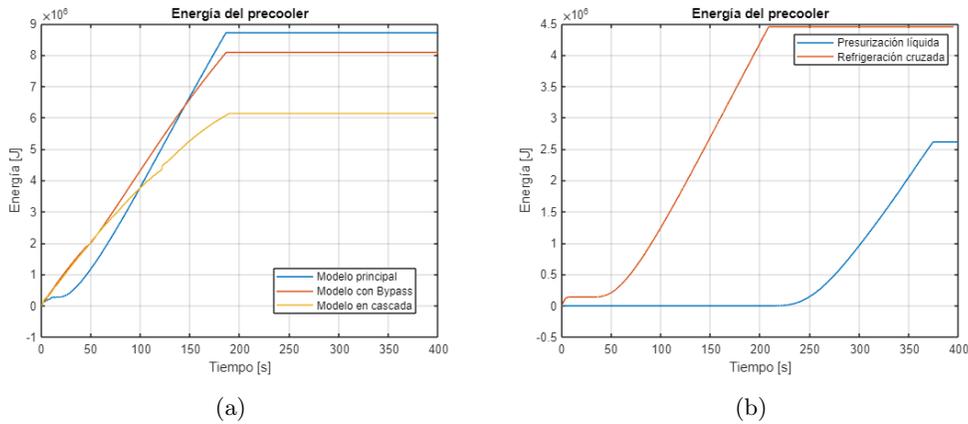


Figura 45: Energía consumida en el precoolier

Indagando en los modelos de la Figura 45 b), se ve que la escala en el eje Y se reduce a la mitad en

comparación con su homólogo. Los valores finales de ahorro para los modelos de presurización líquida y la refrigeración cruzada son 79.99%, y 48.89% respectivamente. Se demuestra con esos valores que las propuestas reducir el consumo son exitosas, y aunque la implementación de los sistemas de ahorro no sea precisa pueden calificarse de dignas de estudio. Para una mejor visualización de los valores de energía consumidos a la conclusión de un ciclo se muestran en la Tabla 8.

Tabla 8: Energía consumida en el precooler

Modelo	Energía consumida [kJ]
Principal	8707.76
Bypass	8083.34
Cascada	6131.90
Presurización líquida	4449.52
Refrigeración cruzada	2613.24

9.8. Análisis de las propiedades en el vehículo y energía consumida en total

La última tarea pendiente para completar el análisis de los sistemas modelizados consiste en proporcionar un comentario más detallado sobre cómo se comporta el gas en el depósito del vehículo. Además, se requiere realizar una breve comparación del gasto total de energía, centrándose en los dos principales componentes: el compresor y el precooler.

Por un lado, se seleccionan la presión y la temperatura en el depósito como indicadores generales de las propiedades termodinámicas, y después se comentan los parámetros de control como el caudal másico, el APRR y por último el estado de carga.

9.8.1. Presión y temperatura

Las condiciones impuestas en la mayoría de los elementos de control, toman en cuenta la evolución de las propiedades en este punto, por lo que no es de extrañar que muestren tendencias predecibles. En cuanto a las presiones no hay cuestiones relevantes en las tendencias. Es el elemento central en los sistemas de control de las válvulas y el compresor, y en el estudio que se toma como referencia el protocolo SAE, la velocidad a la que se incrementa viene según las condiciones iniciales.

Las únicas diferencias respecto a lo estipulado por la SAE son las partes donde se presuriza el depósito mediante el líquido inyectado por un pistón, y son completamente intencionadas tal como se explica anteriormente.

Una vez afianzados los modelos se considera interesante buscar la optimización de los protocolos y mejorar la eficiencia si se cambian las tasas de presurización (no se han hecho pruebas en esa dirección) en este trabajo.

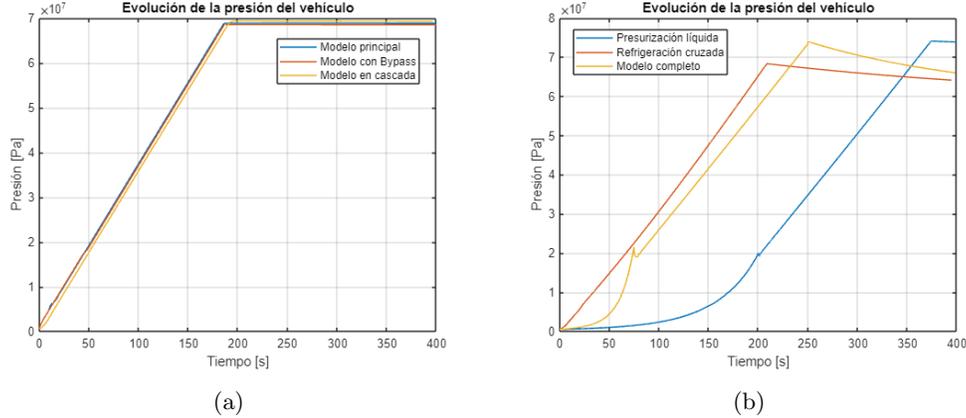


Figura 46: Evolución de las presiones del depósito del vehículo

Las temperaturas que presentan los modelos más simples en la Figura 47 a), sufren un ascenso repentino en la temperatura del depósito. Lejos de ser un error de cálculo, es un efecto que se achaca al salto de presiones que sufre el gas al llegar al depósito, presurizado inicialmente con 0.5 MPa. También se puede ver para los 3 modelos, que la subida tiene una parada repentina entre los 330 K y 340 K, antes de retomar el ascenso a un ritmo mucho más calmado. Dicha parada se debe al equilibrio térmico entre el calentamiento producido por el salto de presiones, y la energía para calentar el flujo entrante desde los 233 K hasta los 330 K. Incluso se aprecia en todos los casos una ligera bajada, probablemente porque, a medida que el salto de presiones es menor, ya que no se libera energía suficiente para calentar el flujo entrante. Después de la primera fase transitoria que acaba entre 25 y 50 s dependiendo del modelo, se llega a una fase en la que la tasa de presurización constante, genera una cantidad de calor suficiente como para subir la temperatura de toda la masa de hidrógeno.

Las influencias de los sistemas propuestos para mejorar la eficiencia del ciclo repercuten notablemente en la evolución de las temperaturas (Figura 47 b). El modelo de refrigeración cruzada que conserva la primera fase de los modelos convencionales, pero cambia la dinámica en la fase en la que el compresor presuriza el gas. Es cierto que en el inicio la subida no es del todo repentina, y es que al calentamiento en el depósito del vehículo le sigue el enfriamiento provocado por el flujo de líquido refrigerante proveniente del LPT; por esa razón, en el momento en el que ese flujo de refrigeración toma valores nominales, se aprecia una pausa en la subida de la temperatura.

Ese efecto “amortiguador” no debería suponer ningún cambio en la forma en la que trabajan los materiales, pero se valora positivamente ya que se aleja aun más de la posibilidad de que se genere una apertura de grieta por los efectos de dilatación térmica, o cualquier efecto de choque térmico¹⁶.

La tendencia de la segunda fase se aproxima más a una función logarítmica que a una recta. Ese crecimiento, que en este modelo se ve amortiguado, también proviene exclusivamente del enfriamiento cruzado. El balance energético sin la refrigeración, da como resultado un calentamiento

¹⁶Hay que destacar que a pesar de tener un cambio tan brusco en el gas, las temperaturas de las paredes del depósito evolucionan mucho más lentamente.

lineal al cual hay que restarle la cantidad de calor expulsada fuera del depósito. Una refrigeración que es más efectiva a medida que el tiempo avanza, ya que la temperatura del LPT tiende a bajar mientras que la del depósito sube. Razón por la que cada vez se suaviza más el incremento de temperatura. Al contrario que sucede con la refrigeración cruzada, el modelo de presurización líquida conserva la segunda fase de forma similar al modelo principal, pero varía por completo la primera.

La finalidad de la presurización inicial controlada es evitar el salto de temperatura que pueda sufrir el gas en la primera fase, por lo que se controla la temperatura para que ascienda linealmente. Existe la posibilidad de implementar otros criterios para la presurización, pero de entre los estudiados, este ha resultado ser el más efectivo.

La caída de temperatura que se muestra en el segundo 200, que marca el cambio de fase, no solo es efecto de la retirada del pistón, sino que hay que sumarle la aportación de la entrada de un flujo refrigerado de gas. La suma de sendos efectos, aporta una caída beneficiosa para poder incrementar la temperatura de la salida del precoolers, hasta el punto en que se llegue a la temperatura límite en el final del repostaje en el depósito.

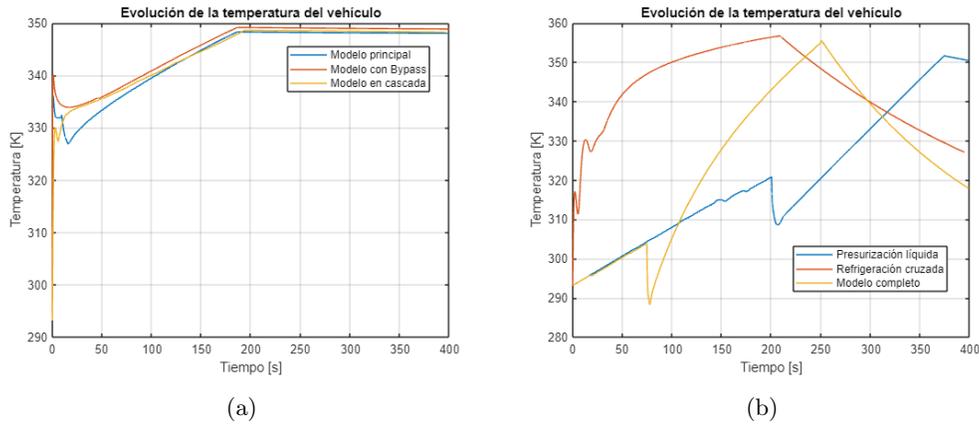


Figura 47: Evolución de las temperaturas del depósito del vehículo

Un último efecto que favorece la refrigeración en el pistón es la transferencia de calor al líquido compresor que se acaba retirando. La Figura 48 muestra las mediciones de temperatura para el líquido del pistón. Si se observan en conjunto la Figura 47 b) y 48, se intuye que la transferencia de calor que ocurre del gas al líquido, es imperceptible como para calificarlo como un método de enfriamiento efectivo, pero basándose en la condición actual del modelo, la bajada de temperatura que supone en el final del ciclo es de aproximadamente 6 °C. Adicionalmente, una posibilidad para no perder efectividad de enfriamiento de un ciclo a otro, es simplemente refrigerar el líquido con un flujo de aire a temperatura ambiente.

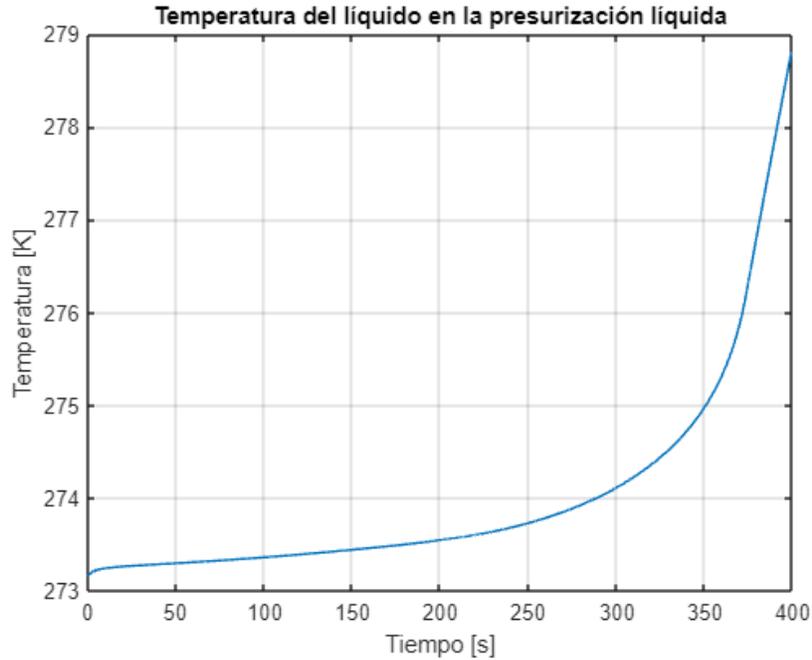


Figura 48: Evolución de la temperatura del pistón en el modelo de presurización inicial

El modelo completo, literalmente aúna la primera fase del modelo de presurización líquida, y la segunda del modelo con refrigeración cruzada. La primera fase, con la implementación de la refrigeración, se beneficia enormemente acortando los tiempos de avance del pistón con un factor de 2.25. Este hecho, junto con la correcta tendencia que sigue en la segunda fase, demuestran el potencial de la sinergia entre las dos ideas.

9.8.2. SOC, APRR y caudal másico

Tomando como referencia el estado de carga que se obtiene en las condiciones actuales para el modelo principal, se han ajustado los demás para poder llegar a unas cotas comparables. Tras ver las gráficas de presión y temperatura, en tanto que el SOC es la densidad real del gas partida por la densidad en condiciones de 70 MPa y 15 °C, no reside novedad en el análisis de las gráficas de la Figura 49.

En términos comparativos, los modelos más simples no muestran absolutamente ninguna ventaja unos sobre otros a iguales condiciones en la salida del precooling. En los modelos de la Figura 49 b) en cambio, vuelve a demostrarse la eficiencia de aunar las ideas presentadas, ya que, aun habiendo eliminado el intercambiador, logra estados de carga ligeramente superiores.

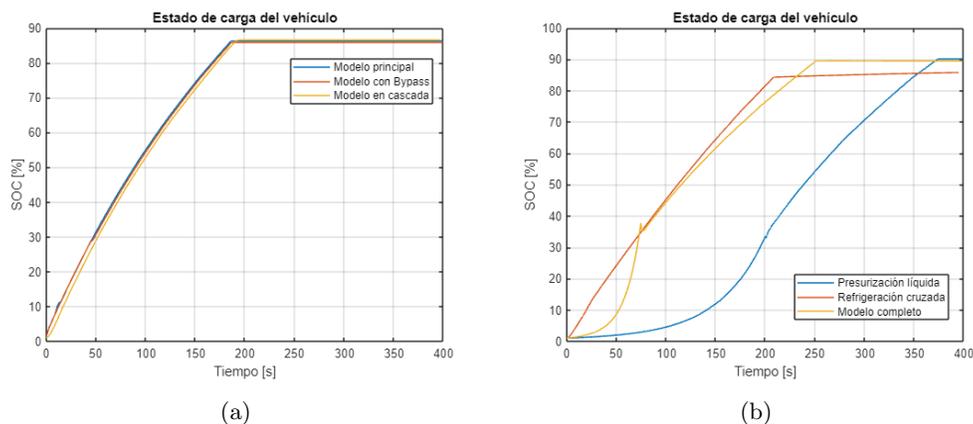


Figura 49: Estado de carga del vehículo

El caudal másico es uno de los factores a los que más fácilmente afecta un evento como un cierre/apertura de válvulas o similares. Por esa misma razón, siempre que sea de manera completamente puntual la norma no prohíbe que este valor pueda pasar de 0.06 kg/s, como sucede en las anomalías detectadas en los modelos de la Figura 50 a).

En el caso del modelo principal, la fluctuación que se muestra en torno a los segundos 15-30, es la producida por la puesta en funcionamiento del compresor en régimen de iniciación. El modelo que incluye bypass es capaz de sortear ese error, debido a que el inicio lo hace desde parado. Pero desde el punto en el que se cierra el bypass hasta que el compresor llega a su funcionamiento correcto, existe una desincronización, que no parece tener ningún efecto más allá de atrasar llenado un par de segundos. Esto se comprueba con la continuidad que se muestra en las presiones en ese instante, síntoma de que no hay rastros de golpes de ariete ni nada parecido. El modelo de repostaje en cascada muestra las anomalías en los puntos de cambio de tanque, ya comentados anteriormente. Las anomalías comentadas, debido a su carácter puntual, y su nulo efecto en la dinámica del sistema, (salvo en el modelo principal, cuyo caso que se podría someter a debate), se cree que son fruto de errores o ajustes matemáticos que no tienen influencia en modelos reales.

En cuanto a los modelos de la figura 50 b), llama la atención la suavidad con la que se comporta el caudal. Es cuestionable, basándose en los análisis de los demás componentes, que la optimización en el aspecto de la masa sea mejor que en los modelos simples. La hipótesis que se plantea va ligada a que, al añadir coste computacional al modelo, no puede seguir rápidamente a los posibles cambios del sistema y, por ende, representa las fluctuaciones bruscas de manera más suavizada.

Por otra parte, al contrario de todos los demás, los modelos con presurización inicial muestran un caudal creciente a medida que el depósito se llena. Esta tendencia queda fuera de toda lógica ya que el flujo de gas tiende a calentarse y expandirse conforme avanza el tiempo. Aun así, en estos casos la retirada del pistón hace que el volumen de la cámara vaya aumentando con el tiempo y, por tanto, ese fenómeno causa una reacción contraria en la tendencia del caudal.

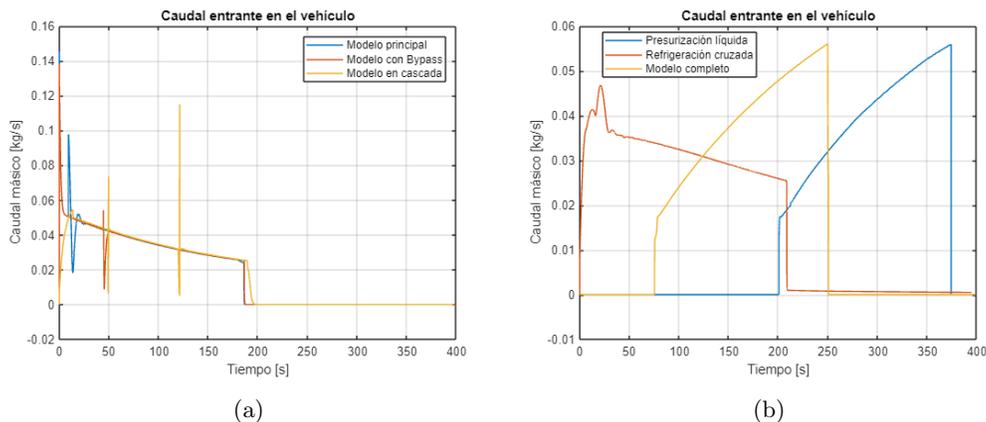


Figura 50: Evolución del caudal entrante en el depósito del vehículo

La tasa de presurización del depósito muestra varias de las irregularidades que pasan desapercibidas en las gráficas de presión. Comenzando por el modelo principal, las fluctuaciones que se muestran previas a estabilizarse en el APRR establecido, son acordes a las que se muestran en el flujo másico. Las oscilaciones y el ancho de la fluctuación indican que probablemente el error no proviene de un fallo numérico, sino que es probable que la lectura de ese mismo fallo por parte del controlador del compresor retroalimente un comportamiento anómalo de este elemento. Por este mismo razonamiento, se debería pasar un filtro con una τ mayor al controlador de APRR.

