

Universidad Técnica Federico Santa María

Departamento de Ingeniería Eléctrica

Valparaíso - Chile



UNIVERSIDAD TECNICA
FEDERICO SANTA MARIA

Departamento de Ingeniería Eléctrica

**“Desarrollo y evaluación de un modelo de optimización
determinista no lineal para la planificación y diseño de plantas
híbridas de hidrógeno verde”.**

DIEGO YAMIL UARAC GARCÍA

**MEMORIA DE TITULACIÓN PARA OPTAR AL TÍTULO DE
INGENIERO CIVIL ELECTRICISTA**

Profesor Guía

Alejandro Angulo Cárdenas

5 de diciembre de 2025



CONSTANCIA DE VALIDACIÓN Y CONFIDENCIALIDAD DE MONOGRAFÍA A REPOSITORIO ACADÉMICO

1.- IDENTIFICACIÓN DEL TRABAJO ACADÉMICO

Tipo de monografía (marcar una opción): ☒ Memoria o trabajo de título ☐ Tesis de Postgrado

Título del trabajo: Desarrollo y evaluación de un modelo de optimización determinista no lineal para la planificación y diseño de plantas híbridas de hidrógeno verde.

Nombre del candidato(a): Diego Uarac García

Carrera / Grado: Ingeniero civil electricista

Campus: Casa central

Departamento: Ingeniería eléctrica

2.- VALIDACIÓN DEL PROFESOR GUÍA/DIRECTOR DE TESIS

Yo, Alejandro Angulo, en mi calidad de profesor(a) guía/director(a) del trabajo académico mencionado anteriormente **DEJO CONSTANCIA** que:

- He revisado esta versión del documento y corresponde a la versión final aprobada del trabajo.
- El trabajo cumple con los requisitos académicos y de formato establecidos por la institución.

3.- EVALUACIÓN DE CONFIDENCIALIDAD POR PROPIEDAD INDUSTRIAL (marcar una opción)

☒ El trabajo **NO contiene** información que amerite confidencialidad y puede ser publicado de inmediato en repositorio con acceso abierto.

☐ El trabajo **CONTIENE** información con potenciales implicancias de propiedad industrial o intelectual y requiere un periodo de confidencialidad (**embargo**) por (**marcar una opción**):

☐ 6 meses ☐ 12 meses ☐ 2 años ☐ 3 años ☐ 5 años ☐ 10 años

Fundamentación de la necesidad de confidencialidad (obligatorio si se solicita embargo):

4.- FIRMAS

Profesor(a) guía o director(a) de memoria o tesis:

Fecha: 09/03/2026

Firma:

Estudiante o Candidato(a):

Fecha: 09/03/2026

Firma:

Este formulario debe ser insertado como página 2 de la memoria o tesis, completado y firmado por estudiante y profesor(a) antes de la entrega en portal PRISMA de Biblioteca USM.

Agradecimientos

Quiero expresar mi agradecimiento a mi profesor guía, Dr. Alejandro Angulo, por su apoyo, orientación y paciencia a lo largo del desarrollo de este trabajo, así como su disposición para compartir conocimientos y guiar cada etapa del proceso.

Agradezco también a la empresa Mako, en especial a Andrés Beltrán, por la confianza depositada en mí y por su permanente disposición para facilitar la información necesaria para la realización de este estudio.

A mis amigos, quienes fueron parte fundamental del día a día, tanto en las jornadas de estudio como en los espacios de deporte y desconexión, les agradezco sinceramente su compañía, apoyo y motivación constante.

Finalmente, expreso mi más profundo agradecimiento a mi familia por su apoyo incondicional, comprensión y aliento permanente. Su confianza, paciencia y respaldo fueron fundamentales durante cada etapa de este proceso, brindándome la tranquilidad y motivación necesarias para alcanzar este objetivo. A mi hermana, Sofía, y a mi padre, Yamil, por su constante apoyo. En especial, agradezco a mi madre, Mónica (Q.E.P.D.), quien más anhelaba ver cumplido este objetivo y cuyo apoyo fue incondicional en todo momento.

Índice general

1. Introducción	3
1.1. Contexto	3
1.2. Desafíos actuales y motivación	5
1.3. Definición del problema	6
1.4. Objetivos del trabajo	6
1.5. Alcance y limitaciones	7
1.6. Estructura del documento	7
2. Marco teórico	9
2.1. Introducción general	9
2.2. Tecnologías de electrólisis	9
2.2.1. Electrolizador alcalino	9
2.2.2. Celda electrolizadora de óxido sólido (SOEC)	9
2.2.3. Membrana de intercambio protónico	10
2.2.4. Modelo electrolizador	11
2.3. Enfoques de modelación para la planificación de sistemas de hidrógeno	16
2.3.1. Hidrógeno en sistemas energéticos multiproducto	16
2.3.2. Marcos integrados para el diseño de centros de hidrógeno verde	17
2.4. Almacenamiento de hidrógeno	17
2.4.1. Almacenamiento por compresión	17
2.4.2. Propiedades termodinámicas del hidrógeno	18
2.4.3. Consideraciones de diseño y seguridad	18
2.5. Almacenamiento de agua desmineralizada	19
2.5.1. Modelación del estanque de agua desmineralizada	19
2.5.2. Consideraciones operativas	20
2.6. Almacenamiento de amoníaco	20
2.6.1. Almacenamiento presurizado	20
2.6.2. Almacenamiento refrigerado a presión atmosférica	21
2.6.3. Modelación y relevancia operativa	21
2.7. Sistema de almacenamiento de energía en baterías	21
2.7.1. Dinámica del estado de carga	22
2.7.2. Límites operacionales	22

2.7.3. Aplicación en sistemas con generación renovable	22
2.7.4. Justificación tecnológica	23
3. Metodología	24
3.1. Modelo Lineal	24
3.1.1. Conjuntos	24
3.1.2. Función objetivo	26
3.1.3. Restricciones	26
3.2. Modelo no lineal	36
3.2.1. Restricciones	37
3.2.2. Almacenamiento tipo 1	40
3.2.3. Almacenamiento tipo 2	41
4. Resultados y comparación de modelos	44
4.1. Descripción de datos	44
4.2. Planteamiento computacional	45
4.3. Resultados del modelo lineal	47
4.3.1. Capacidades óptimas de diseño	47
4.3.2. Producción anual de hidrógeno y amoníaco	48
4.3.3. Resultados económicos	48
4.4. Resultados del modelo no lineal	49
4.4.1. Capacidades óptimas de diseño	49
4.4.2. Producción anual de hidrógeno y amoníaco	50
4.4.3. Resultados económicos	50
4.5. Comparación de modelos	51
5. Conclusiones y trabajos futuros	53
5.1. Conclusiones	53
5.2. Trabajos futuros	54
Anexos	57
A. Códigos de los modelos AMPL	58
A.1. Archivo hv.mod	58
A.2. Archivo hv.run	66
A.3. Archivo hv.dat (extracto)	72
A.4. Archivo hvNL.mod	77