En cambio, el valle que muestra la tendencia del modelo del bypass parece acomodarse perfectamente al valor de APRR denotando que, o bien se ha filtrado correctamente el error, o bien al tratarse del periodo de iniciación del compresor, a este no le da tiempo a sobre-reaccionar al estímulo y se inicia como si no hubiera habido ningún cambio. En este sentido, cabría optimizar el comportamiento para que la parada sea mínima y no perder tiempo de llenado.

Los picos que muestra el modelo de repostaje en cascada son coherentes con las anotaciones previas por lo que no es necesario ahondar en este modelo.

Por último, hay tres comportamientos que merecen la atención del lector en la Figura 51 b). En primer lugar, las subidas y bajadas repentinas aparentes tanto en el modelo completo como en el de presurización líquida, pueden parecer errores significativos; pero nada más lejos de la realidad, corresponden a la fase en la que el pistón comprime el depósito. En ese momento no hay flujo en el sistema y, por tanto, no supone un problema, al menos desde la perspectiva de los efectos del gas. Se necesita un estudio de cargas dinámicas para determinar que una compresión que llegue a 1.4 MPa/s supone un riesgo para la integridad del depósito, aunque esto suceda a una presión de 20 MPa. En segundo lugar, el pequeño pico que muestra el modelo completo justo antes de cortar el flujo es síntoma de que el pistón llega al final de su recorrido (en el repliegue) demasiado rápido, y se genera un desajuste que lleva a una pequeña subida repentina de presión. La solución de este problema es diseñar un sistema automatizado que plantee y resuelva la ecuación que determina la velocidad precisa a la que debe repliegarse el pistón. En tercer lugar, la diferencia entre el modelo de refrigeración cruzada respecto a los demás, en el momento en el que el APRR debe seguir una cota

constante fijada en 363.33 kPa/s. Tras la medición exacta del valor al que llega dicha cota máxima en el modelo de refrigeración cruzada, es de 359.42 kPa/s, dejando a los otros dos modelos aún más lejos del objetivo a alcanzar (exactamente en 332.02 kPa/s).

El origen de estos dos tipos de error, aunque con efecto similar se sitúa en dos planos diferenciados. En el caso de la línea roja del controlador, se le achaca a una constante de integración demasiado pequeña, no dando la suficiente rapidez al sistema para llegar a la solución exacta. Eso explica también la tendencia ascendente. Cuando el pistón comprime el gas del depósito, se concluye que el controlador tiene la velocidad necesaria para tomar el valor correcto, pero retirar el pistón aumentando el caudal necesario para llegar al mismo APRR, genera un desajuste.

El efecto de un menor APRR, aumenta el tiempo de repostaje en 15 segundos para los modelos con presurización, y 8 s en el modelo de refrigeración cruzada. De igual manera, las cotas de potencia son más bajas de lo que cabe esperar tanto en el compresor como en el precoolers, aunque es más complicado aproximar con exactitud la variación en este punto. , se pueden estimar unos valores orientativos aplicando la condición de que la energía total se mantiene constante, resultando en un incremento de la potencia del precoolers en 5.3 % y 8.7 % respectivamente. En el compresor, se estima un incremento del 5.1 % y un 14.7 % (en este último caso el valor se aplica tanto al modelo de presurización líquida y al completo).

No se esperan efectos en la energía consumida pero del análisis que se realiza del modelo de presurización en cascada, se puede extraer que un gran incremento en la potencia, genera en una proporción mayor a 1/1, un aumento de energía. Por tanto, aunque en el escenario donde se llega al APRR indicado, el tiempo es menor, la cantidad de energía se espera que sea ligeramente mayor al medido en estas condiciones.

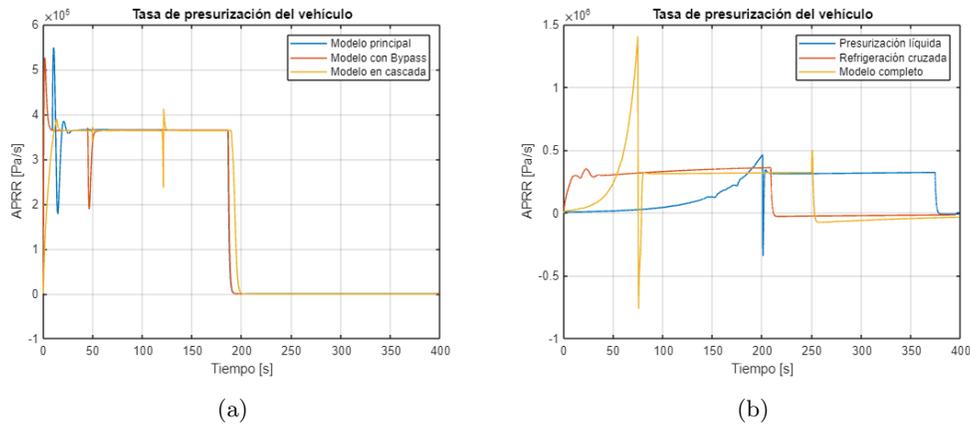


Figura 51: Tasa de presurización del vehículo

9.8.3. Energía total consumida

Para finalizar, se muestra un balance de las energías medidas para extraer conclusiones sobre la validez y eficiencia de los modelos propuestos. Todos los datos relevantes se recogen en la Tabla 9.

Tabla 9: Resumen de las energías invertidas en los modelos y sus comparativas

Modelo	Energía total [MJ]	Proporción energía compresor [%]	Ahorro energético [%]
Principal	18,634	53,27	-
Bypass	18,476	56,25	0,85
Presurización líquida	21,645	79,44	-16,16
Refrigeración cruzada	12,927	79,78	30,63
Completo	16,795	100	9,87
En cascada ¹⁷	39,844	84,61	-113,81

En la segunda columna se muestran las cifras de la suma de la energía consumida en el compresor y en el precooler. No se ha tomado en cuenta el gasto de los demás elementos porque las conclusiones que se quieren extraer son relativas a estos dos elementos. En ella, dejando de un lado el modelo de presurización en cascada, se observan valores comprendidos entre 12.927 MJ en el caso más “barato” energéticamente hablando, hasta 21.645 MJ. Se aprecia que de una propuesta a otra existen diferencias muy notables, señal de que puede existir un efecto apreciable cuando se lleve a un siguiente paso del desarrollo.

En la tercera columna se muestra el porcentaje de energía proveniente del compresor, de tal forma que el porcentaje restante lo consume el intercambiador de calor. Para los modelos convencionales el reparto es equitativo, mientras que en las propuestas más innovadoras se tiende a cargar más el compresor. En el caso de la refrigeración cruzada ese desplazamiento en las proporciones se obtiene directamente mediante el ahorro de energía en el intercambiador. Para el modelo de presurización es interesante ver que el proceso en sí mismo no es más barato, sino que logra un desplazamiento del consumo hacia el compresor. El modelo completo aprovecha ambos efectos, y consigue que la totalidad del trabajo se realice en el compresor.

La cuarta columna, contiene los valores de ahorro de cada propuesta, respecto al gasto energético total del modelo principal. Se puede ver cómo el modelo de refrigeración cruzada supone un ahorro de hasta el 30 % de la energía total consumida; lo que puede ser todo un avance si se logra implementar a pesar de sus complicaciones técnicas. No obstante, el modelo de presurización líquida es más costoso que la propuesta tradicional. La posible ventaja de este modelo se da con el desplazamiento de la carga al compresor, siendo en muchos de los casos más fácil dimensionar este elemento, y no el intercambiador. Por esa razón, puede haber situaciones en las que, si un precooler muy potente es demasiado caro, se puede implementar una solución como la que se plantea. También cabe mencionar que las complicaciones para instalar un sistema de inyección de líquido al depósito a través de la manguera, pueden determinar la inviabilidad del concepto tal y como se plantea. Se necesitan estudios más detallados para determinar la validez o plantear mejoras técnicas. Por último, la propuesta más compleja, muestra resultados muy prometedores en cuanto a la energía y las propiedades termodinámicas se refiere. La implementación de los dos sistemas propuestos, permite la opción de no instalar un sistema de refrigeración auxiliar, con todo el ahorro económico que ello supone, y además logra una mejora en la eficiencia del 10 %. Aunque el sistema de refrigeración cruzada es capaz de generar un mayor ahorro energético, pero el hecho de prescindir del precooler conlleva ventajas en cuanto a economía e infraestructura.

10. Conclusiones

10.1. Conclusiones generales

Respecto a la validez de los cálculos se concluye que los elementos más problemáticos son el control lógico y los cálculos del compresor. Para el nivel actual de la simulación, el elemento que se valora que tiene menos precisión en los cálculos, por su rápida dinámica, es el bloque del compresor. En este aspecto, las ecuaciones muestran un comportamiento bastante simple, que debe ser complejizado obligatoriamente si se quiere avanzar en la cuestión. El control lógico queda lejos de ser parecido al definitivo, pero si se lograra acabar con los problemas que afectan al funcionamiento efectivo del modelo, no se considera tan importante una aproximación más realista. Estas dos principales fuentes de incertidumbre, provocan, tal y como se comenta durante todo el texto, que los resultados de la energía sean más consistentes comparativamente y no de forma absoluta.

En general, se ha identificado que la tecnología debe evolucionar totalmente. Comenzando por el aspecto técnico: selección y desarrollo de materiales resistentes a la fragilización por hidrógeno, sistemas de compresión eficientes para gases ligeros a altas presiones; el estado actual de los protocolos y las normas, el *layout* mismo de los sistemas de repostaje... Absolutamente ningún elemento de entre los mencionados debe ser tomado como la solución definitiva a emplear en el futuro. Puede que a medida que la tecnología avance, algunos elementos se afiancen o logren grandes eficiencias, siendo parte final de la solución a gran escala. Pero es un completo error considerar que los sistemas y normas planteados hoy en día hayan alcanzado una cierta madurez.

Las propuestas planteadas y modelizadas en este trabajo pretenden, más allá de plantear posibles caminos para el inicio del camino hacia una mejora de la eficiencia, romper con la creencia de que, modificando ligeramente los valores implementados en el protocolo de la SAE se puede dar con la solución que se busca.

10.2. Conclusiones específicas

- El modelo principal, se considera un modelo robusto y relativamente fiable gracias a las justificaciones mostradas a lo largo de todo el trabajo, y las comparaciones con los datos experimentales en diferentes aspectos. Es un modelo que aun puede ser superado con creces, sobre todo en el aspecto de la optimización del control. Aun así, se construye de una forma muy optimizada en cuanto a la carga computacional y establece una buena base para cualquier ensayo o concretización que se pretenda hacer en un futuro.

Junto a esto, se considera completamente demostrada la necesidad de la implementación del sistema de bypass para sortear el compresor en la fase de igualar presiones. Los resultados que se obtienen son en cualquier caso menos agresivos con los componentes del sistema, el control inicial es mayor, y en lo técnico es tan simple como la adición de una válvula de aislamiento.

- El modelo en cascada se concluye que es intrínsecamente ineficiente, pero tiene ciertas ventajas. Probablemente, tal y como se comenta en el subapartado correspondiente, en caso de optimizar el funcionamiento del compresor para una tasa de compresión concreta (ya que no hay una casuística tan extensa como en los demás modelos) se podría llegar a unas condiciones de

trabajo del compresor lo suficientemente eficientes como para que sea una opción a valorar. De momento, sin la optimización del modelo, no es posible hablar en claro del ahorro que puede suponer frente al modelo principal.

- El modelo de refrigeración cruzada propone una mejora conceptualmente simple: refrigerar el punto más caliente con un flujo que pasa por el más frío; y, si se logra hacer de manera efectiva, se demuestra que es enormemente eficiente. El problema de aplicación de este sistema es la dificultad de lograr refrigerar de manera eficiente un fluido que está quieto en un depósito aislante. Para solucionar eso, basta con implementar de conductos internos en el depósito del coche. Eso directamente complica o limita el rango de aplicación a los fabricantes, en vez de ser una mejora que se pueda implementar sobre las bases ya establecidas.
- El modelo de presurización líquida es una solución considerablemente menos intuitiva que la anterior, que, además, no da resultados tan inmediatamente positivos en el análisis energético. Respecto al aspecto técnico, la inserción del fluido en el depósito es una cuestión a estudiar detenidamente ya que entra en conflicto con varios puntos de la norma, y no es una práctica en absoluto común, por lo que no hay apenas literatura sobre nada parecido.

En cambio, la ventaja que tiene la implementación de este método, el hecho de “convertir” el gasto del precooler, en gasto del compresor, puede ser enormemente beneficioso en algunos casos. De cualquier manera, no parece una opción para aplicar por si sola, sino que puede ser un concepto que se aproveche para complementar otros métodos.

- El modelo completo además de tener las ventajas de los dos anteriores, y le permiten eliminar el intercambiador de calor principal, también toma las complicaciones técnicas. Los resultados son prometedores y se demuestra con cálculos que, por un lado, es posible bajar el gasto energético del sistema más utilizado hoy en día. Además se rompe con el esquema de la planta, pudiendo quitar una de las partes, que, por el momento se considera fundamental.

11. Propuestas de cara al futuro

11.0.1. Aproximación empírica

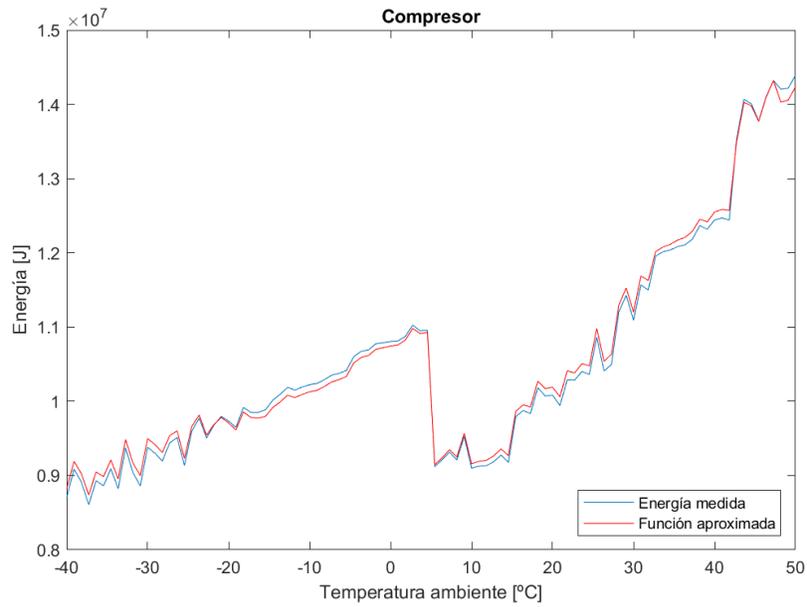
Analizando el barrido de temperaturas para una presión constante se ha visto la posibilidad de aproximar la energía consumida tanto en el compresor como en el intercambiador de calor con una función que toma la siguiente forma:

$$E = (AT_{amb} - B) SOC^C \quad (32)$$

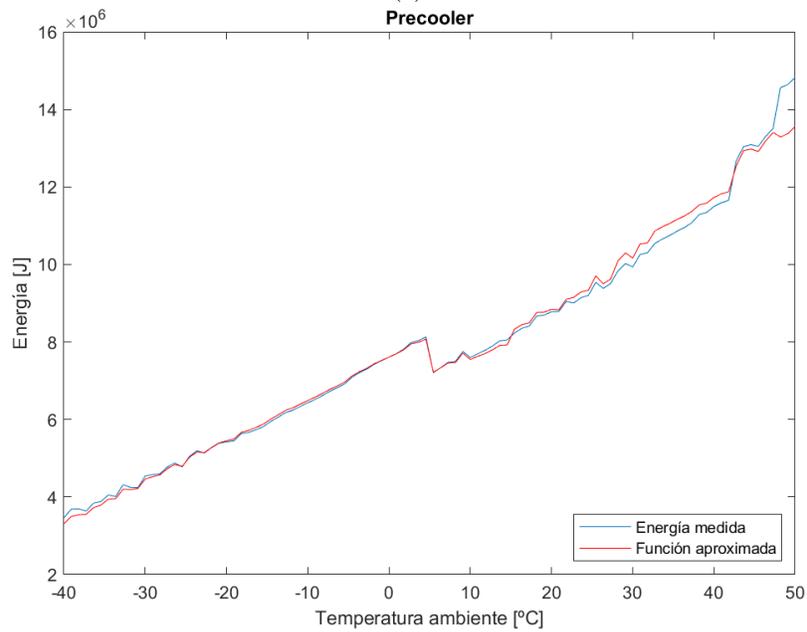
La aproximación de la energía consumida se muestra en la Figura 52, donde se muestran las energías del compresor y del precooler en un ciclo donde la presión inicial del vehículo es 0.5 MPa, y el barrido de temperatura ambiente se realiza en todo el espectro que amparan las normas actuales. Los valores con los que se ajustan los coeficientes se muestran en la Tabla 10.

Tabla 10: Valores de los coeficientes A, B y C a presión inicial de 0.5 MPa

	A	B	C
Compresor	0.196	15.14	2.78
Precooler	21.59	4392	1.89



(a)



(b)

Figura 52: Energías consumidas frente a las predichas por la Ecuación 32 en el compresor (a) y en el precooler (b), en el modelo principal para una presión inicial del vehículo de 0.5 MPa.

De cara al futuro es interesante observar si la validez de la Ecuación 32 se puede extrapolar

a otros modelos más complejos y a un rango de presiones más amplio, ya que permite tener una visión de cómo influyen el volumen que se reposta en un vehículo y la temperatura ambiente. Se considera de especial importancia el coeficiente C , por un lado, porque afecta a los demás coeficientes, haciendo que su interpretación esté influenciada por este, y por otro lado porque relaciona directamente la energía con el grado de llenado, por lo que podría tener bastante potencial intentar buscar procesos con coeficientes bajos para que la tasa de aumento de la energía respecto a la del SOC, sea la menor posible.

Otros planteamientos que se podrían plantear con los datos mencionados pueden ser cual es la presión inicial recomendada para cada temperatura ambiente, o incluso planteamientos más complejos como si podría o no ser rentable refrigerar el ciclo entero para obtener una temperatura ambiente controlada que maximice el rendimiento interno del ciclo, entre otras posibles.

11.0.2. Presurización flash

Se ha denominado como presurización flash al concepto de presurizar a tasas mucho mayores que las utilizadas hoy en día. Realizar este tipo de presurización mediante el uso de un compresor tradicional es infinitamente ineficiente, pero el uso combinado de la presurización líquida y un pistón actuado a modo de compresor, podría dar resultados especialmente rápidos sin aumentar drásticamente el coste energético.

La barrera que hay que romper, aparte de la del flujo máximo situado en 0.06 kg/s, es la de la temperatura máxima permitida para el hidrógeno. Si se presuriza una primera parte mediante el pistón, y después se rellena lo que falta con hidrógeno refrigerado mediante el compresor, o un tanque precargado a alta presión, se puede conseguir una temperatura final que no supere los estándares actuales. La diferencia reside en que, en el paso intermedio de presurización repentina, una parte de la masa de hidrógeno alcanza temperaturas muy altas. Aun así, si el flujo que entra inmediatamente después de ese golpe, la temperatura vuelve a caer bruscamente sin haber transferido apenas calor a las paredes del depósito.

11.0.3. Diseño detallado del compresor

En una fase intermedia del desarrollo de los modelos actuales se ha iniciado el desarrollo de un compresor de diafragma con un funcionamiento mucho más detallado. Dicho modelo simula cada una de las subidas y bajadas del pistón de manera que es posible colocar varios de estos modelos en serie o paralelo, para simular las diferentes etapas o cantidad de cilindros por etapa del compresor. Además de eso, se pueden iniciar los cilindros con una fase diferente cada uno, para ver los efectos en los resultados. El esquema de Simulink se muestra en la Figura 53.

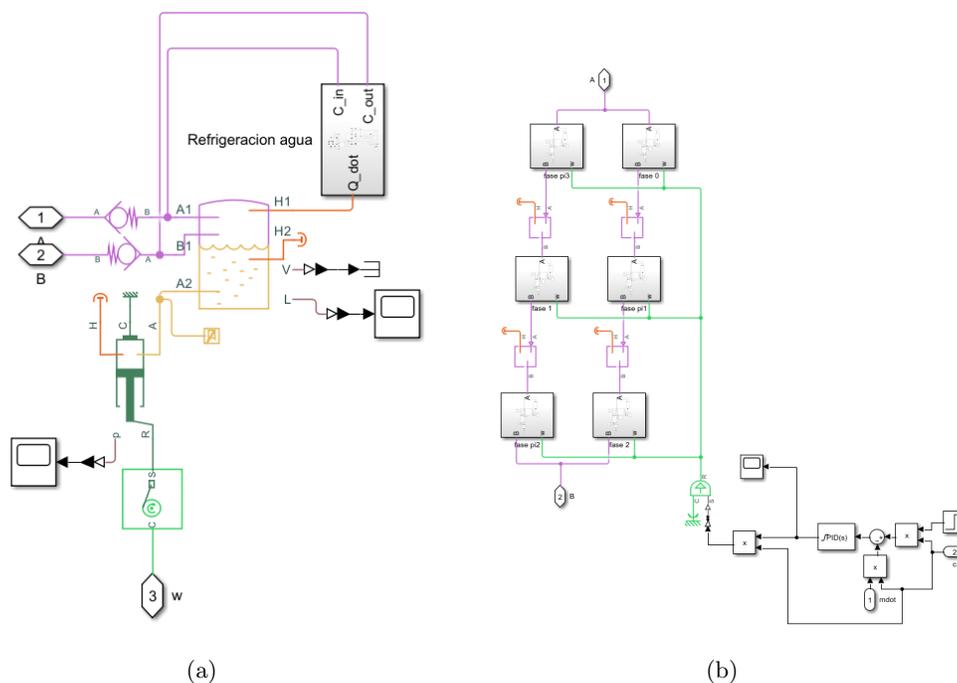


Figura 53: configuración detallada del compresor. a) Esquema de la modelización de un cilindro de un compresor de diafragma. b) Configuración de la propuesta de un compresor de diafragma de 3 etapas y 2 cilindros por etapa.

Se contempla como propuesta en un futuro la finalización y optimización del modelo de compresor. Hay dos razones para ello: la primera es que el bloque predeterminado se considera demasiado simple. La otra es que una vez desarrollado, puede implementarse en modelos más avanzados, y se pueden obtener conclusiones más precisas sobre el funcionamiento interno.

11.0.4. Sistema de implementación de la refrigeración en el depósito en el modelo de refrigeración cruzada

Con esta línea se pretende refinar la propuesta de la refrigeración cruzada. Se ve especialmente interesante analizar en profundidad el sistema de refrigeración del depósito de hidrógeno en el vehículo. Para ello, se plantea una idea principal, que consiste básicamente en modificar el denominado BOSS del depósito para lograr unas cavidades internas por donde podría fluir el líquido refrigerante.

En la Figura 9 se ve cómo el BOSS se compone de dos partes, una a cada lado del depósito. En principio se plantean como partes inconexas, pero en este planteamiento se propone estudiar la posibilidad de unir ambos extremos mediante tubos rectos o serpentines para conseguir una transferencia de calor, a la vez que se aporta resistencia mecánica.

Para este estudio, es imprescindible el uso de algún software de elementos finitos que pueda simular en última instancia los efectos fluido-mecánicos y térmicos. Así se podría determinar, si es

posible y rentable hacerlo con los materiales actuales, cual es la geometría más indicada en las partes de unión y, por último, qué rango de temperaturas es el más indicado para desempeñar esta función. Esas temperaturas se pueden variar modificando el tamaño y número de los tanques de baja presión. Cuanto más pequeños sean, menor es la cota mínima de presión a la que se llega en estos tanques, provocando la necesidad de aplicar más trabajo en el compresor, pero reduciendo la temperatura a la que se llega.

A. Anexo I: Conceptualización de la máquina de estados

Una máquina 6-tupla, también conocida como máquina de Turing de 6-tupla, se refiere a una máquina de Turing que está completamente definida por seis componentes o elementos. Una máquina de Turing es un modelo teórico de computación propuesto por Alan Turing en la década de 1930. La 6-tupla especifica todos los detalles necesarios para describir el comportamiento de la máquina en un momento dado.

Los seis elementos de una máquina de Turing de 6-tupla son los siguientes:

- Conjunto de Estados (Q): Es un conjunto finito de estados que la máquina puede tener.
- Alfabeto de Entrada (Σ): Es un conjunto finito de símbolos que pueden ser escritos en la cinta de entrada.
- Alfabeto de Cinta (Γ): Es un conjunto finito de símbolos que pueden ser escritos en la cinta, incluyendo el conjunto de símbolos de entrada y algunos símbolos especiales.
- Función de Transición (δ): Es una función que especifica cómo la máquina se comporta en cada paso. La función de transición toma como entrada el estado actual y el símbolo bajo la cabeza de lectura/escritura, y produce una acción que incluye escribir un nuevo símbolo, mover la cabeza a la izquierda o derecha, y cambiar de estado.
- Estado Inicial (q_0): Es el estado en el que la máquina comienza su ejecución.
- Conjunto de Estados de Aceptación (F) y Estados de Rechazo (R): Son conjuntos de estados que indican si la máquina debe aceptar o rechazar la entrada después de completar su ejecución.

Con estos seis elementos, se puede describir completamente el comportamiento de una máquina de Turing en cualquier punto dado de su ejecución. Cada transición de estado está determinada por la función de transición, y la máquina opera sobre la cinta de acuerdo con las reglas especificadas. Este modelo teórico es fundamental para entender la teoría de la computación y es la base de muchos conceptos en informática y ciencias de la computación.