A.5. Archivo <code>hvNL.dat(extracto)</code>	89
A.6. Archivo <code>hvNL.run</code>	95
B. Tablas	101
B.1. Parámetros	101

Índice de figuras

1.1. Ciclo de producción de hidrógeno verde y amoníaco verde. Elaboración propia. .	5
2.1. Electrolizador PEM. Elaboración propia.	11
4.1. Mapa de calor horario–anual del factor de planta del parque eólico Canelo. Elaboración propia.	45
4.2. Nodos unidad Haber-Bosch. Elaboración propia.	46

Índice de Tablas

1.1. Comparación de densidad energética volumétrica entre hidrógeno comprimido y amoníaco líquido.	4
4.1. Capacidades óptimas instaladas del modelo lineal.	47
4.2. Producción anual obtenida por el modelo lineal.	48
4.3. Indicadores económicos del modelo lineal.	48
4.4. Capacidades óptimas instaladas del modelo no lineal.	49
4.5. Producción anual obtenida por el modelo no lineal.	50
4.6. Indicadores económicos del modelo no lineal.	50
4.7. Comparación de capacidades óptimas instaladas entre el modelo lineal y no lineal.	51
4.8. Producción anual y spillage energético en los modelos lineal y no lineal.	51
4.9. Comparación de indicadores económicos entre el modelo lineal y no lineal.	52
B.1. Parámetros geométricos, eléctricos y electroquímicos del sistema	101

Resumen

La creciente penetración de energías renovables en Chile, junto con el interés estratégico en el hidrógeno verde, impulsa la necesidad de desarrollar modelos de diseño capaces de capturar tanto la complejidad operativa como las restricciones físicoquímicas reales de los sistemas de producción.

En el presente informe se evalúa el diseño y dimensionamiento de una planta híbrida de generación y almacenamiento para la producción de hidrógeno verde, utilizando dos modelos de optimización determinista: uno lineal y otro no lineal, con el objetivo de maximizar la producción total de hidrógeno verde y, en consecuencia, de amoníaco verde. El modelo lineal ofrece una representación simplificada con eficiencia constante, mientras que el modelo no lineal incorpora formulaciones basadas en las variaciones reales de eficiencia, lo que permite capturar con mayor precisión el comportamiento y la operación del sistema. La información utilizada para el cálculo de resultados fue proporcionada por la empresa MAKO INVERSIONES SpA.

Los resultados muestran diferencias significativas entre ambos enfoques. El modelo lineal tiende a sobreestimar la eficiencia del electrolizador, el desempeño técnico general y los indicadores económicos, proyectando una mayor producción anual de hidrógeno y amoníaco, así como menores costos energéticos. En contraste, el modelo no lineal reduce la potencia óptima de los equipos, incorpora pérdidas energéticas y evidencia un mayor consumo eléctrico, lo que se traduce en menores ingresos, una disminución del VAN en un 26.2 % y de la TIR en un 10.6 %, junto con un aumento del LCOA en un 8.6 %. Estos resultados reflejan que la inclusión de relaciones no lineales y pérdidas internas permite capturar de manera más precisa las ineficiencias presentes en la operación real del sistema.

Del análisis de los resultados se concluye que el modelo lineal es adecuado para una primera aproximación al diseño de plantas híbridas de hidrógeno verde, debido a su menor complejidad computacional; sin embargo, sobreestima el desempeño del sistema al asumir rendimientos constantes y omitir relaciones internas no lineales. En contraste, la formulación no lineal representa con mayor fidelidad los fenómenos electroquímicos, termodinámicos y operativos, por lo que resulta necesaria para una evaluación rigurosa del desempeño y para la toma de decisiones de inversión.

Finalmente, se proponen líneas de trabajo futuras orientadas a incorporar la degradación de equipos, la modelación térmica detallada y el análisis estocástico de recursos renovables, con el objetivo de mejorar la robustez del diseño y su aplicabilidad a proyectos industriales.

Palabras clave: *Hidrógeno verde, electrolizador PEM, optimización no lineal, planificación energética, modelos híbridos, síntesis de amoníaco, plantas híbridas energéticas, baterías BESS*

Abstract

The increasing penetration of renewable energy sources in Chile, besides the country's strategic interest in the development of green hydrogen, has increased the need for design models capable of representing the operational complexity and the physicochemical restrictions to production systems.

This report evaluates the design and sizing of a hybrid generation and storage plant intended for green hydrogen production, using two deterministic optimization models: one linear and one nonlinear. The objective is to maximize total green hydrogen production and, consequently, green ammonia output. While the linear model relies on a simplified representation with constant efficiencies, the nonlinear model incorporates formulations that reflect real efficiency variations, enabling a more accurate characterization of system behavior and operational performance. The data used for the analysis were provided by MAKO INVERSIONES SpA.

The results reveal significant differences between the two approaches. The linear model tends to overestimate the electrolyzer efficiency, overall technical performance, and economic indicators, projecting higher annual production of hydrogen and ammonia, along with lower energy costs. In contrast, the nonlinear model reduces the optimal equipment capacity, incorporates internal energy losses, and reflects higher electricity consumption. This leads to lower revenues, a 26.2 % decrease in NPV, a 10.6 % reduction in IRR, and an 8.6 % increase in LCOA. These outcomes demonstrate that including nonlinear relationships and internal losses captures, with greater accuracy, the inefficiencies present in real system operation.

The analysis leads to the conclusion that although the linear model is a valuable tool for preliminary assessments and large-scale evaluations due to its low computational cost, investment decision-making and rigorous performance evaluation of hybrid green hydrogen plants require the use of nonlinear models. These models provide a more accurate representation of the electrochemical, thermodynamic, and operational complexity associated with such systems.

Finally, as a proposed to further enhance the robustness and industrial applicability of the model, including the incorporation of equipment degradation, the development of detailed thermal modeling, and the implementation of stochastic analysis of renewable resource variability.

Keywords: *Green hydrogen, PEM electrolyzer, nonlinear optimization, energy planning, hybrid models, ammonia synthesis, hybrid energy plants, BESS batteries*

Capítulo 1

Introducción

1.1. Contexto

En las últimas décadas, la transición energética se ha consolidado como una prioridad estratégica a nivel mundial, impulsada por la necesidad de mitigar los efectos del cambio climático y reducir la dependencia de fuentes fósiles. En este escenario, el hidrógeno verde, producido mediante electrólisis del agua utilizando electricidad proveniente de fuentes renovables, se ha posicionado como un vector energético clave para la descarbonización de sectores de difícil electrificación directa, tales como la industria pesada, el transporte de larga distancia y la generación energética de respaldo [1].

Chile, pese a aportar solo un 0.3 % de las emisiones globales, posee condiciones excepcionales para la producción competitiva de hidrógeno verde. La combinación de la radiación solar más alta del mundo en el Desierto de Atacama y los vientos intensos y constantes de la Patagonia permite proyectar costos de generación renovable significativamente inferiores al promedio mundial. Según la *Estrategia Nacional de Hidrógeno Verde*, el país podría instalar hasta 25 GW de electrólisis al año 2030, situándose como un actor relevante en la exportación y el desarrollo tecnológico asociado a este vector energético [2].

El desarrollo del hidrógeno verde en Chile no solo se enmarca en los compromisos climáticos para alcanzar la carbono-neutralidad al año 2050, sino también en una estrategia de diversificación productiva orientada a la creación de nuevas cadenas de valor, empleo especializado y polos industriales basados en la energía renovable. En este sentido, la producción y almacenamiento de hidrógeno verde se visualiza como un eje para la transición hacia una economía de mayor valor agregado y sostenibilidad ambiental.

Sin embargo, la implementación de plantas de producción de hidrógeno verde presenta desafíos técnicos y económicos significativos. La variabilidad de los recursos renovables, la interacción entre fuentes de generación eléctrica y sistemas de almacenamiento, y la operación de equipos como electrolizadores y unidades de conversión dependen de decisiones de diseño que impactan directamente en la eficiencia y viabilidad del proyecto. Por ello, el desarrollo de modelos de optimización que permitan evaluar configuraciones tecnológicas bajo distintos escenarios se vuelve fundamental para apoyar la toma de decisiones en etapas tempranas de diseño.

Tipos de hidrógeno

Dependiendo de la fuente primaria, el proceso productivo y el tipo de energía utilizada para la generación de hidrógeno, las emisiones y costos tienen una alta variación. Por lo anterior, existe

una clasificación basada en seis colores para diferenciar los tipos de hidrógeno; hidrógeno gris, azul, turquesa, verde, morado y amarillo. [3]

El hidrógeno gris se genera a partir de combustible fósiles, generalmente a través del gas natural y carbón, lo que genera emisiones de CO_2 en el proceso de producción de H_2 , mientras que el hidrógeno azul que también se genera a partir de combustibles fósiles, capta y almacena el dióxido de carbono. El hidrógeno rosado se genera a partir de electricidad nuclear, por lo que el proceso genera desechos nucleares. El hidrógeno generado por la pirólisis del metano se conoce como hidrógeno turquesa, del cual se obtiene carbono sólido, lo que genera una menor huella de carbono y puede venderse. El hidrógeno amarillo se genera a partir de la electrólisis de energía eléctrica de red. [3]

El hidrógeno verde se genera a partir de la electrólisis de agua, utilizando electricidad proveniente de energías renovables. Este tipo de liberación de H_2 genera especial interés, debido al enfoque y búsqueda de energías más sustentables, por lo que también se le conoce como hidrógeno limpio, hidrógeno renovable o hidrógeno bajo en carbono. Actualmente, las tecnologías más utilizadas para la electrólisis son a través de Agua alcalina, Membrana de Intercambio Protónico (PEM) y Celda electrolizadora de óxido sólido (SOEC). [3]

Producción hidrógeno verde y almacenamiento amoníaco verde

En este contexto, la presente memoria aborda el modelado y optimización del diseño de una planta híbrida de producción de hidrógeno verde, considerando la integración de fuentes renovables, electrolizadores y sistemas de almacenamiento. Además, se desarrollan y comparan modelos de optimización lineales y no lineales con el objetivo de analizar su impacto en el dimensionamiento, operación y costos del sistema.

Para una mejor comprensión del funcionamiento de las partes, en la Figura 1.1 se presenta un diagrama simplificado del ciclo de producción de hidrógeno verde a partir de energía eólica, mediante un electrolizador PEM y su posterior almacenamiento en forma de amoníaco verde.

Debido a la alta volatilidad del hidrógeno y su baja densidad volumétrica, la conversión a amoníaco verde surge como una alternativa eficaz para el almacenamiento y transporte de energía renovable. El amoníaco, al ser un vector energético con mayor densidad y más fácil de manejar a gran escala, permite superar limitaciones logísticas propias del hidrógeno molecular.

Tabla 1.1: Comparación de densidad energética volumétrica entre hidrógeno comprimido y amoníaco líquido.

Vector energético	Condición	Densidad volumétrica	Densidad energética
Hidrógeno (H_2)	200 bar (gas comprimido)	16 kg m^{-3}	1.8 MJ L^{-1}
Amoníaco (NH_3)	-33°C (líquido, 1 bar)	682 kg m^{-3}	11 MJ L^{-1} a 13 MJ L^{-1}

Además, puede reconvertirse nuevamente en hidrógeno o emplearse directamente como combustible en aplicaciones industriales, marítimas o de generación eléctrica, lo que incrementa su versatilidad dentro de sistemas energéticos integrados. Su producción se basa en la síntesis de

Haber–Bosch utilizando hidrógeno verde y nitrógeno extraído del aire, lo que permite obtener un compuesto libre de emisiones fósiles siempre que la energía involucrada provenga de fuentes renovables [4]. Como se destaca en la literatura reciente, el amoníaco verde está adquiriendo un rol estratégico debido a su capacidad para facilitar el comercio internacional de energía renovable y habilitar cadenas de suministro más robustas y seguras.