B. Anexo II: Datos termodinámicos empleados para el H_2

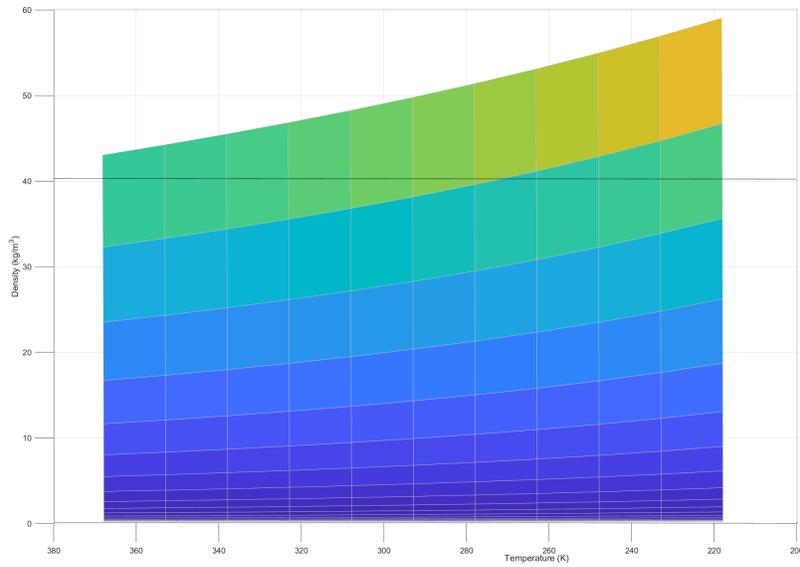


Figura 54

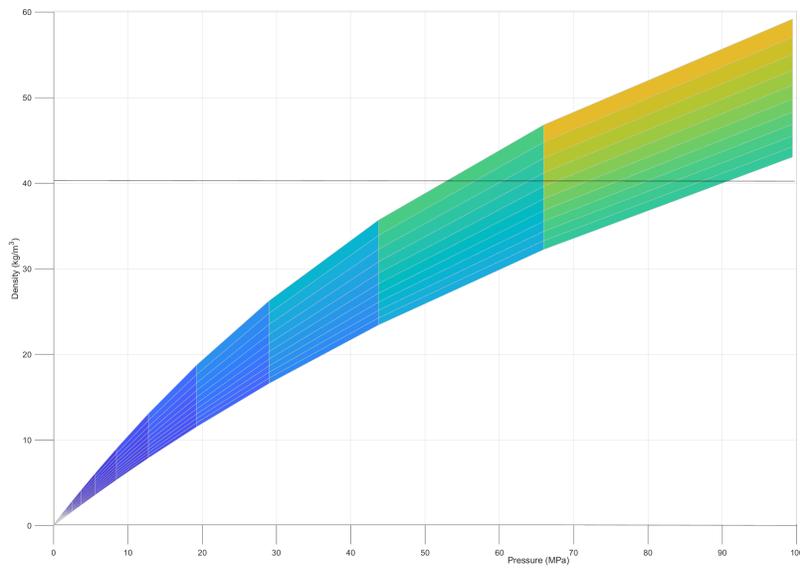


Figura 55

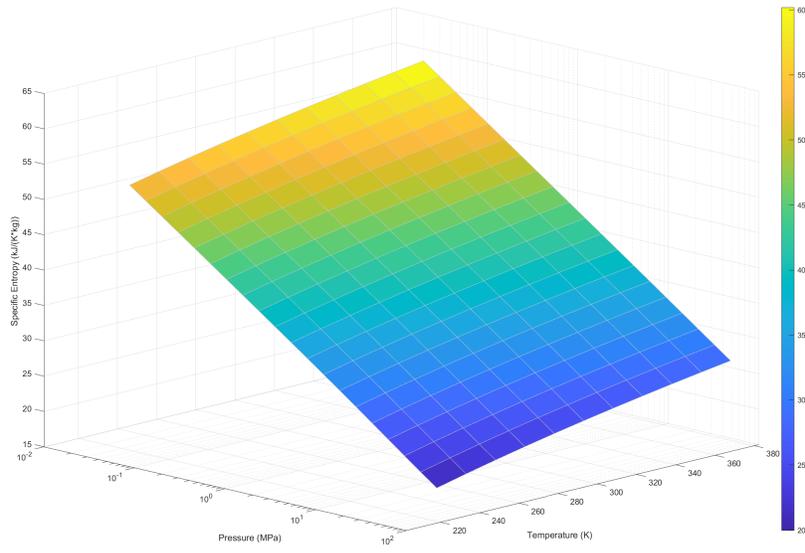


Figura 56

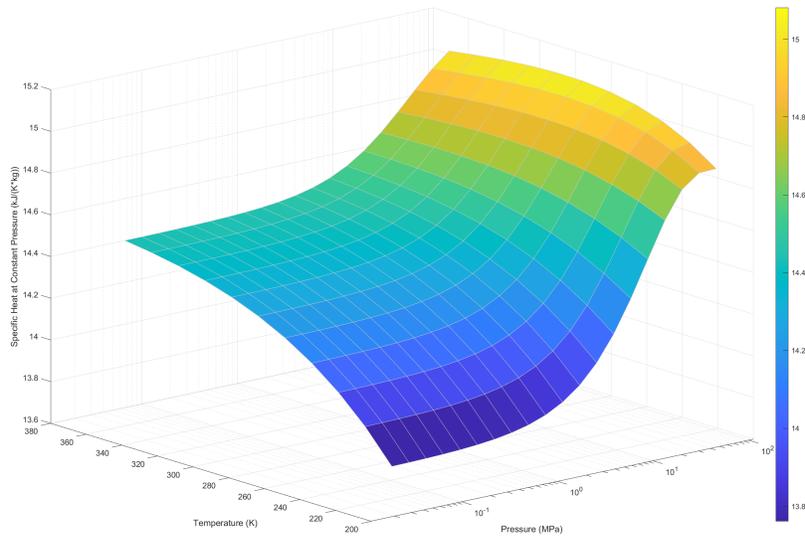


Figura 57

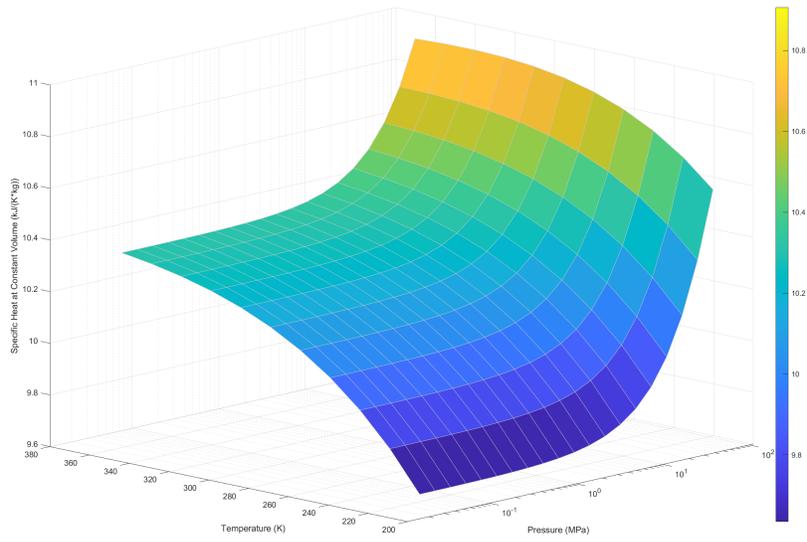


Figura 58

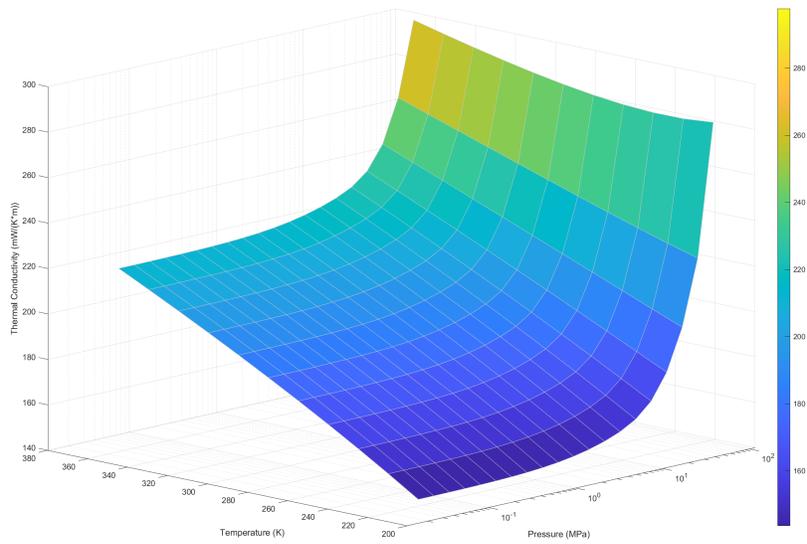


Figura 59

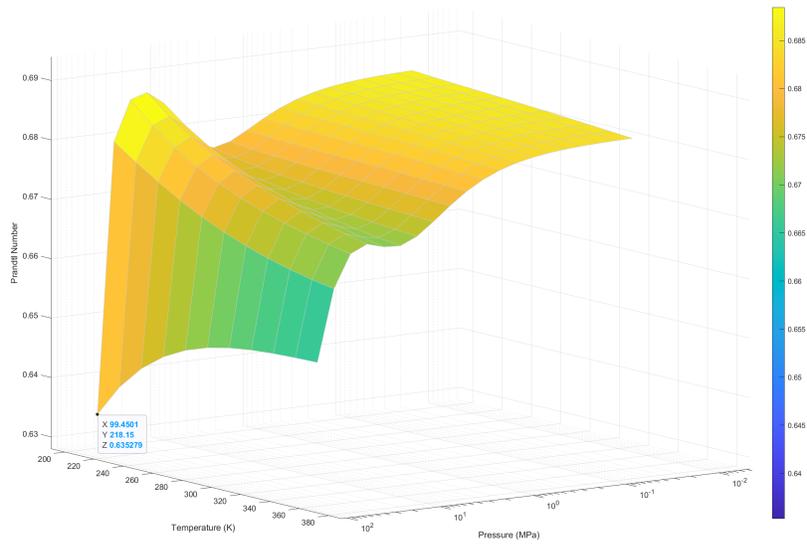


Figura 60

C. Anexo III: Presión y temperatura del gas en las diferentes etapas del compresor y las válvulas

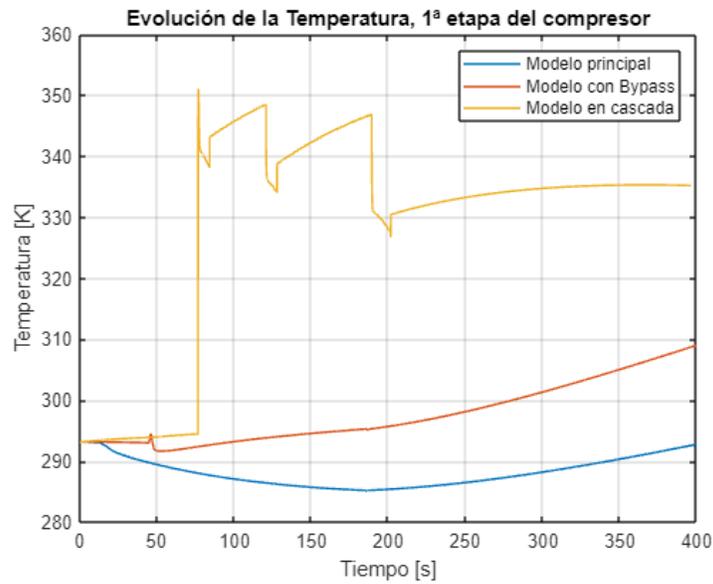


Figura 61

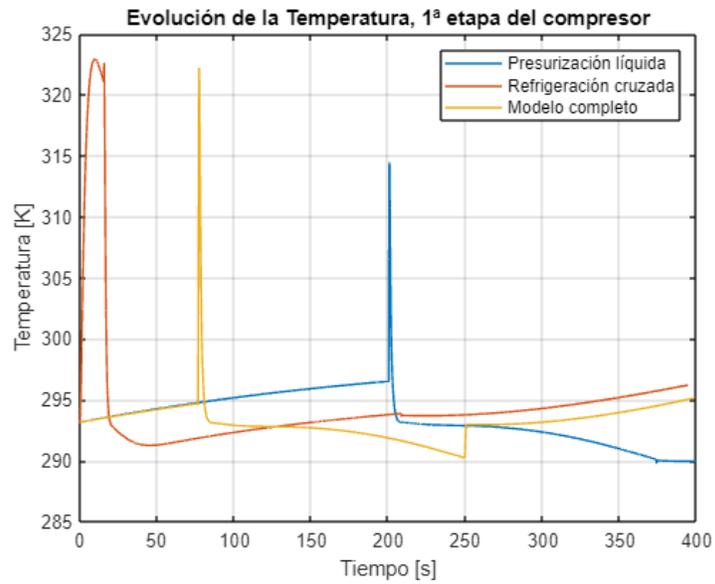


Figura 62

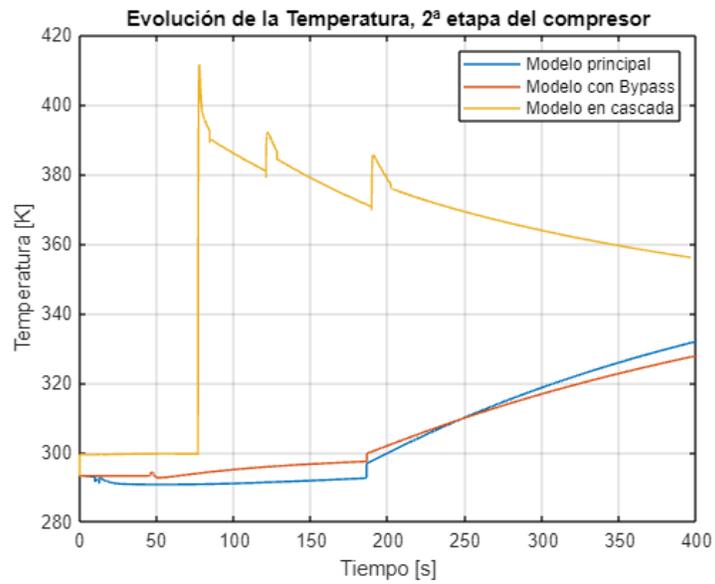


Figura 63

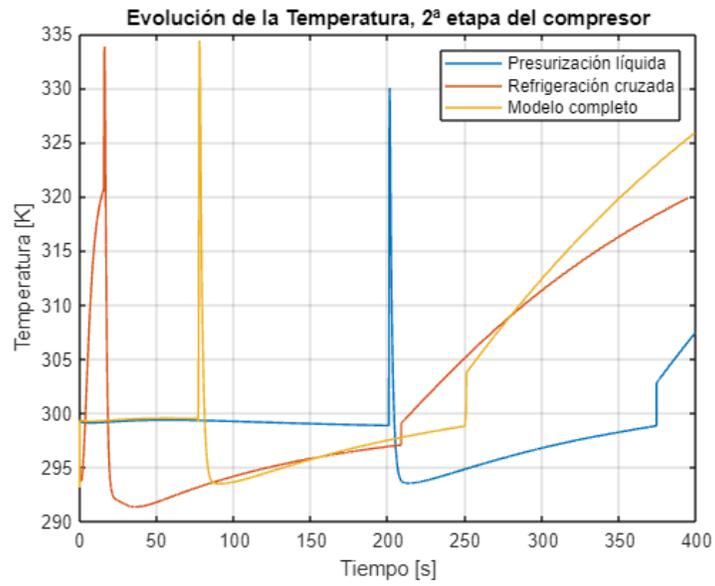


Figura 64

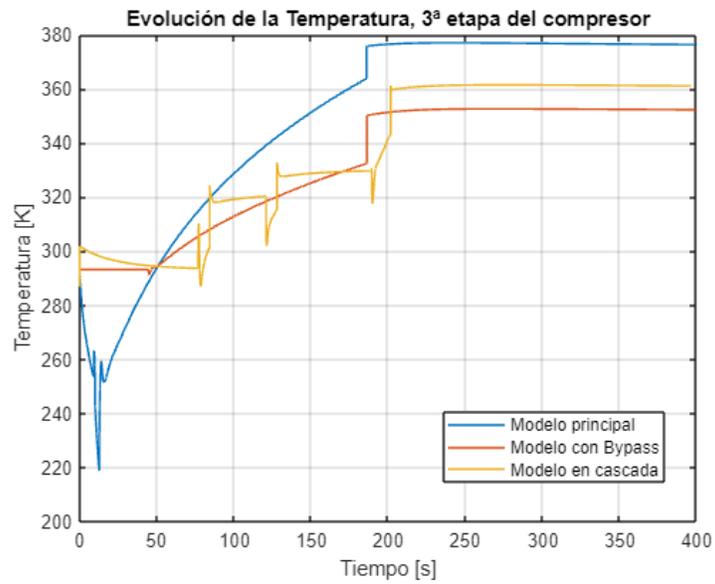


Figura 65

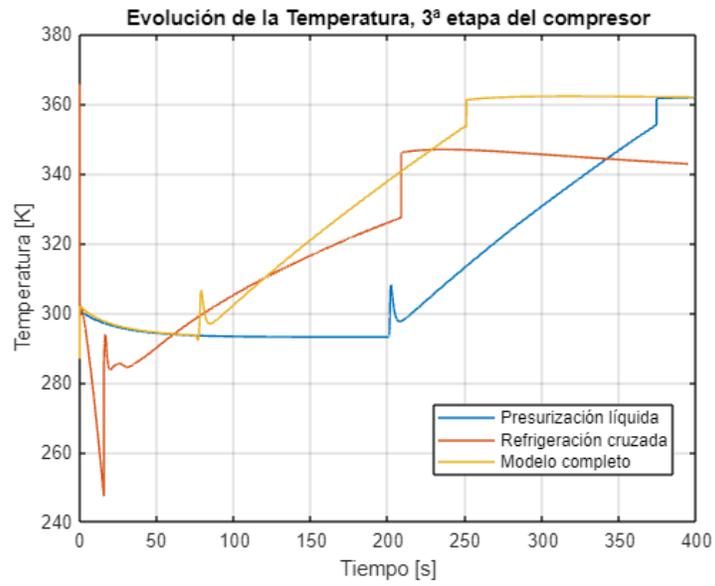


Figura 66

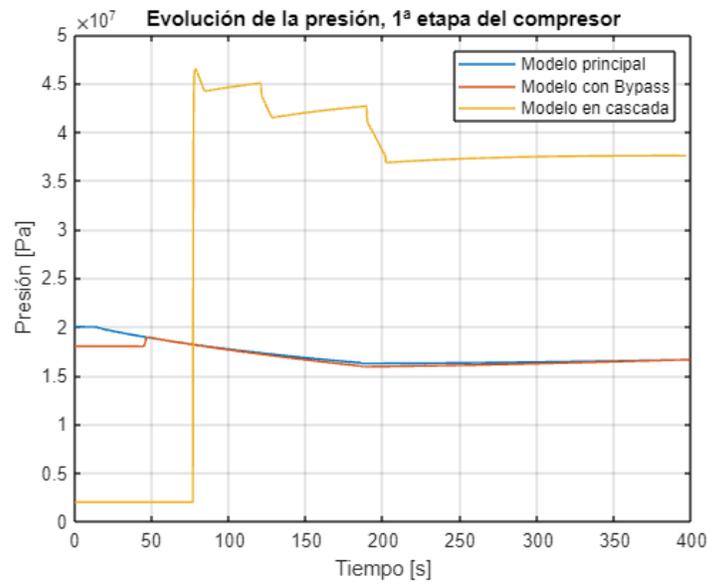


Figura 67

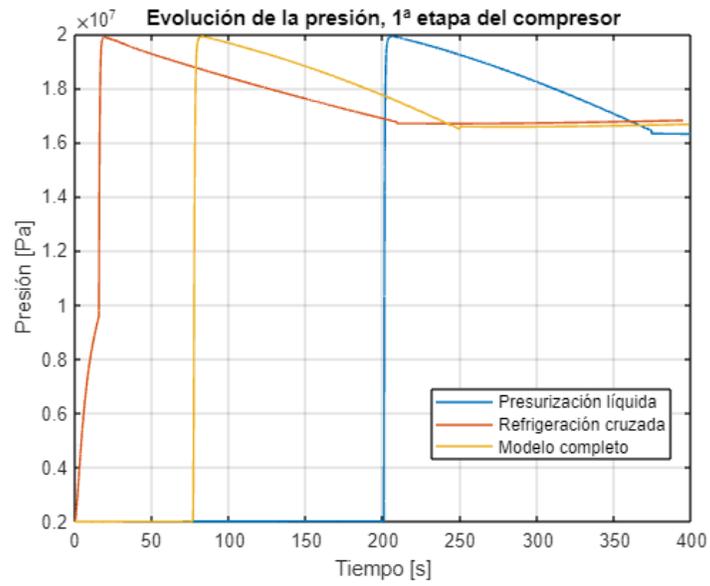


Figura 68

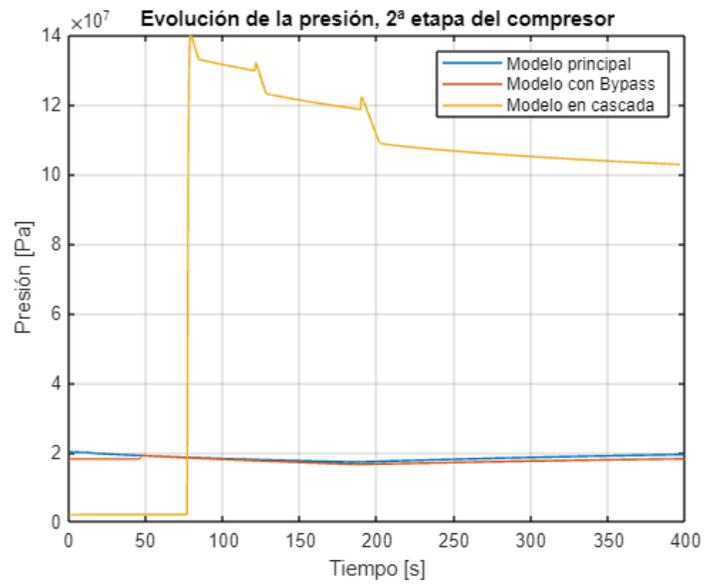


Figura 69

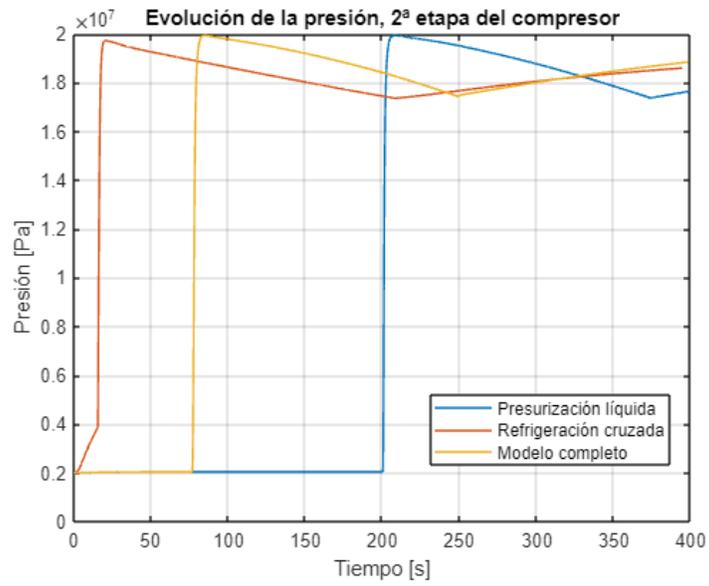


Figura 70

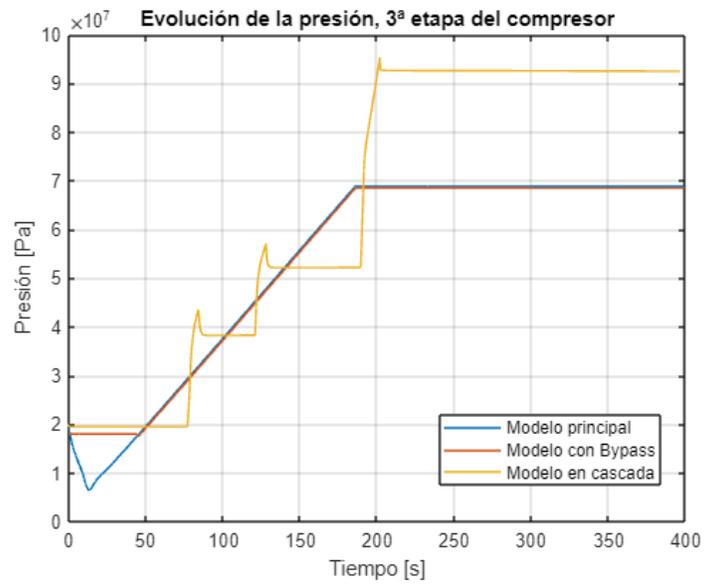


Figura 71

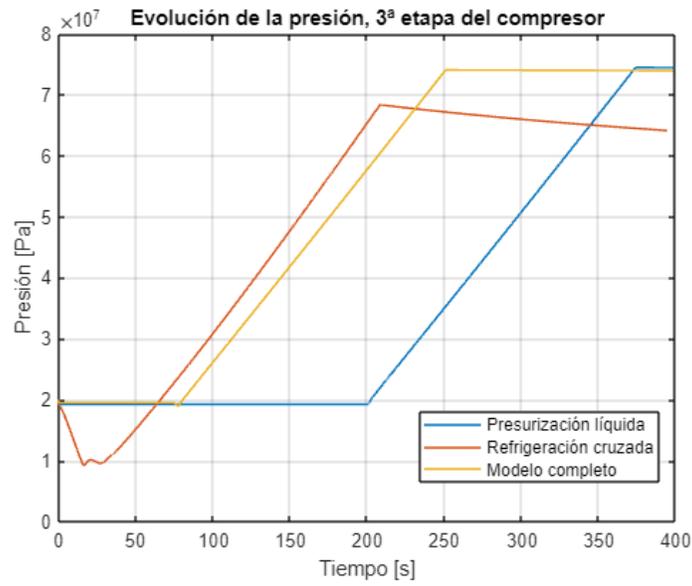


Figura 72

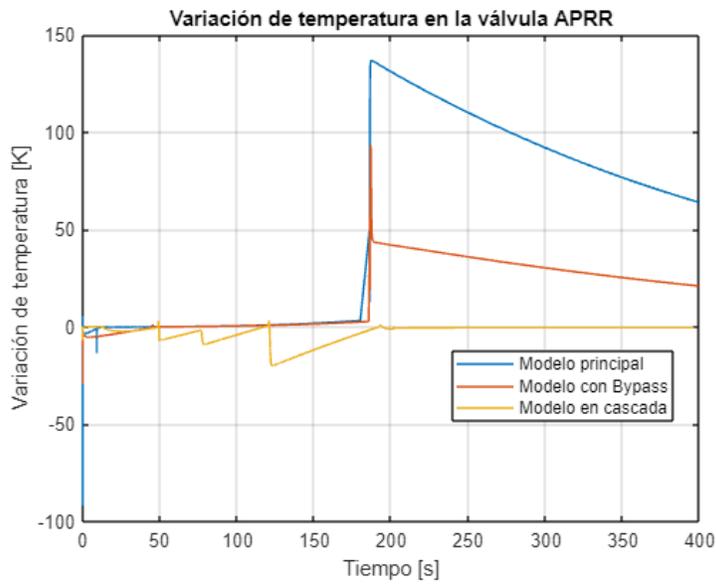


Figura 73

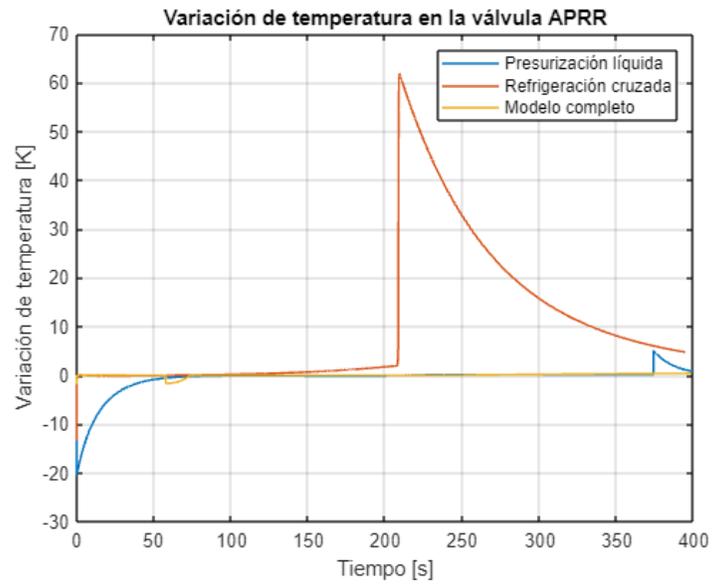


Figura 74

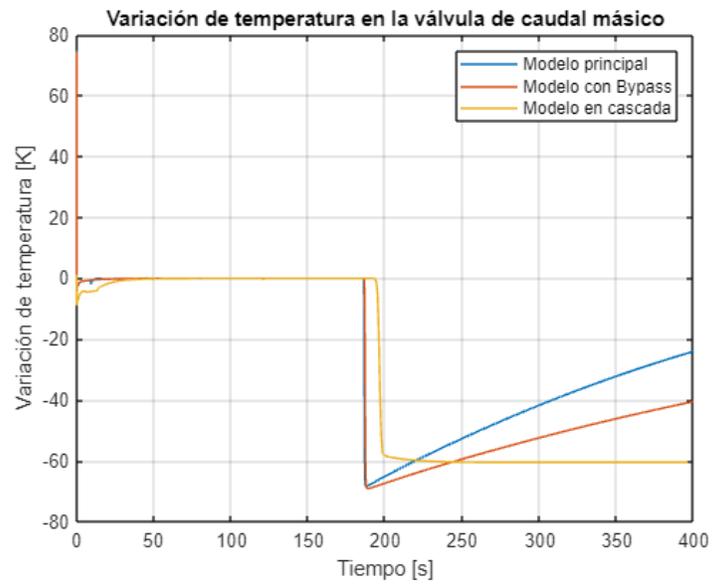


Figura 75

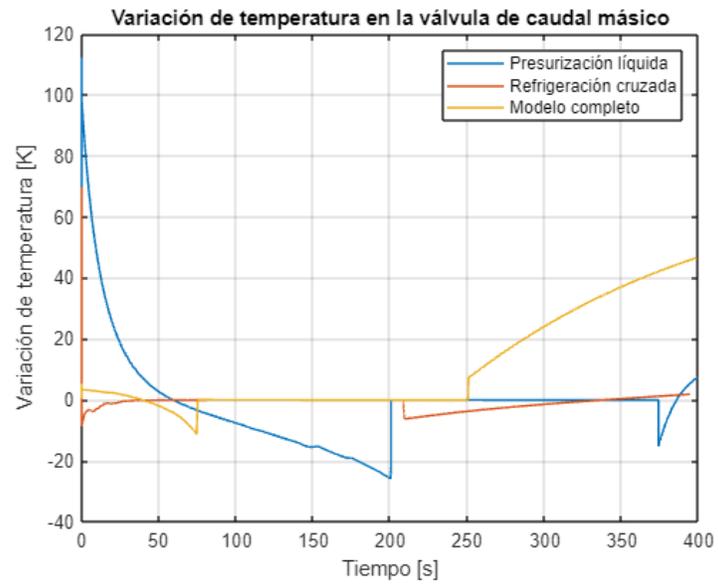


Figura 76

D. Anexo IV: Coste energético, SOC y tiempo de repostaje calculado para todo el rango de condiciones iniciales

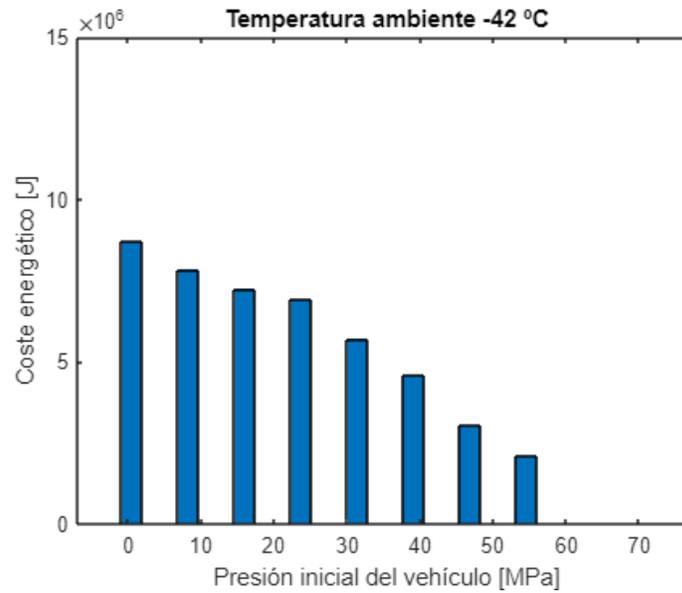


Figura 77

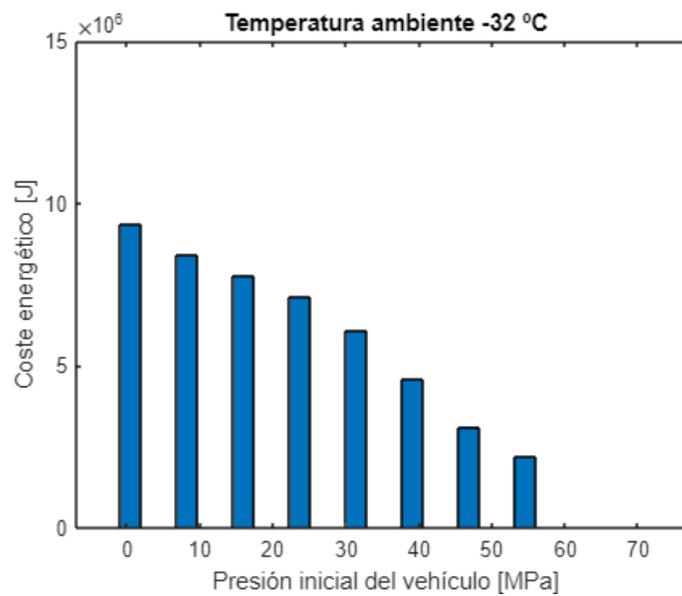


Figura 78

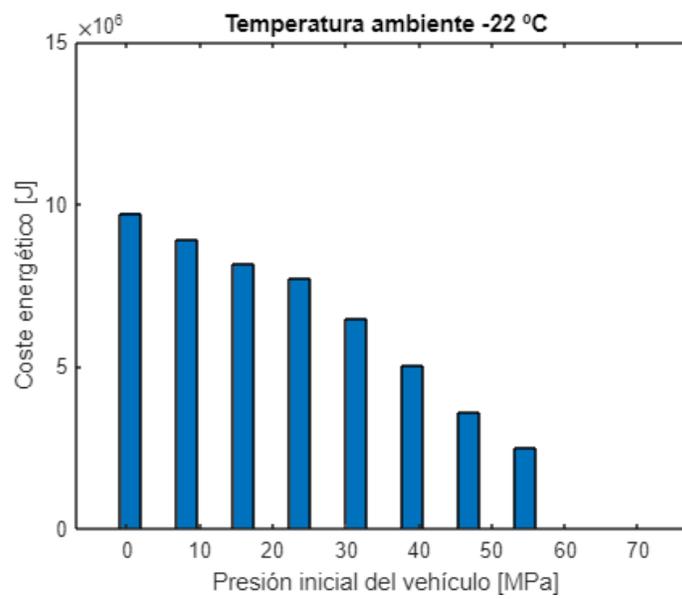


Figura 79

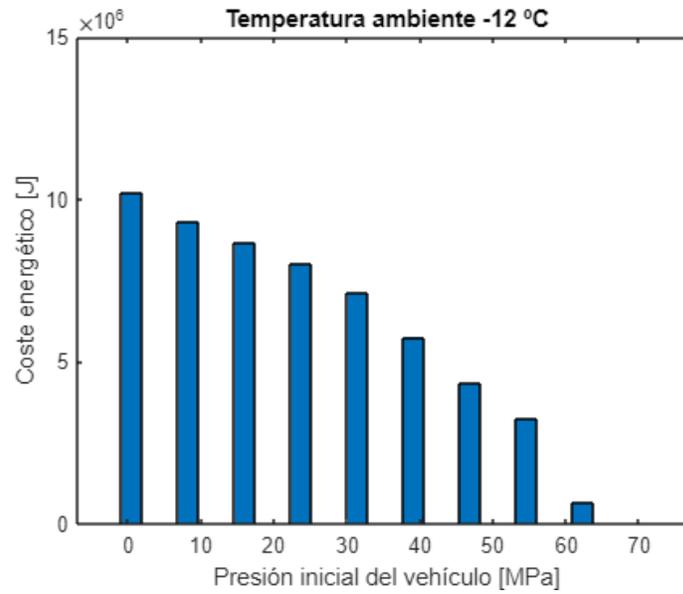


Figura 80

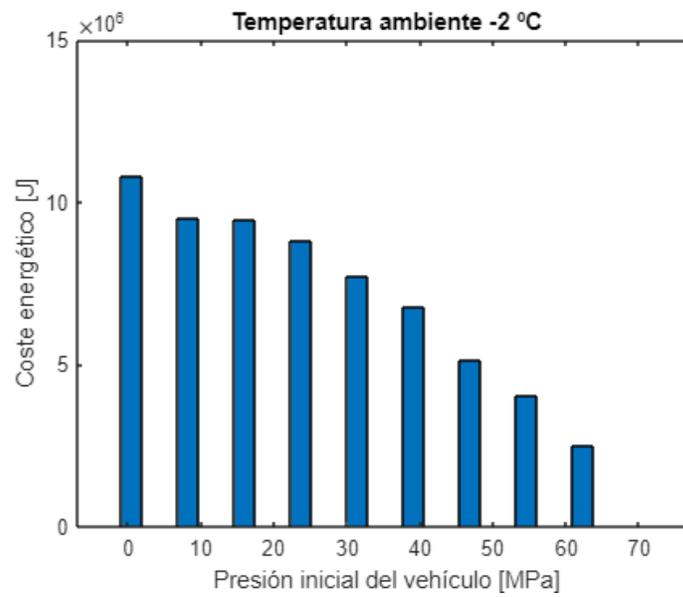


Figura 81

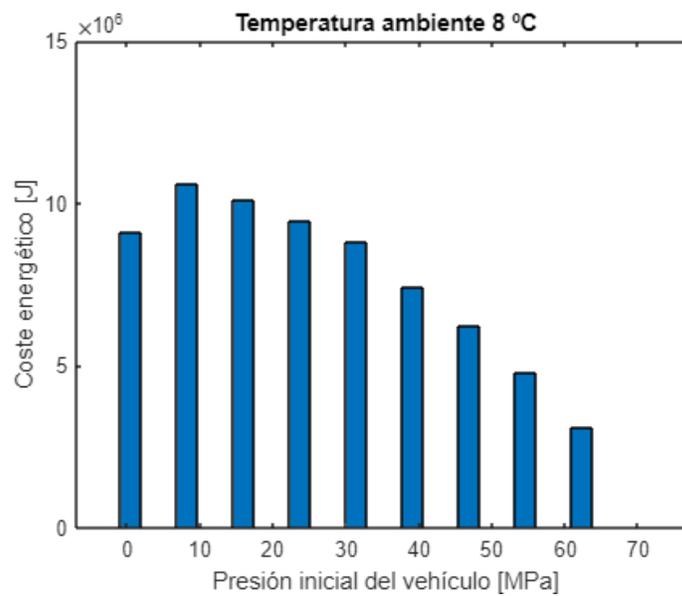


Figura 82

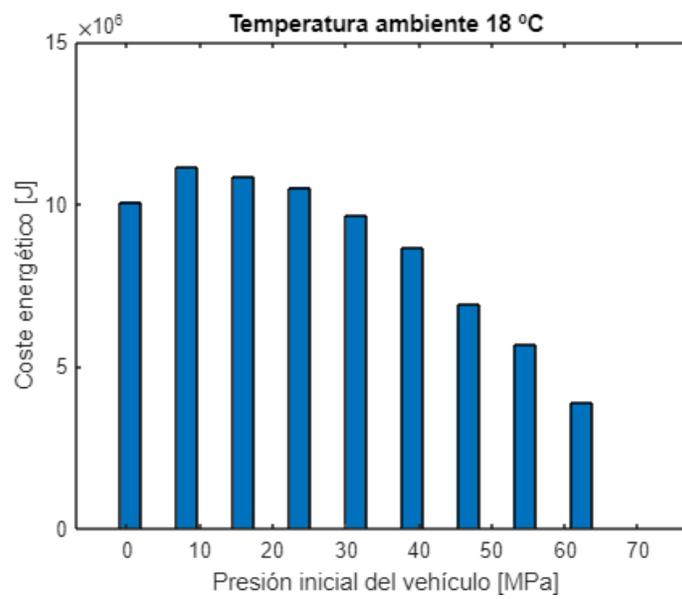


Figura 83

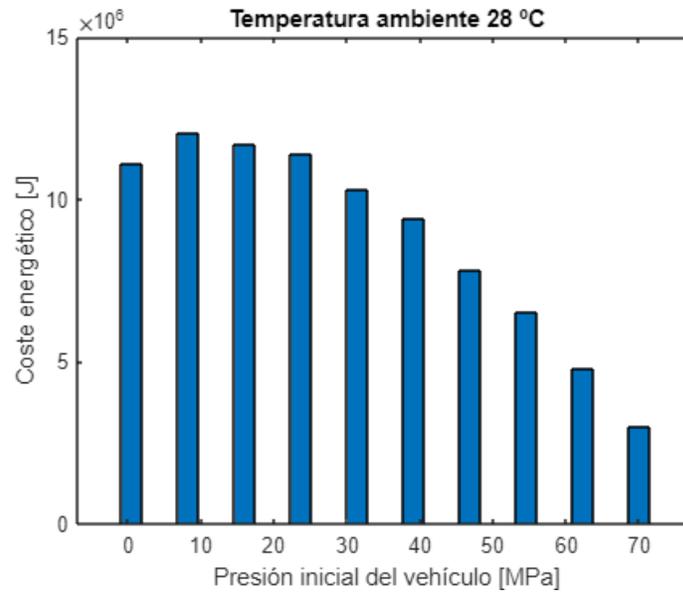


Figura 84

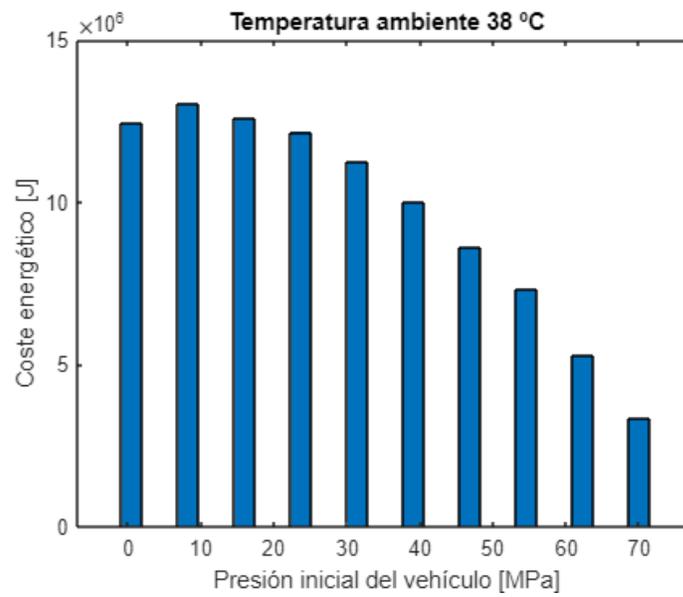


Figura 85

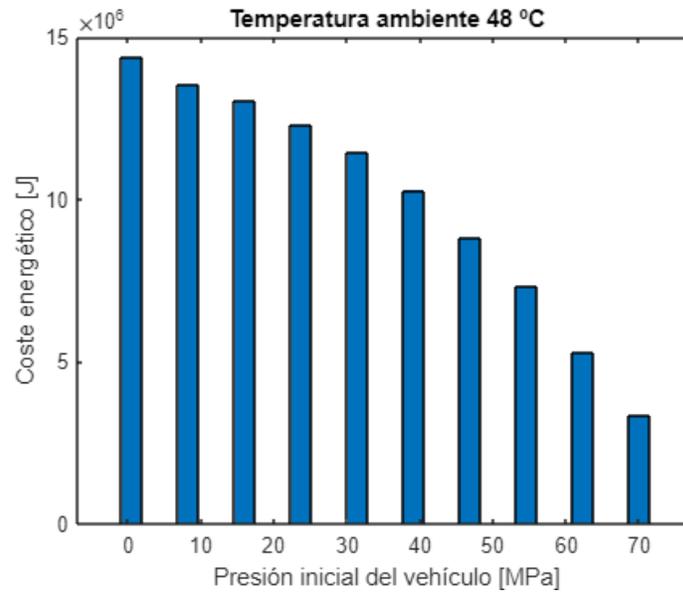


Figura 86

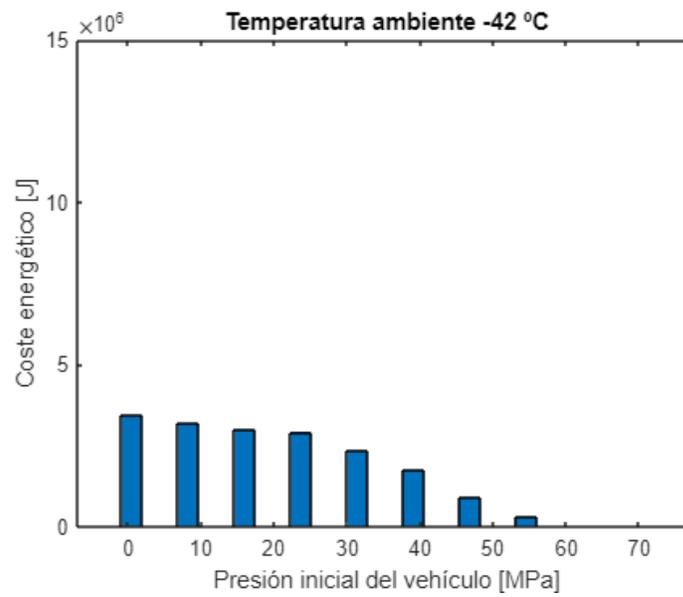


Figura 87

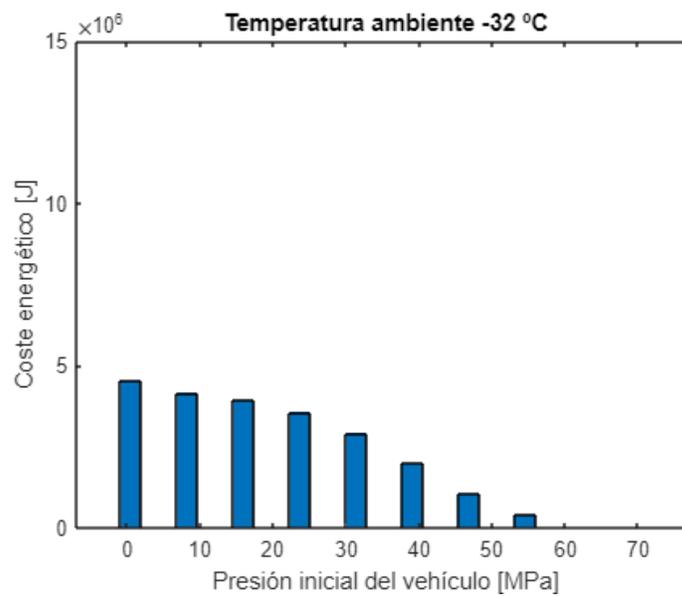


Figura 88

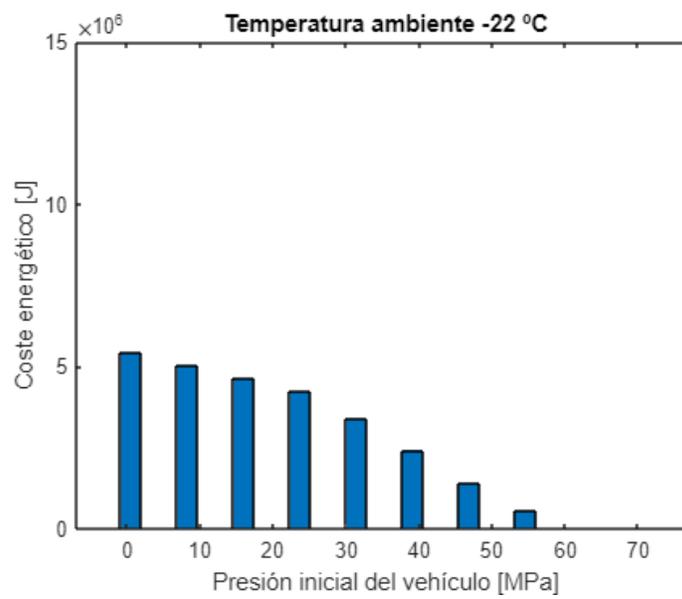


Figura 89

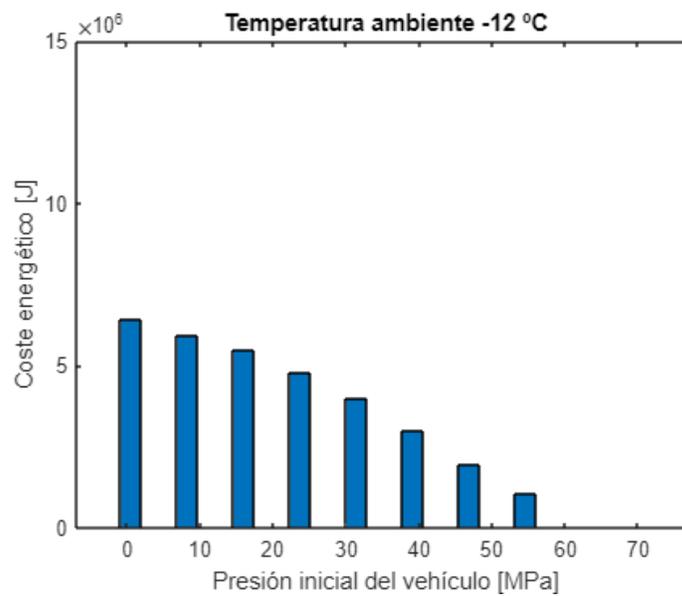


Figura 90

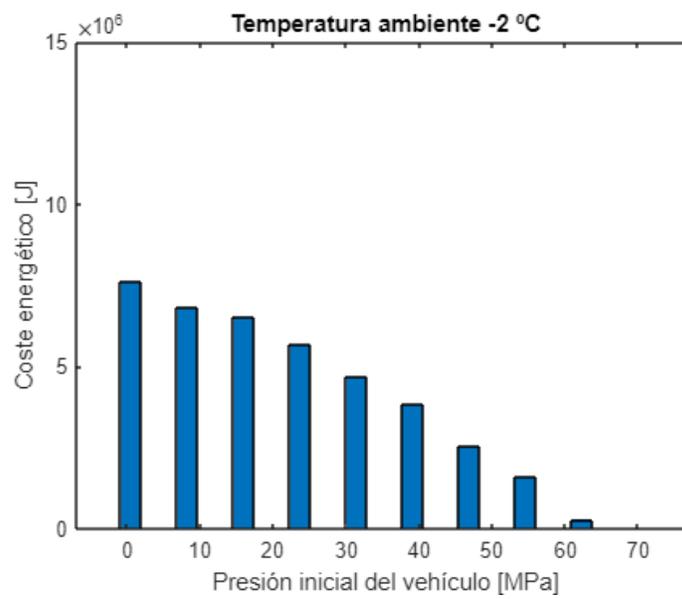


Figura 91

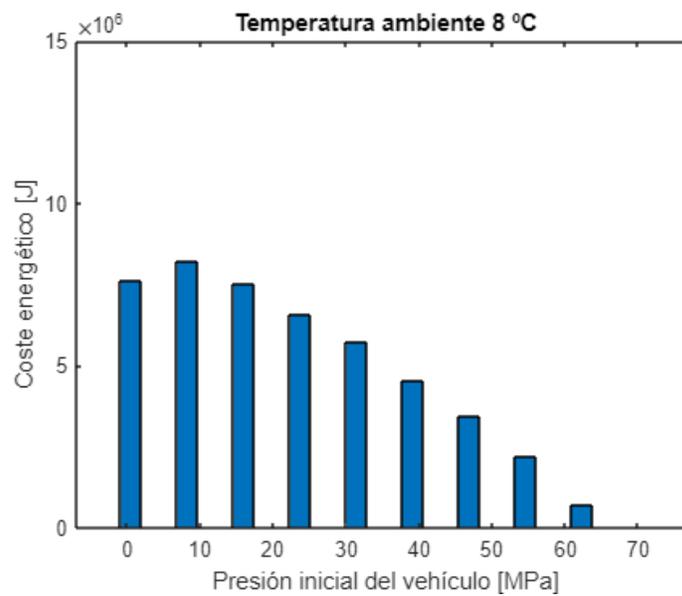


Figura 92

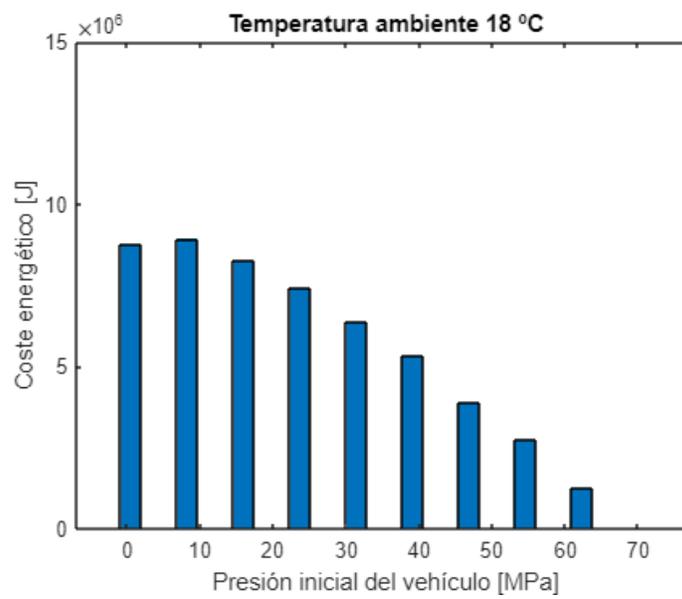


Figura 93

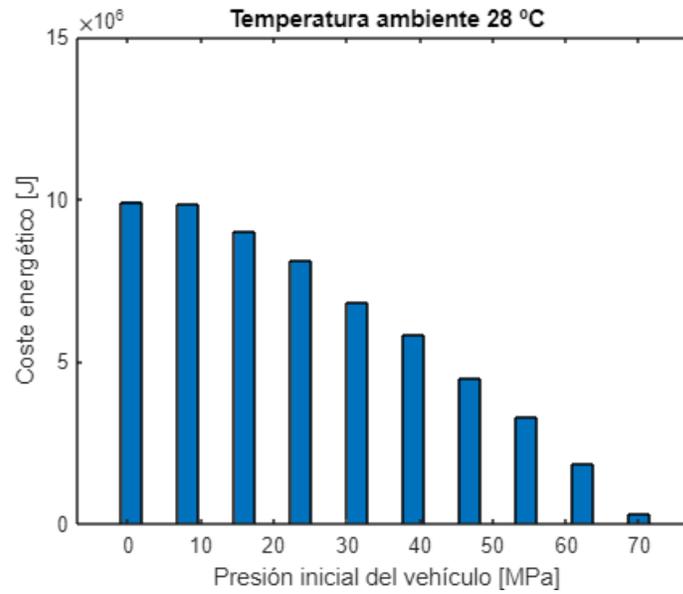


Figura 94

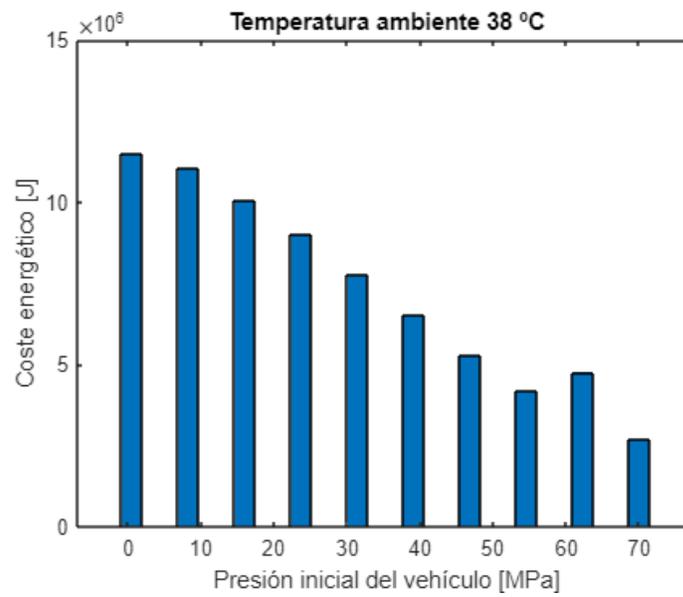


Figura 95

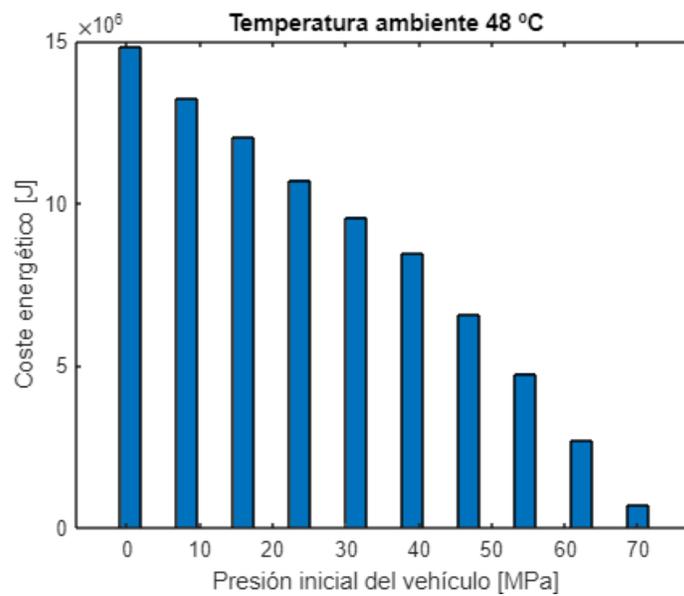


Figura 96

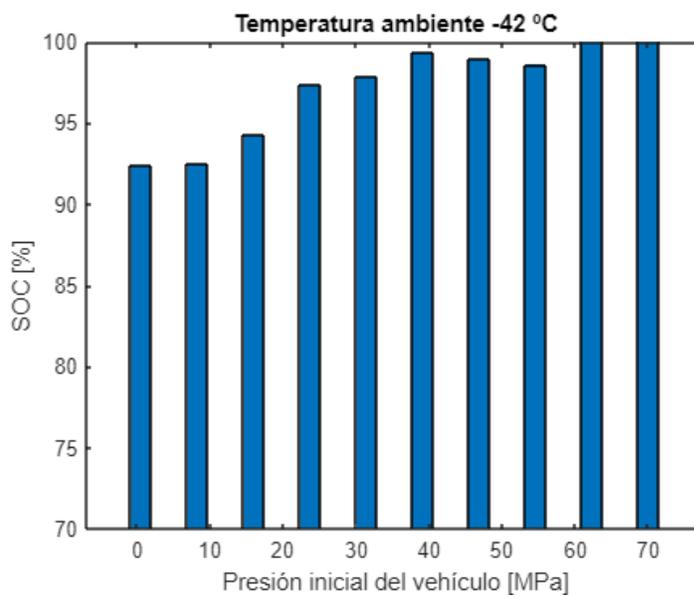


Figura 97

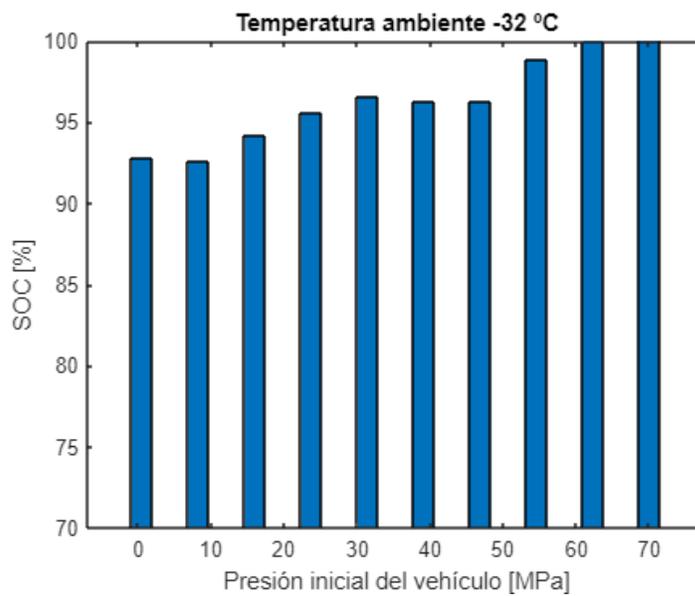


Figura 98

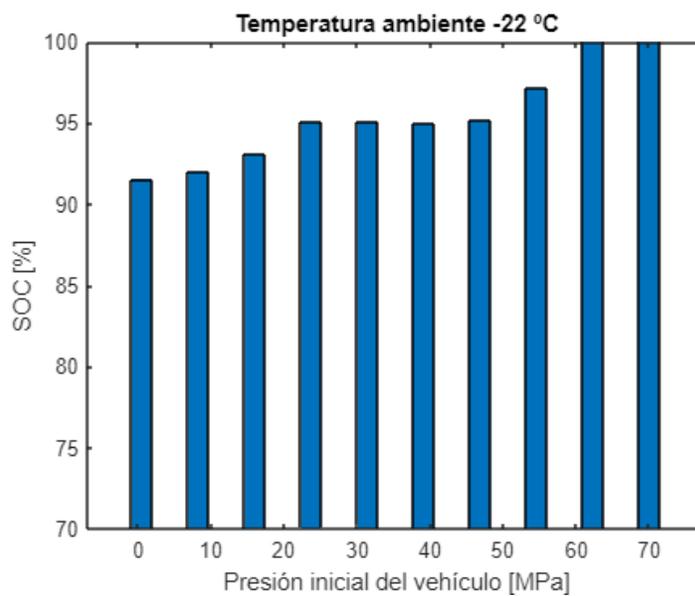


Figura 99

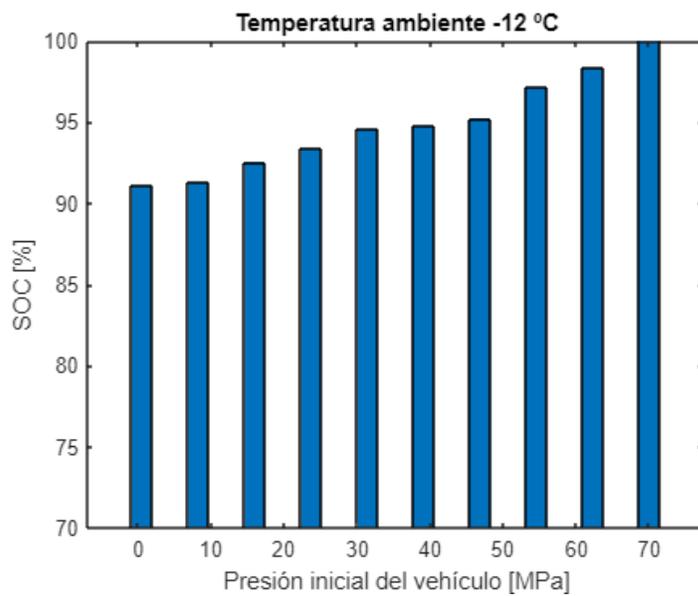


Figura 100

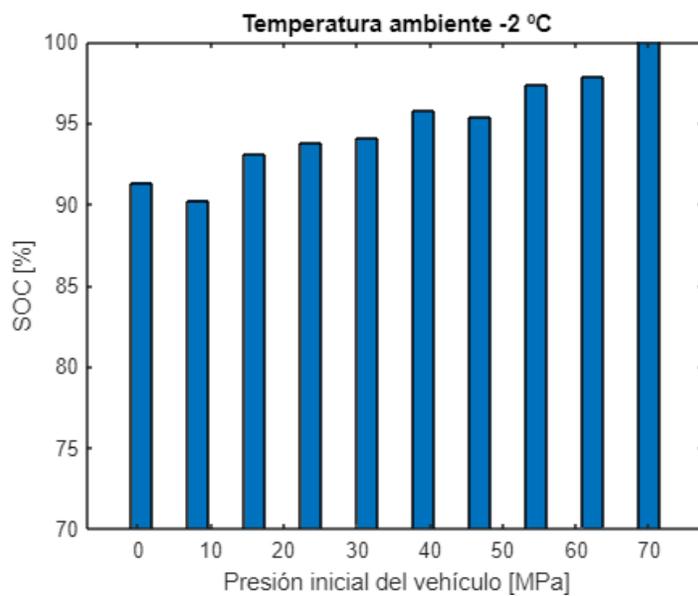


Figura 101

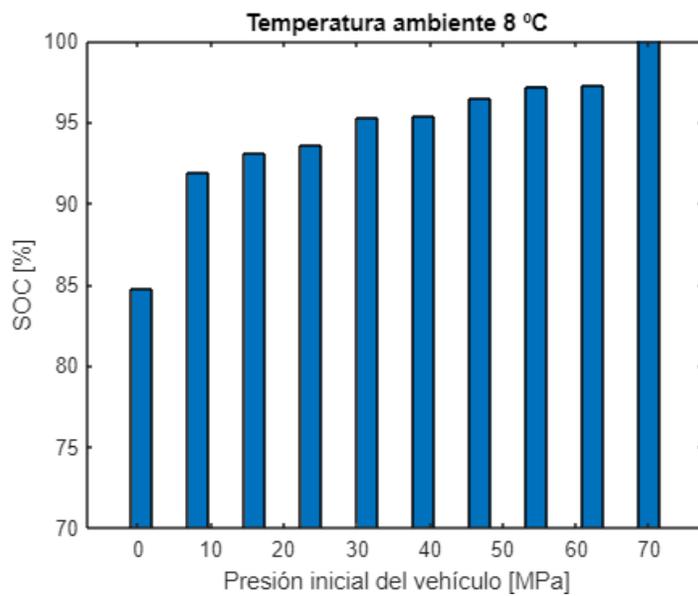


Figura 102

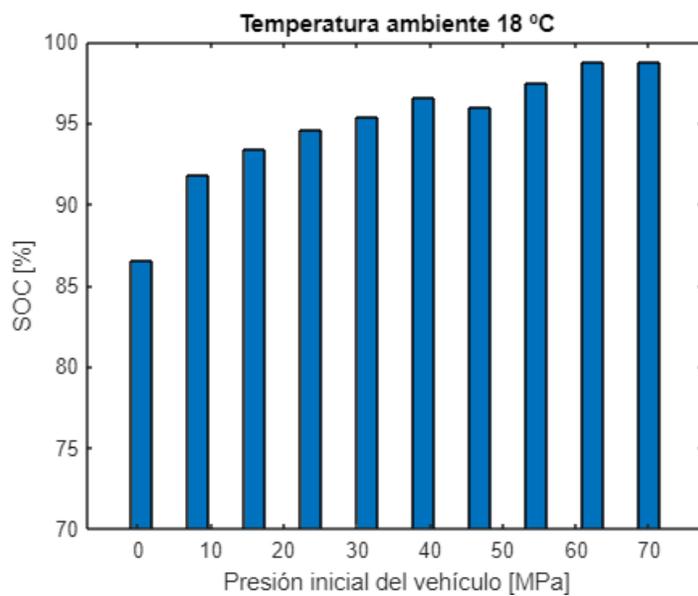


Figura 103

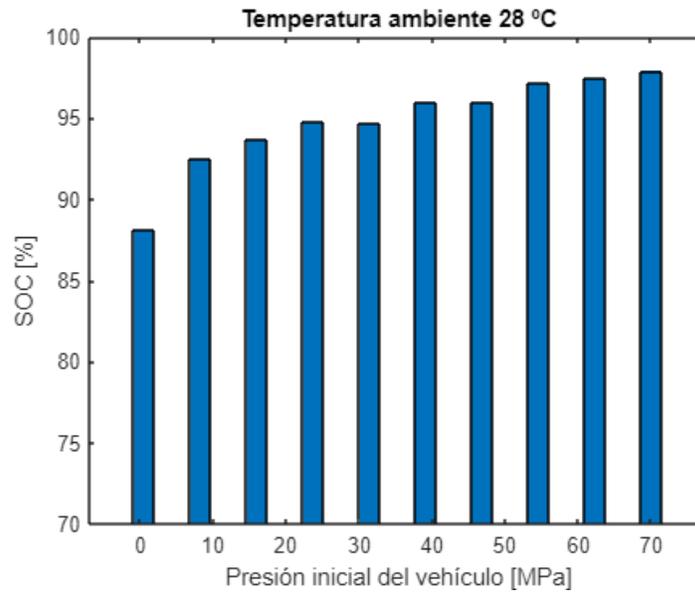


Figura 104

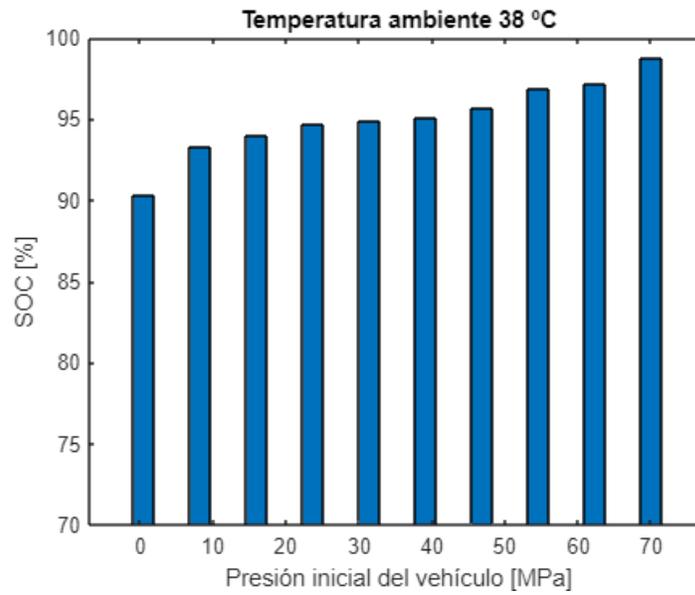


Figura 105

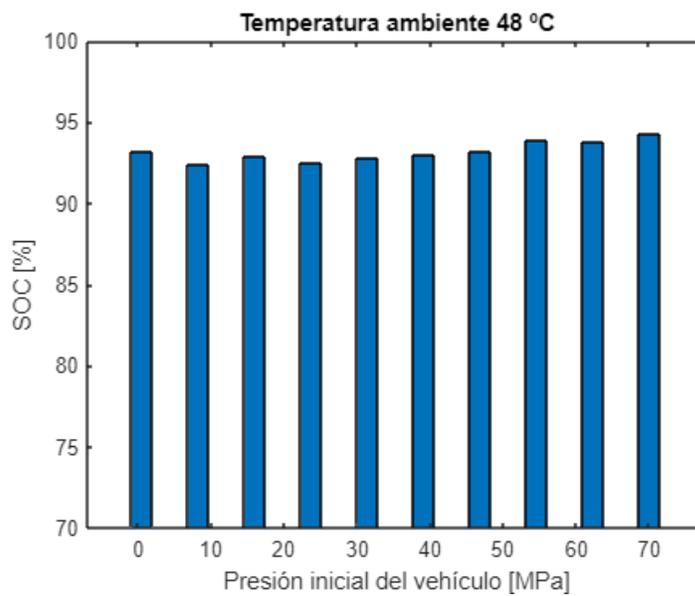


Figura 106

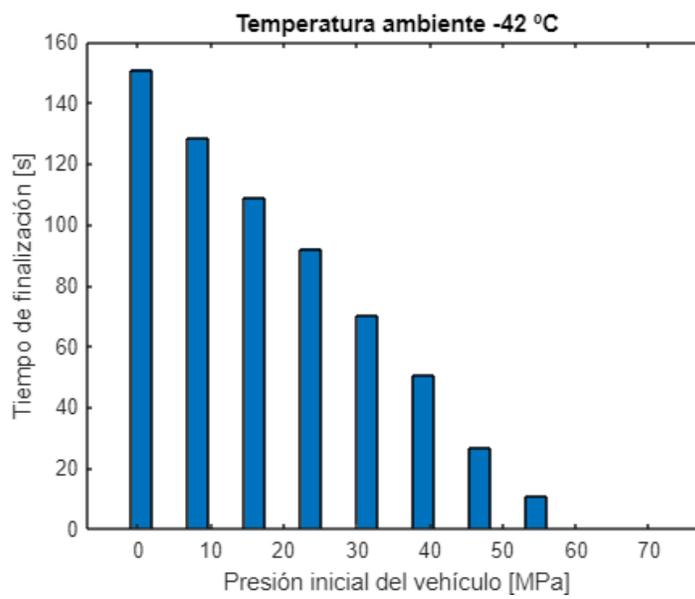


Figura 107

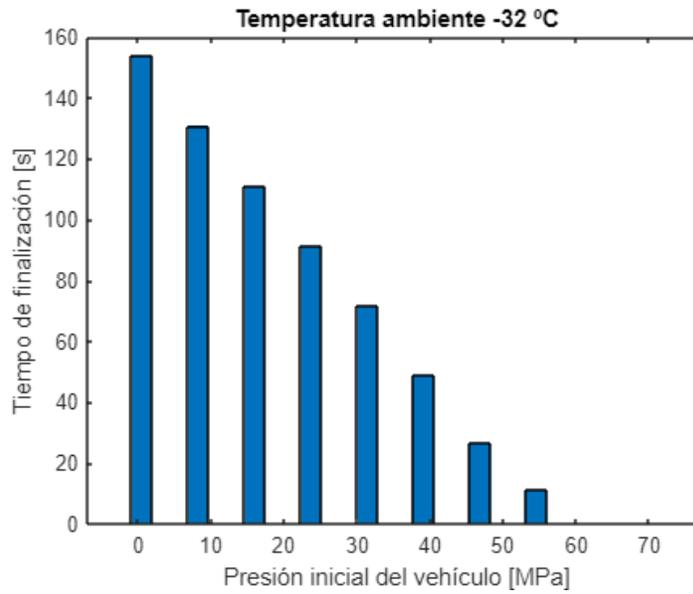


Figura 108

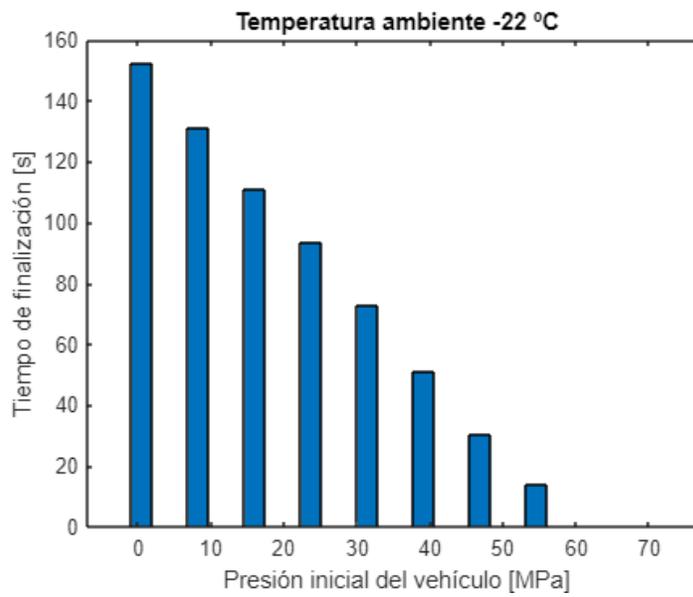


Figura 109

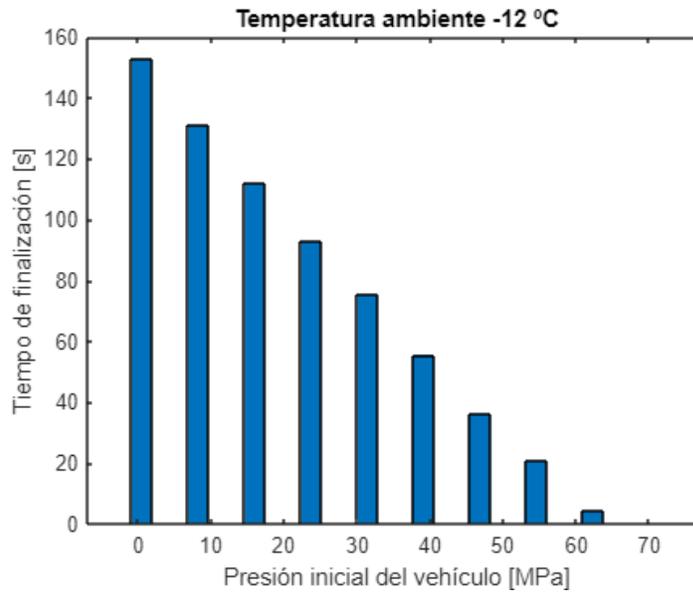


Figura 110

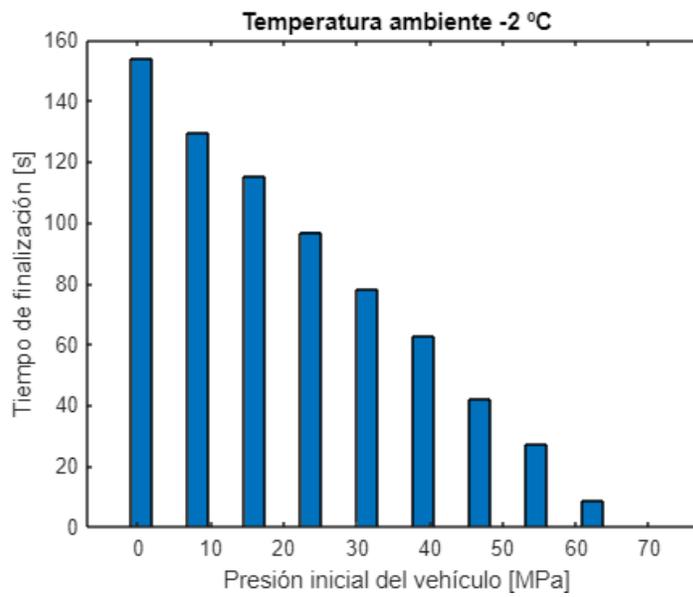


Figura 111

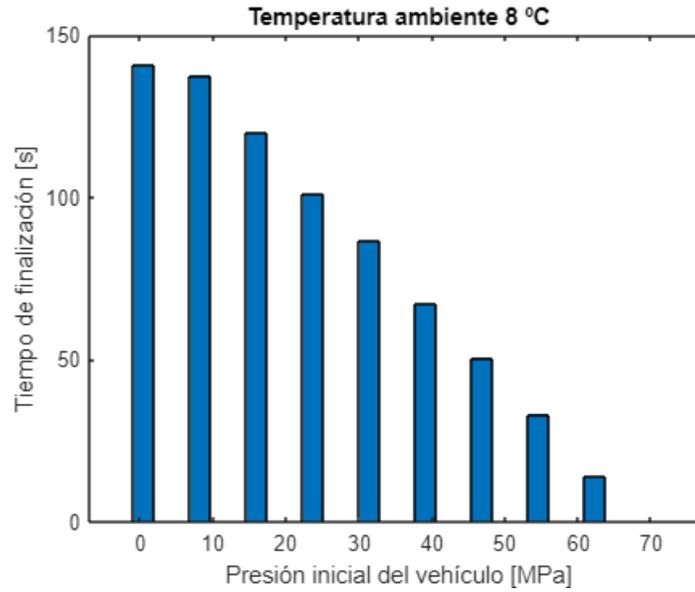


Figura 112

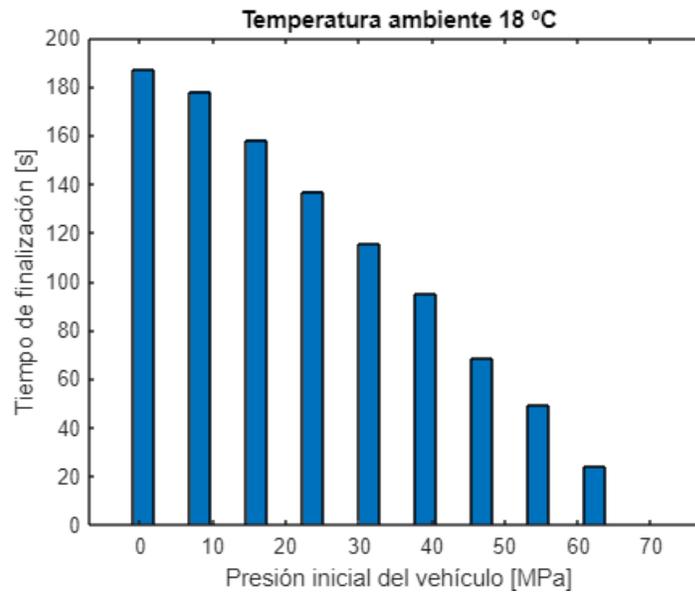


Figura 113

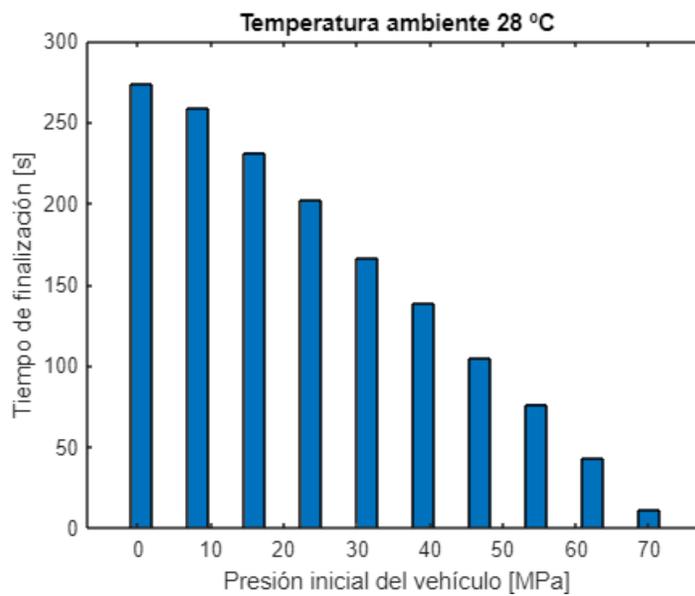


Figura 114

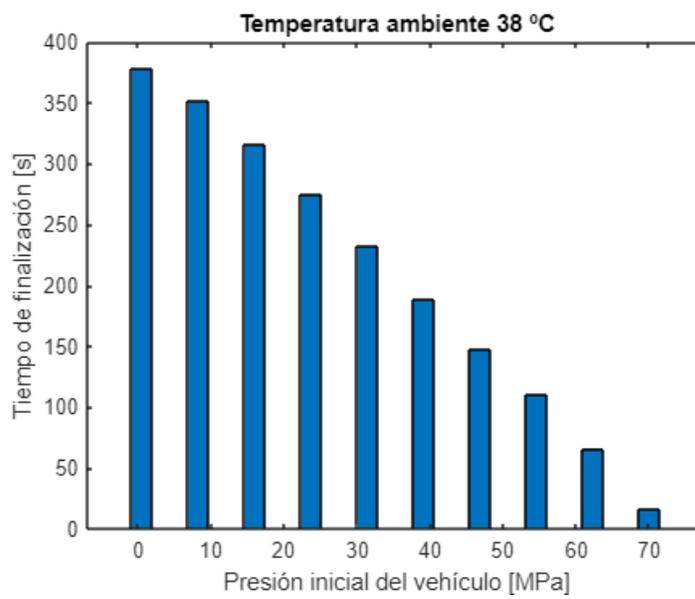


Figura 115

Referencias