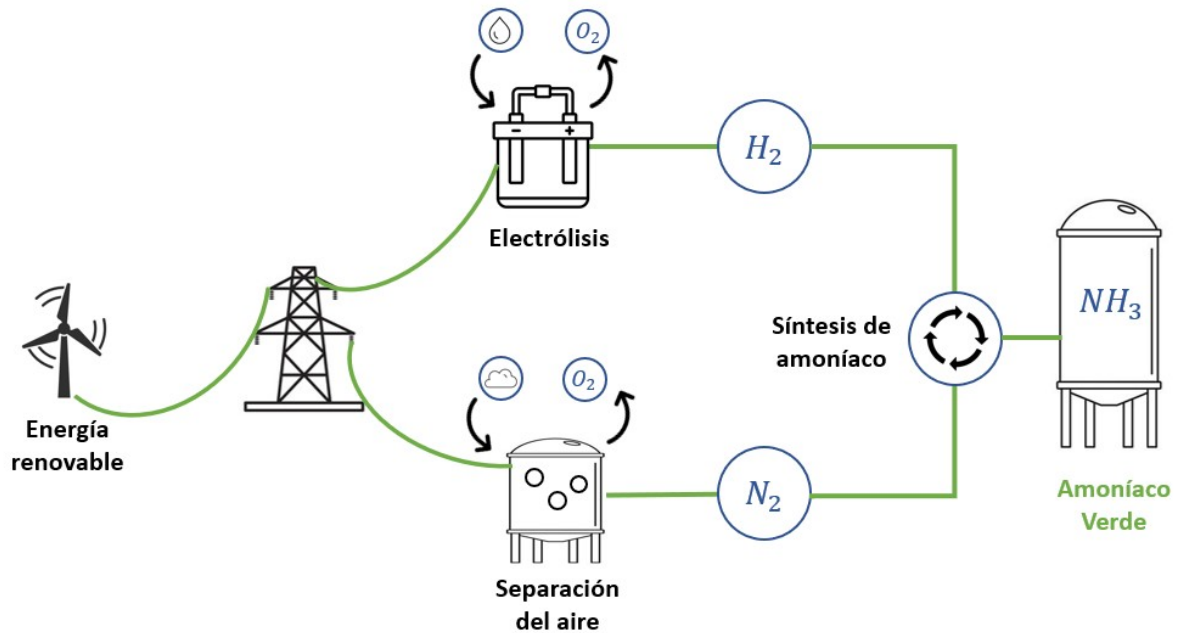


Figura 1.1: Ciclo de producción de hidrógeno verde y amoníaco verde. Elaboración propia.

1.2. Desafíos actuales y motivación

Pese a los avances recientes en el desarrollo de tecnologías y metodologías asociadas a la producción de hidrógeno verde, persisten brechas relevantes en el modelamiento y análisis de sistemas integrados. Entre los principales desafíos identificados se encuentran los siguientes:

- existen pocos modelos que integren la complejidad no lineal del electrolizador dentro de un marco de optimización a gran escala. El comportamiento electroquímico de los electrolizadores presenta relaciones no lineales entre variables como corriente, voltaje, eficiencia y producción de hidrógeno, las cuales suelen ser omitidas o fuertemente simplificadas para mantener la tractabilidad computacional de los modelos;
- la mayor parte de los estudios sigue utilizando modelos lineales con eficiencia constante, lo cual puede conducir a estimaciones poco precisas del consumo eléctrico, la producción de hidrógeno y los costos asociados, especialmente bajo condiciones de operación variable, las cuales son propias de sistemas alimentados por energías renovables;
- los efectos dinámicos y restricciones operativas de los electrolizadores suelen simplificarse en tiempo, lo cual reduce la capacidad de los modelos para representar estrategias de operación

realistas y evaluar adecuadamente el impacto de la intermitencia en el desempeño técnico y económico del sistema.

En este contexto, surge la motivación de analizar de manera comparativa parte de estas brechas mediante el desarrollo de dos modelos, uno lineal y otro no lineal basado en fundamentos electroquímicos, con el fin de evaluar sus diferencias en el dimensionamiento y operación de una planta híbrida de hidrógeno verde.

1.3. Definición del problema

Los modelos tradicionales de planificación energética suelen representar el electrolizador mediante una formulación lineal con un rendimiento constante. Si bien este enfoque facilita la resolución computacional, simplifica en exceso el comportamiento real del equipo, ya que no captura la dependencia del voltaje respecto de la densidad de corriente, la temperatura, las condiciones de operación ni las limitaciones fisicoquímicas propias del proceso. Estas simplificaciones pueden conducir a errores en el dimensionamiento de capacidades y en la estimación del consumo energético del sistema.

Considerando los desafíos técnicos y económicos asociados al diseño de una planta híbrida de hidrógeno verde, se plantea la necesidad de formular y analizar un modelo de optimización no lineal que incorpore de forma más realista el comportamiento del electrolizador. El objetivo es realizar una evaluación técnico-económica del sistema y comparar los resultados con los obtenidos en el modelo lineal, identificando las diferencias operacionales y de diseño que emergen al considerar una representación más detallada del proceso.

1.4. Objetivos del trabajo

Objetivo general:

- Desarrollar y evaluar modelos de optimización lineales y no lineales para el diseño y dimensionamiento de una planta híbrida de generación y almacenamiento para la producción de hidrógeno verde, incorporando aspectos técnicos y económicos en el proceso.

Objetivos específicos:

- Elaborar un modelo lineal simplificado de optimización para el diseño de plantas híbridas de generación y almacenamiento para la producción de hidrógeno verde.
- Crear una base de datos técnica y económica de equipos para diferentes tamaños de plantas híbridas de hidrógeno verde, basada en información de la literatura.
- Transformar el modelo de optimización lineal en un modelo de orden superior que capture no linealidades de los equipos, economías de escala y mejore la evaluación técnico-económica de proyectos asociados a plantas de hidrógeno verde.

- Evaluar y comparar el desempeño de los modelos lineal y de orden superior utilizando la base de datos elaborada y escenarios climáticos mediante el uso de las herramientas Python y Gurobi, analizando diferencias en indicadores económicos y su impacto en la planificación de la planta.

1.5. Alcance y limitaciones

Alcance:

- El estudio considera un horizonte anual con resolución horaria.
- La generación eléctrica proviene exclusivamente del parque eólico, el cual constituye la única fuente primaria de energía del sistema. La energía generada puede ser almacenada temporalmente mediante el sistema BESS para suavizar la operación del electrolizador.
- El trabajo considera las unidades de tratamiento de agua, electrólisis, separación de aire (ASU) y síntesis de amoníaco, modeladas a nivel de bloque de proceso e incorporando, según corresponda, sus restricciones operacionales, requerimientos de insumos y límites de capacidad.
- Se asume que la producción total de amoníaco será vendida.
- Se realiza un análisis técnico-económico considerando los costos de inversión (CAPEX), los costos de operación y mantenimiento (OPEX) e indicadores económicos.

Limitaciones:

- El modelo es determinista; no se incorpora variabilidad estocástica de recursos o precios.
- Los costos se representan de forma agregada, sin desagregación a nivel de componentes internos.
- El modelo no incorpora la logística de venta del amoníaco producido, se considera exclusivamente hasta su entrega en el sistema de almacenamiento, dejando fuera etapas de transporte, exportación o distribución.

1.6. Estructura del documento

En el presente informe se cuenta con cinco secciones, donde el Capítulo 1 inicia con el contexto de la memoria, definiendo los objetivos, problemas, alcances y limitaciones. En el Capítulo 2 se presenta el estado del arte asociado a la producción de hidrógeno verde y la modelación de sistemas energéticos híbridos, mediante una revisión de los enfoques de la literatura, desarrollando elementos de los modelos de plantas de hidrógeno, dando un énfasis en la representación y optimización de electrolizadores PEM, almacenamiento de hidrógeno, modelación de plantas híbridas

y metodologías de optimización. Los fundamentos teóricos de los componentes principales del sistema están en el Capítulo 3, donde se desarrollan los principios de operación del electrolizador PEM, las relaciones termodinámicas que gobiernan el proceso de electrólisis del agua, los modelos fisicoquímicos de voltaje de celda, y las ecuaciones relevantes para el almacenamiento de hidrógeno comprimido. Además, se presentan los balances de masa y energía utilizados para representar el comportamiento dinámico de los equipos. Seguidamente se presenta el modelo de programación lineal, donde se busca capturar un mayor acercamiento al comportamiento real de las plantas, con el fin de representar el flujo de energías y masas dentro de una planta híbrida de hidrógeno y amoníaco, incluyendo las restricciones técnicas, flujos, períodos y balances de masa y energía. A partir de la representación lineal, se presenta el modelo no lineal, donde se busca capturar un mayor acercamiento al comportamiento real de las plantas. A continuación, en el Capítulo 4, se exponen los resultados obtenidos en la comparación de ambos modelos. Finalmente, en el Capítulo 5 se exponen las conclusiones y recomendaciones para futuros trabajos.

Capítulo 2

Marco teórico

2.1. Introducción general

El desarrollo de modelos de optimización aplicados a plantas de hidrógeno verde ha evolucionado significativamente durante la última década, impulsado por el creciente interés en la descarbonización industrial y la integración de energías renovables variables. La literatura reciente abarca distintos enfoques para representar electrolizadores, sistemas de almacenamiento y plantas híbridas complejas, con énfasis tanto en la precisión físicoquímica de los modelos como en su viabilidad computacional. En este capítulo se revisan las principales líneas de investigación relevantes para este trabajo.

2.2. Tecnologías de electrólisis

La electrólisis es un proceso electroquímico mediante el cual se descompone un compuesto químico en sus elementos o componentes mediante el paso de una corriente eléctrica. La electrólisis del agua separa sus dos componentes, oxígeno e hidrógeno. [5] A continuación, se presentan los tres tipos de electrolizadores más relevantes para la producción de hidrógeno mediante electrólisis del agua.

2.2.1. Electrolizador alcalino

Este proceso consiste en la descomposición del agua en oxígeno e hidrógeno mediante la aplicación de una corriente eléctrica, utilizando un conductor de iones hidróxido como electrolito. Los materiales comúnmente empleados incluyen níquel, plata, óxidos metálicos, espinelas y metales nobles. [6] Sus principales ventajas son el bajo costo de capital y la madurez tecnológica. No obstante, presentan limitaciones relevantes: operan a bajas densidades de corriente (entre 0.2 y 0.7 A/cm²) y poseen dinámicas lentas, lo que dificulta su integración con fuentes renovables variables. [7]

2.2.2. Celda electrolizadora de óxido sólido (SOEC)

La SOEC es una tecnología avanzada que produce hidrógeno utilizando un electrolito cerámico sólido conductor de iones oxígeno y operando a altas temperaturas. [6] Su rango de operación, típicamente entre 500 °C a 1 000 °C, permite cinéticas electroquímicas mejoradas y potenciales eficiencias superiores. [7] Los materiales habituales incluyen cerámicas de circonita estabilizada

con ítria (YSZ) para el electrolito, manganita de estroncio y lantano (LSM) para el ánodo y mezclas níquel y cerámicas de zircona estabilizada con ítria (Ni-YSZ) para el cátodo.

Sin embargo, la tecnología aún se encuentra en etapa de laboratorio. Problemas como la delaminación del ánodo en la interfaz con el electrolito generan pérdida de área activa y aumento de las pérdidas óhmicas, reduciendo su estabilidad y dificultando su comercialización en el corto plazo. [7]

2.2.3. Membrana de intercambio protónico

El electrolizador de Membrana de Intercambio Protónico se posiciona como una de las tecnologías más relevantes para la producción de hidrógeno verde. Mediante energía eléctrica, el electrolizador PEM permite separar las moléculas de agua en Oxígeno e Hidrógeno a través de una membrana de polímero sólido como electrolito, que permite el transporte de protones H^+ desde el ánodo al cátodo mientras bloquea electrones y gases [8], tal como se puede ver en la Figura 2.1. Además incluye una placa bipolar para dirigir el agua y los gases y un colector de corriente para la distribución pareja del agua y facilitar el transporte de gases. [9]

Pueden operar a temperaturas de hasta 200 °C, permitiendo diseños más compactos. [7] Además, producen hidrógeno ya presurizado y presentan dinámicas rápidas, lo que facilita su acoplamiento a energías renovables. Entre sus materiales característicos se encuentran membranas Nafion[®], catalizadores anódicos basados en mezclas de IrO_2 y RuO_2 , y catalizadores catódicos basados en Platino. Sus principales desventajas son el alto costo de la membrana polimérica y del uso de metales nobles, así como de las placas bipolares generalmente fabricadas en titanio. [7]

Ánodo



Cátodo



Total



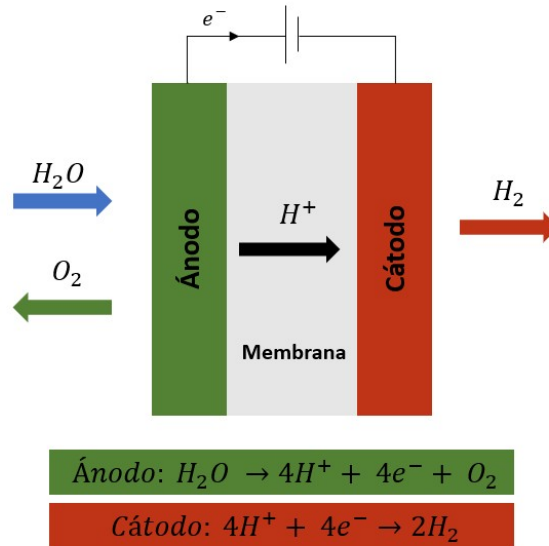


Figura 2.1: Electrolizador PEM. Elaboración propia.