- [1] Venair. *Evolution of Renewable Energy*. Venair Blog. 2023. URL: <https://venair.com/en/blog/articles/evolution-renewable-energy>.
- [2] Raul Barreto. «Fossil fuels, alternative energy and economic growth». En: *Economic Modelling* 75 (jul. de 2018). DOI: 10.1016/j.econmod.2018.06.019.
- [3] *10 Breakthrough Technologies 2022: Practical Fusion Reactors*. 2022. URL: <https://www.technologyreview.com/2022/02/23/1047268/practical-fusion-reactors-breakthrough-technology-2022/>.
- [4] *The Parts of the Periodic Table*. URL: https://www.angelo.edu/faculty/kboudrea/periodic/physical_physical.htm.
- [5] Yogesh Manoharan et al. «Hydrogen fuel cell vehicles; current status and future prospect». En: *Applied Sciences* 9.11 (2019), pág. 2296.
- [6] J. Larminie y A. Dicks. *Fuel cell systems explained*. John Wiley & Sons, 2003.
- [7] Matteo Genovese et al. *Hydrogen Refueling Process: Theory, Modeling, and In-Force Applications*. Mar. de 2023. DOI: 10.3390/en16062890.
- [8] Xun Wang et al. «Review of researches on important components of hydrogen supply systems and rapid hydrogen refueling processes». En: *International Journal of Hydrogen Energy* 48 (5 ene. de 2023), págs. 1904-1929. ISSN: 0360-3199. DOI: 10.1016/J.IJHYDENE.2022.09.303.
- [9] Fazil Qureshi et al. «A State-of-The-Art Review on the Latest trends in Hydrogen production, storage, and transportation techniques». En: *Fuel* 340 (2023), pág. 127574. ISSN: 0016-2361. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2023.127574>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0016236123001874>.
- [10] *UNE-ISO 19880-12022*.
- [11] Yanmei Yang et al. «Review of Hydrogen Standards for China». En: vol. 118. EDP Sciences, oct. de 2019. DOI: 10.1051/e3sconf/201911803032.
- [12] Tetsufumi Ikeda. *Status of Hydrogen Fueling Station Technologies in Japan*. 2018.
- [13] Matteo Genovese et al. «Experimental Comparison of Hydrogen Refueling with Directly Pressurized vs. Cascade Method». En: *Energies* 16 (15 ago. de 2023). ISSN: 19961073. DOI: 10.3390/en16155749.
- [14] Jun YOSHIDA et al. «Thermodynamic analysis of high pressure hydrogen gas refueling system with turbo-expanders». En: *Mechanical Engineering Journal* 6 (3 2019), págs. 18-00388-18-00388. DOI: 10.1299/mej.18-00388.
- [15] P. Atkins y Atkins J. de Paula. «PHYSICAL CHEMISTRY». En: ed. por W.H. Freeman. 8.^a ed. 2006, págs. 451-452.
- [16] *System Requirements for MATLAB - MATLAB & Simulink*. URL: <https://es.mathworks.com/support/requirements/matlab-system-requirements.html>.
- [17] J.A. Turner. «Sustainable Hydrogen Production». En: *Science* 305.5686 (2004), págs. 972-974.
- [18] N.Z. Muradov y T.N. Veziroğlu. «From Hydrocarbon to Hydrogen-Carbon to Hydrogen Economy». En: *International Journal of Hydrogen Energy* 30.3 (2005), págs. 225-237.

- [19] P. McKendry. «Energy Production from Biomass (Part 1): Overview of Biomass». En: *Biore-source Technology* 83.1 (2002), págs. 37-46.
- [20] *The Future of Hydrogen*. 2019. URL: <https://www.iea.org/reports/the-future-of-hydrogen>.
- [21] *Hydrogen Scaling Up*. 2019. URL: <https://hydrogencouncil.com/en/study-hydrogen-scaling-up/>.
- [22] Viviana Negro, Michel Noussan y David Chieramonti. «The potential role of ammonia for hydrogen storage and transport: A critical review of challenges and opportunities». En: *Energies* 16.17 (2023), pág. 6192.
- [23] J. Zheng et al. «Techno-economic Challenges of Green Ammonia as an Energy Vector». En: *Renewable and Sustainable Energy Reviews* (2019).
- [24] I. Staffell et al. «The Role of Hydrogen and Fuel Cells in the Global Energy System». En: *Energy & Environmental Science* 12.2 (2019), págs. 463-491.
- [25] B. Sakintuna. «Metal hydride materials for solid hydrogen storage: a review». En: *International journal of hydrogen energy* 32.9 (2007), págs. 1121-1140.