Por un lado, circula el agua a través del ánodo, liberando los protones de hidrógeno, los electrones y el oxígeno. Luego, los protones atraviesan la membrana y se combinan con los electrones en el cátodo, lo que permite formar moléculas de hidrógeno. Como resultado se obtienen partículas de hidrógeno (H_2) y oxígeno (O_2).

Debido a su elevada eficiencia, la alta pureza del hidrógeno obtenido y su capacidad de operar a temperaturas superiores a las de la electrólisis alcalina, incluir un electrolizador PEM permite configuraciones más compactas.

A ello se suma la posibilidad de generar hidrógeno directamente presurizado y las rápidas dinámicas de respuesta que presenta, las cuales facilitan el seguimiento de variaciones en las condiciones de operación y lo hacen particularmente adecuado para su acoplamiento con fuentes de energía renovables. Estas características convierten a la electrólisis PEM en una alternativa ampliamente estudiada y de especial interés dentro del contexto de la transición energética [7].

2.2.4. Modelo electrolizador

El presente modelo no lineal de electrólisis tiene como propósito describir con mayor fidelidad la relación entre la tensión aplicada en la celda y la densidad de corriente que la atraviesa. A diferencia de los enfoques simplificados que asumen una relación constante entre la energía eléctrica suministrada y la producción de hidrógeno, la tensión real de operación supera el potencial de circuito abierto, determinado por la ecuación de Nernst 2.4 [9] [10].

$$V = E + \eta_{\text{act}} + \eta_{\text{ohm}} + \eta_{\text{diff}}, \quad (2.4)$$

donde:

- E es la tensión de circuito abierto.

- η_{act} representa la sobrepotencial de activación.
- η_{ohm} representa las pérdidas resistivas.
- η_{diff} es el sobrepotencial por difusión de reactivos.

Al incorporar las pérdidas internas propias del proceso, tanto las cinéticas asociadas a la activación de las reacciones, como las resistivas debidas al transporte de carga y al transporte de masa de reactivos y productos, se logra una mayor fidelidad en la descripción de la relación entre la tensión aplicada en la celda y la densidad de corriente que la atraviesa. En consecuencia, la tensión total puede descomponerse en las distintas contribuciones de sobretensión, que se detallan a continuación.

Tensión de circuito abierto

La tensión de circuito abierto E es el potencial reversible de la reacción de electrólisis en ausencia de corriente. Se calcula a partir de la ecuación de Nernst 2.5. Cabe mencionar que el 2 es por el número de electrones transferidos en la producción de hidrógeno.

$$E = -\frac{\Delta G}{2F}, \quad (2.5)$$

donde:

- ΔG es la variación de energía libre de Gibbs.
- F es la constante de Faraday.

La variación de energía libre de Gibbs se obtiene a partir de la variación de energía libre de Gibbs en condiciones estándar, y de las correcciones por presión según la ecuación 2.6, como se muestra a continuación:

$$\Delta G = \Delta G^* + R T_{\text{cell}} \ln \left(\frac{p_{H_2} p_{O_2}^{1/2}}{p_{H_2O}} \right), \quad (2.6)$$

donde:

- p_{H_2} es la presión del hidrógeno.
- p_{O_2} es la presión del oxígeno.
- p_{H_2O} es la presión del agua.

En condiciones estándar, la variación de energía libre de Gibbs se calcula con la expresión de la ecuación 2.7.

$$\Delta G^* = \Delta H^* - T_{\text{cell}} \Delta S^*, \quad (2.7)$$

donde:

- ΔH es la variación entalpía.
- ΔS es la variación entropía.
- T_{cell} es Temperatura de la celda.

Sobretensión de activación

La sobretensión de activación corresponde al incremento de tensión necesario para superar las barreras cinéticas propias de las semirreacciones en ánodo y cátodo de un electrolizador PEM. Esta sobretensión refleja la energía adicional que debe ser proporcionada para iniciar la reacción de liberación de oxígeno en el ánodo y la reacción de liberación de hidrógeno en el cátodo, además de facilitar la transferencia de protones a través de la membrana de intercambio protónico. Este término resulta fundamental para caracterizar la cinética electroquímica de la celda y optimizar sus condiciones de operación, ya que repercute directamente en la eficiencia energética del proceso. En las ecuaciones 2.8 y 2.9 se presentan las expresiones para el ánodo y cátodo respectivamente.

$$\eta_{\text{act,an}} = \frac{R T_{\text{an}}}{a_{\text{an}} F} \operatorname{arcsinh}\left(\frac{i}{2 i_{0,\text{an}}}\right), \quad (2.8)$$

$$\eta_{\text{act,cat}} = \frac{R T_{\text{cat}}}{a_{\text{cat}} F} \operatorname{arcsinh}\left(\frac{i}{2 i_{0,\text{cat}}}\right), \quad (2.9)$$

donde:

- $\eta_{\text{act,an}}$ y $\eta_{\text{act,cat}}$ son las sobrepotenciales de activación en el ánodo y el cátodo, en V.
- R es la constante universal de los gases, en $\text{J mol}^{-1} \text{K}^{-1}$.
- T_{an} y T_{cat} son las temperaturas de operación del ánodo y del cátodo, en K.
- a_{an} y a_{cat} son los coeficientes de transferencia de carga, adimensionales.
- F es la constante de Faraday, en C mol^{-1} .
- i es la densidad de corriente, en A m^{-2} .
- $i_{0,\text{an}}$ y $i_{0,\text{cat}}$ son las densidades de corriente de intercambio en el ánodo y el cátodo, en A m^{-2} .

Estas expresiones permiten evaluar de manera independiente las pérdidas de activación en ánodo y cátodo, en función de la densidad de corriente i , las densidades de intercambio i_0 y las condiciones de temperatura de cada electrodo. Este análisis es esencial para el diseño y la optimización cinética de la celda electrolizadora PEM.

Sobretensión por difusión

La sobretensión por difusión se produce cuando la velocidad de generación de gas en la membrana-electrodo (MEA) supera la capacidad de extracción de las burbujas hacia el colector de corriente y la placa bipolar. Durante la electrólisis en un electrolizador PEM, la MEA permanece humedecida y genera burbujas de H_2 y O_2 que deben desplazarse a través de poros y canales para abandonar la célula; a densidades de corriente elevadas, este transporte no es suficientemente rápido, provocando que el agua se aleje de la superficie catalítica y retrase la reacción electroquímica. Este fenómeno se traduce en una resistencia adicional al paso de corriente, la cual se modela mediante la sobretensión por difusión, como se presenta en la ecuación 2.10.

$$\eta_{\text{diff}} = \frac{RT}{zF} \ln\left(\frac{C_1}{C_0}\right), \quad (2.10)$$

donde:

- η_{diff} es la sobretensión por difusión, en V.
- R es la constante universal de los gases, en $\text{J mol}^{-1} \text{K}^{-1}$.
- T es la temperatura de operación de la celda, en K.
- z es el número de electrones transferidos en la reacción electroquímica.
- F es la constante de Faraday, en C mol^{-1} .
- C_0 : concentración local de la especie reactiva en la superficie del electrodo, en mol m^{-3} .
- C_1 : concentración de la especie reactiva en el volumen del fluido (gas o líquido), en mol m^{-3} .

No obstante, en electrolizadores comerciales, este efecto rara vez se observa dentro de los rangos de operación normales, ya que los fabricantes establecen un límite máximo de densidad de corriente que garantiza un transporte de gas adecuado y mantiene la membrana completamente humedecida. Por este motivo, muchos modelos simplificados omiten explícitamente la contribución de η_{diff} , sustituyéndola por una restricción sobre la corriente máxima permitida para preservar la eficiencia del sistema y evitar el secado de la MEA [9].

Sobretensión óhmica

La sobretensión óhmica (η_{ohm}) representa la caída de tensión interna en la celda electrolítica debido a la resistencia al paso de corriente. Esta pérdida eléctrica es consecuencia de la conducción a través de los materiales que componen la celda, y puede descomponerse en tres contribuciones principales: las asociadas a los electrodos (η_{el}), a las placas bipolares (η_{pl}) y a la membrana de intercambio protónico (η_{mem}).

En la ecuación 2.11 se expresa la sobretensión óhmica total como la suma de estas contribuciones, mientras que en la ecuación 2.12 se define la resistencia óhmica total de la celda como la suma de las resistencias individuales.

$$\eta_{\text{ohm}} = \eta_{\text{el}} + \eta_{\text{pl}} + \eta_{\text{mem}} = R_{\text{ohm}} I_{\text{cell}}, \quad (2.11)$$

$$R_{\text{ohm}} = R_{\text{el}} + R_{\text{pl}} + R_{\text{mem}}, \quad (2.12)$$

donde:

- R_{el} corresponde a las pérdidas eléctricas en los electrodos y el colector de corriente, en Ω .
- R_{pl} representa la resistencia asociada a las placas bipolares, en Ω .
- R_{mem} es la resistencia iónica de la membrana, que depende de su espesor, conductividad y área activa, en Ω .
- R_{el} corresponde a las pérdidas eléctricas en los electrodos y el colector de corriente.
- R_{pl} representa la resistencia asociada a las placas bipolares.
- R_{mem} es la resistencia iónica de la membrana, que depende de su espesor, conductividad y área activa.

Cada una de estas resistencias puede modelarse mediante la expresión general:

$$R_* = \frac{\delta_*}{A_* \sigma_*}, \quad (* \in \{\text{el}, \text{pl}, \text{mem}\}), \quad (2.13)$$

donde:

- δ_* es el espesor del componente, en mm.
- A_* es el área efectiva de conducción, en m^2 .
- σ_* es la conductividad eléctrica o iónica del material, en S m^{-1} .

Finalmente, la expresión 2.4 puede reescribirse utilizando las ecuaciones presentadas anteriormente, dando lugar a la formulación mostrada en la ecuación 2.14.

$$V = K_1 + K_2 \operatorname{arcsinh}(K_3 I) + K_4 \operatorname{arcsinh}(K_5 I) + K_6 I, \quad (2.14)$$

donde los parámetros K_i están definidos como:

$$\begin{aligned} K_1 &= E, & K_2 &= \frac{R T_{\text{cell}}}{\alpha_{\text{an}} F}, & K_3 &= \frac{1}{2 i_{0,\text{an}}}, \\ K_4 &= \frac{R T_{\text{cell}}}{\alpha_{\text{cat}} F}, & K_5 &= \frac{1}{2 i_{0,\text{cat}}}, & K_6 &= \frac{d_m}{\sigma_m} + r_e. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Flujo de masa

La producción de hidrógeno se obtiene a partir de la ley de Faraday. Primero se calcula el flujo molar:

$$\dot{n}_{H_2} = \frac{I}{2 F}, \quad (2.16)$$

donde $\dot{n}_{H_2}$ se expresa en mol s^{-1} .

A continuación, se convierte a flujo másico usando la masa molar M_{H_2} :

$$\dot{m}_{H_2} = \dot{n}_{H_2} M_{H_2} = \frac{I M_{H_2}}{2 F}, \quad (2.17)$$

donde $\dot{m}_{H_2}$ se expresa en kg s^{-1} y M_{H_2} en kg mol^{-1} .

Finalmente, para expresar el flujo másico en toneladas por hora, se realiza la conversión de unidades correspondiente:

$$\dot{m}_{H_2} = \frac{I M_{H_2} 3600}{2 F 1000}, \quad (2.18)$$

donde $\dot{m}_{H_2}$ se expresa en t h^{-1} .

2.3. Enfoques de modelación para la planificación de sistemas de hidrógeno

2.3.1. Hidrógeno en sistemas energéticos multiproducto

En [11] se propone un enfoque de sistemas energéticos multi-escala basado en un modelo MILP (Programación Lineal Entera Mixta) de tipo red, orientado a optimizar simultáneamente la producción, conversión, almacenamiento y transporte de múltiples portadores energéticos y químicos. La estructura considerada integra rutas fósiles y renovables para producir hidrógeno, amoníaco, metanol y combustibles sintéticos, mientras que el hidrógeno actúa como un nodo energético central que permite acoplar y flexibilizar distintas cadenas de conversión.

Una contribución relevante de [11] es la representación de la variabilidad temporal de los recursos renovables mediante un esquema que incorpora escalas horarias, diarias y estacionales en un problema de planificación. Los resultados del estudio indican que la integración sectorial puede reducir los costos totales hasta en un 17 %, y que las rutas basadas en gas natural continúan siendo competitivas para la producción de hidrógeno y derivados en ciertos contextos, mientras que las fuentes renovables resultan más ventajosas para la generación eléctrica.