- [26] A. Lueking. «Hydrogen spillover to enhance hydrogen storage—study of the effect of carbon physicochemical properties». En: *Applied Catalysis A: General* 265.2 (2004), págs. 259-268.
- [27] P. Chen. «Recent developments in transition metal carbonyls and related compounds for hydrogen production and hydrogen storage». En: *Chemical Communications* 48.31 (2012), págs. 3708-3721.
- [28] U. Eberle. «Chemical and physical solutions for hydrogen storage». En: *Angewandte Chemie International Edition* 48.36 (2009), págs. 6608-6630.
- [29] B. James. «Mass production cost estimation of direct hydrogen PEM fuel cell systems for transportation applications: 2012 update». En: *Strategic Analysis, Inc., Arlington, VA, USA* (2012).
- [30] D. Yogui Sherif S. A. Goswami. *Handbook of hydrogen energy*. CRC Press, 2005.
- [31] U. Bossel. «The hydrogen illusion». En: *World Electric Vehicle Journal* 1.1 (2006), págs. 18-28.
- [32] T.Q. Hua et al. «High-pressure hydrogen tank testing». En: *Journal of Power Sources* 144.1 (2005), págs. 37-44.
- [33] L.E. Klebanoff et al. «Hydrogen storage technology: Materials and applications». En: *CRC Press* (2012).
- [34] J. Jürß y F. Kapp. «Advancements in High-Pressure Hydrogen Tanks for Light-Duty Fuel Cell Vehicles: A Review». En: *International Journal of Hydrogen Energy* 46.57 (2021), págs. 29483-29495.
- [35] Ji Qiang Li et al. «A numerical study on the thermal behavior of high pressure hydrogen in the on-board storage cylinder». En: *AIP Advances* 13 (7 jul. de 2023). ISSN: 21583226. DOI: 10.1063/5.0143732.
- [36] Kiyoshi Handa, Shinji Oshima y Tatsuya Rembutsu. «Precooling temperature relaxation technology in hydrogen refueling for fuel-cell vehicles». En: *International Journal of Hydrogen Energy* 46 (67 sep. de 2021), págs. 33511-33522. ISSN: 0360-3199. DOI: 10.1016/J.IJHYDENE.2021.07.077.
- [37] Nina Helene Omdahl et al. *Modeling of a Hydrogen Refueling Station*.

- [38] Zhuang Xu et al. «Development of fuelling protocols for gaseous hydrogen vehicles: a key component for efficient and safe hydrogen mobility infrastructures». En: *Clean Energy* 7 (1 feb. de 2023), págs. 23-29. ISSN: 2515-4230. DOI: 10.1093/CE/ZKAC087. URL: <https://dx.doi.org/10.1093/ce/zkac087>.
- [39] R.K. Ahluwalia, J.-K. Peng y T.Q. Hua. «Cryo-compressed hydrogen storage». En: Elsevier, 2016, págs. 119-145. DOI: 10.1016/b978-1-78242-362-1.00005-5.
- [40] Zihang Zhang et al. «Modelling of gas network transient flows with multiple hydrogen injections and gas composition tracking». En: *International Journal of Hydrogen Energy* 47 (4 ene. de 2022), págs. 2220-2233. ISSN: 0360-3199. DOI: 10.1016/J.IJHYDENE.2021.10.165.
- [41] Taichi Kuroki et al. «Thermodynamic modeling of hydrogen fueling process from high-pressure storage tank to vehicle tank». En: *International Journal of Hydrogen Energy* 46 (42 jun. de 2021), págs. 22004-22017. ISSN: 0360-3199. DOI: 10.1016/J.IJHYDENE.2021.04.037.
- [42] E. Rothuizen, B. Elmegaard y M. Rokni. «Dynamic simulation of the effect of vehicle-side pressure loss of hydrogen fueling process». En: *International Journal of Hydrogen Energy* 45 (15 mar. de 2020), págs. 9025-9038. ISSN: 0360-3199. DOI: 10.1016/J.IJHYDENE.2020.01.071.
- [43] Peter L. WOODFIELD, Masanori MONDE y Toshio TAKANO. «Heat Transfer Characteristics for Practical Hydrogen Pressure Vessels Being Filled at High Pressure». En: *Journal of Thermal Science and Technology* 3 (2 2008), págs. 241-253. DOI: 10.1299/jtst.3.241.
- [44] Arthur Couteau, Panayotis Dimopoulos Eggenschwiler y Patrick Jenny. «Heat transfer analysis of high pressure hydrogen tank fillings». En: *International Journal of Hydrogen Energy* 47 (54 jun. de 2022), págs. 23060-23069. ISSN: 03603199. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2022.05.127.
- [45] Kaifeng Yuan et al. «Numerical Modeling for Rapid Charging of Hydrogen Gas Vessel in Fuel Cell Vehicle». En: *Processes* 11 (2 feb. de 2023). ISSN: 22279717. DOI: 10.3390/pr11020476.
- [46] Fu qiang Chen et al. «Pressure analysis on two-step high pressure reducing system for hydrogen fuel cell electric vehicle». En: *International Journal of Hydrogen Energy* 42 (16 abr. de 2017), págs. 11541-11552. ISSN: 0360-3199. DOI: 10.1016/J.IJHYDENE.2017.02.077.
- [47] Fu qiang Chen et al. «Turbulent compressible flow analysis on multi-stage high pressure reducing valve». En: *Flow Measurement and Instrumentation* 61 (jun. de 2018), págs. 26-37. ISSN: 0955-5986. DOI: 10.1016/J.FLOWMEASINST.2018.03.013.
- [48] Mathieu Specklin et al. «Numerical study of a liquid-piston compressor system for hydrogen applications». En: *Applied Thermal Engineering* 216 (nov. de 2022). ISSN: 13594311. DOI: 10.1016/j.applthermaleng.2022.118946.
- [49] *Hydrogen - Reactivity, Uses, Properties — Britannica*. URL: <https://www.britannica.com/science/hydrogen/Reactivity-of-hydrogen>.
- [50] W R Magro et al. *Molecular Dissociation in Hot, Dense Hydrogen*. 1996.
- [51] Detlef Stolten y Bernd Emonts. *Hydrogen Science and Engineering Materials, Processes, Systems and Technology*. Wiley-VCH Verlag & Co, 2016, pág. 1154. ISBN: 9783527322732.
- [52] Yu Ya Milenko, R M Sibileva y M A Strzhemechny. *Natural Ortho-Para Conversion Rate in Liquid and Gaseous Hydrogen*. 1997.
- [53] D H Weitzel et al. *Ortho-Para Catalysis In Liquid-Hydrogen Production I*. 1958.

- [54] Graham Thomas. «Liquid diffusion applied to analysis». En: *Philosophical Transactions of the Royal Society* 151 (1861), págs. 183-224. DOI: <http://doi.org/10.1098/rstl.1861.0011>.
- [55] Michael Ebermann et al. «Analytical and numerical approach to determine effective diffusion coefficients for composite pressure vessels». En: *Composite Structures* 291 (jul. de 2022). ISSN: 02638223. DOI: 10.1016/j.compstruct.2022.115616.
- [56] Hanane Dagdougui et al. «Hydrogen Logistics: Safety and Risks Issues». En: *Hydrogen Infrastructure for Energy Applications* (ene. de 2018), págs. 127-148. DOI: 10.1016/B978-0-12-812036-1.00007-X.
- [57] Qian Cheng et al. «Review of Common Hydrogen Storage Tanks and Current Manufacturing Methods for Aluminium Alloy Tank Liners». En: *International Journal of Lightweight Materials and Manufacture* (ago. de 2023). ISSN: 25888404. DOI: 10.1016/j.ijlmm.2023.08.002.
- [58] George Parks et al. *Hydrogen Station Compression, Storage, and Dispensing Technical Status and Costs: Systems Integration*. 2020. URL: <http://www.osti.gov/bridge>.
- [59] Didier Grouset y Cyrille Ridart. «Lowering Energy Spending Together With Compression, Storage, and Transportation Costs for Hydrogen Distribution in the Early Market». En: *Hydrogen Supply Chain: Design, Deployment and Operation* (ene. de 2018), págs. 207-270. DOI: 10.1016/B978-0-12-811197-0.00006-3.
- [60] Yuanrong Zhou y Stephanie Searle. *COST OF RENEWABLE HYDROGEN PRODUCED ONSITE AT HYDROGEN REFUELING STATIONS IN EUROPE*. 2022. URL: www.theicct.orgcommunications@theicct.org.
- [61] Mohd Nur Ikhmal Salehmin et al. *High-pressure PEM water electrolyser: A review on challenges and mitigation strategies towards green and low-cost hydrogen production*. Sep. de 2022. DOI: 10.1016/j.enconman.2022.115985.
- [62] Urwah Khan, Toshiyuki Yamamoto e Hitomi Sato. «Consumer preferences for hydrogen fuel cell vehicles in Japan». En: *Transportation Research Part D: Transport and Environment* 87 (oct. de 2020), pág. 102542. ISSN: 1361-9209. DOI: 10.1016/J.TRD.2020.102542.
- [63] Pelin Bolat y Christian Thiel. «Hydrogen supply chain architecture for bottom-up energy systems models. Part 1: Developing pathways». En: *International Journal of Hydrogen Energy* 39 (17 jun. de 2014), págs. 8881-8897. ISSN: 0360-3199. DOI: 10.1016/J.IJHYDENE.2014.03.176.
- [64] Michael J. Kuby et al. «Hydrogen station location analysis and optimization: Advanced models and behavioral evidence». En: Elsevier, ene. de 2023, págs. 315-380. DOI: 10.1016/B978-0-323-99514-6.00016-9. URL: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/B9780323995146000169>.
- [65] Sitra Pregassame et al. *Hydrogen refuelling station: filling control protocols development*.
- [66] G. Sdanghi et al. *Review of the current technologies and performances of hydrogen compression for stationary and automotive applications*. Mar. de 2019. DOI: 10.1016/j.rser.2018.11.028.
- [67] «JNTU_ThermalEngineering – I_searchable». En: ().
- [68] *Hydrogen Fuel Cell Refueling Chillers & MCHE Heat Exchangers*. URL: <https://mydax.com/liquid-chiller-applications/automotive-hydrogen-chillers/>.

- [69] David Ting. «Heat exchangers». En: *Thermofluids* (ene. de 2022), págs. 373-395. DOI: 10.1016/B978-0-323-90626-5.00009-4. URL: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/B9780323906265000094>.
- [70] *Heat exchanger for systems with gas and thermal liquid flows - MATLAB - MathWorks España*. URL: <https://es.mathworks.com/help/hydro/ref/heatexchangergtl.html>.
- [71] *Flow restriction in a gas network - MATLAB - MathWorks España*. URL: <https://es.mathworks.com/help/hydro/ref/orificeg.html>.
- [72] *Numerical Smoothing - MATLAB & Simulink - MathWorks España*. URL: <https://es.mathworks.com/help/hydro/ug/numerical-smoothing.html>.
- [73] *Stateflow - MATLAB*. URL: <https://es.mathworks.com/products/stateflow.html>.
- [74] *What is a Mealy machine?* URL: <https://www.educative.io/answers/what-is-a-mealy-machine>.
- [75] *Difference between Mealy machine and Moore machine - GeeksforGeeks*. URL: <https://www.geeksforgeeks.org/difference-between-mealy-machine-and-moore-machine/>.
- [76] *Choose a Solver - MATLAB & Simulink - MathWorks España*. URL: <https://es.mathworks.com/help/simulink/ug/choose-a-solver.html>.
- [77] L. F. Shampine, I. Gladwell y S. Thompson. *Solving ODEs with MATLAB*. Cambridge University Press, abr. de 2003. DOI: 10.1017/cbo9780511615542.
- [78] Lawrence F Shampine, Mark W Reichelt y Siam J Sci Comput. *THE MATLAB ODE SUITE* *. 1997. URL: <http://www.siam.org/journals/ojsa.php>.
- [79] *Elegir un solver de ODE - MATLAB & Simulink - MathWorks España*. URL: <https://es.mathworks.com/help/matlab/math/choose-an-ode-solver.html#bu7wegm-1>.
- [80] Steve Miller y Jeff Wendlandt. «Real-Time Simulation of Physical Systems Using Simscape™». En: ago. de 2012, págs. 581-598. DOI: 10.1201/b12667-28.
- [81] P Deuffhard. *RECENT PROGRESS IN EXTRAPOLATION METHODS FOR ORDINARY DIFFERENTIAL EQUATIONS**. 1985. URL: <http://www.siam.org/journals/ojsa.php>.
- [82] Jimmy D Kumana y Samir P Kothari. *Predict Storage Tank Heat Transfer Precisely*. 2009.
- [83] Yuliang Fang et al. «Heat transfer of hydrogen with variable properties in a heated tube». En: *International Journal of Heat and Mass Transfer* 209 (ago. de 2023). ISSN: 00179310. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2023.124128.
- [84] Kyle R. Gluesenkamp et al. «Experimentally Measured Thermal Masses of Adsorption Heat Exchangers». En: *Energies* 2020, Vol. 13, Page 1150 13 (5 mar. de 2020), pág. 1150. ISSN: 1996-1073. DOI: 10.3390/EN13051150. URL: <https://www.mdpi.com/1996-1073/13/5/1150/htm%20https://www.mdpi.com/1996-1073/13/5/1150>.