Si bien estos modelos permiten analizar configuraciones complejas a gran escala, suelen emplear representaciones lineales y simplificadas del electrolizador, lo que limita su capacidad para capturar

los efectos de operación fuera del punto nominal, las variaciones de eficiencia y las dinámicas no lineales relevantes en escenarios con alta variabilidad de generación.

2.3.2. Marcos integrados para el diseño de centros de hidrógeno verde

En [12] presentan un marco integrado de herramientas de código abierto diseñado para evaluar oportunidades de producción de hidrógeno verde a nivel territorial, combinando desde filtros de zonificación hasta simulaciones horarias de producción renovable y operación del electrolizador. Este enfoque considera criterios como disponibilidad de agua, calidad del recurso renovable, acceso a infraestructura eléctrica y logística, y potencial de almacenamiento geológico.

El marco incluye modelos horarios de generación eólica y solar, una herramienta de cálculo del costo nivelado del hidrógeno (LCOH) y un algoritmo que identifica configuraciones óptimas de capacidad mediante un barrido sistemático de parámetros. Entre los principales hallazgos, [12] destaca la fuerte dependencia del costo del hidrógeno respecto del factor de carga del electrolizador, así como los compromisos entre sobredimensionamiento de renovables, inclusión de sistemas de almacenamiento y conexión a red.

Sin embargo, al igual que en [11], el electrolizador es representado mediante eficiencias constantes o dependientes del factor de carga promedio, lo que no refleja adecuadamente su comportamiento electroquímico real ni el punto de operación variable impuesta por las energías renovables.

2.4. Almacenamiento de hidrógeno

El almacenamiento de hidrógeno es una etapa crítica en los sistemas de hidrógeno verde, ya que permite desacoplar temporalmente la producción, frecuentemente intermitente por la variabilidad de las fuentes renovables, de su consumo industrial o energético. Entre las principales tecnologías disponibles se encuentran el almacenamiento físico mediante compresión, el almacenamiento criogénico en estado líquido y el almacenamiento en materiales sólidos como hidruros metálicos o estructuras porosas [1, 13].

2.4.1. Almacenamiento por compresión

El almacenamiento mediante compresión en tanques de alta presión es la alternativa más utilizada en aplicaciones industriales y de investigación. Esta tecnología presenta una alta madurez comercial, buenos niveles de seguridad y costos relativamente bajos en comparación con soluciones criogénicas o basadas en materiales avanzados. Los sistemas de almacenamiento por compresión operan habitualmente en rangos de presión entre 200 y 700 bar, dependiendo de la aplicación y del diseño mecánico de los recipientes a presión [14]. En aplicaciones estacionarias con requerimientos de almacenamiento intermedio, presiones cercanas a 200 bar son especialmente comunes, ya que permiten obtener densidades adecuadas sin recurrir a materiales extremadamente especializados.

Los recipientes suelen estar fabricados en acero o materiales compuestos y certificados bajo

normativas como ISO 11119 o DOT. Para capacidades mayores se emplean conjuntos modulares de cilindros o estanques equivalentes de gran volumen. Por ejemplo, a 200 bar y temperatura ambiente, la densidad del hidrógeno se encuentra aproximadamente entre 14 y 16 kg/m³, valor que depende del factor de compresibilidad del gas [15].

2.4.2. Propiedades termodinámicas del hidrógeno

El comportamiento termodinámico del hidrógeno a temperatura ambiente puede aproximarse al de un gas ideal en condiciones de presión moderada. Sin embargo, para presiones superiores a aproximadamente 20 a 30 bar, el hidrógeno presenta desviaciones relevantes respecto del comportamiento ideal. Para representar estas desviaciones se emplea el factor de compresibilidad Z . Este factor se incorpora a la ecuación de estado general de gas real, que se expresa como:

$$PV = nRTZ, \quad (2.19)$$

donde:

- P es la presión del gas, en Pa.
- V es el volumen del sistema, en m³.
- n es la cantidad de sustancia, en mol.
- R es la constante universal de los gases, en J mol⁻¹ K⁻¹.
- T es la temperatura, en K.
- Z es el factor de compresibilidad.

Para hidrógeno comprimido a $T \approx 293$ K, el valor de Z generalmente se encuentra entre 1.0 y 1.3 dependiendo de la presión. A 200 bar se obtienen valores típicos en torno a $Z \approx 1.12$ a 1.15 [16]. Estas desviaciones hacen necesario utilizar propiedades termodinámicas reales al modelar tanques de almacenamiento presurizado.

En este trabajo se emplean valores reales de densidad y compresibilidad del hidrógeno obtenidos desde la base de datos Thermophysical Properties of Fluid Systems del NIST Chemistry WebBook [16], para una temperatura fija de $T = 293.15$ K. Estos datos permiten construir una representación precisa de la relación entre presión, masa almacenada y factor de compresibilidad, lo cual constituye la base del modelo no lineal desarrollado más adelante.

2.4.3. Consideraciones de diseño y seguridad

El diseño de sistemas de almacenamiento presurizado debe considerar aspectos estructurales y normativos como límites de presión admisible, dispositivos de alivio ante sobrepresión, ventilación adecuada y compatibilidad de materiales con hidrógeno. Aunque estos elementos no se modelan explícitamente en este trabajo, se incorporan de manera implícita mediante la definición de un

volumen de almacenamiento fijo y un rango operacional de presión basado en prácticas industriales reales.

Si bien no existe un valor universalmente normado de presión residual mínima para estanques de hidrógeno comprimido, en aplicaciones industriales relacionadas con cilindros de aire respirable operados entre 200 y 300 bar se establece que estos recipientes no deben ser completamente depresurizados para evitar el ingreso de humedad y la corrosión interna. Asimismo, fabricantes de equipos SCBA recomiendan mantener presiones residuales típicamente entre 20 y 35 bar.

Considerando estas prácticas de diseño en recipientes presurizados de características similares, en este trabajo se asume un valor mínimo de operación de 20 bar para el estanque de hidrógeno modelado.

2.5. Almacenamiento de agua desmineralizada

El suministro de agua desmineralizada constituye un elemento fundamental en el balance de planta de sistemas de producción de hidrógeno verde, puesto que el electrolizador requiere un caudal continuo y estable de agua de alta pureza para asegurar un funcionamiento adecuado y evitar degradación prematura de sus componentes. Para garantizar esta continuidad de operación, es habitual incorporar estanques de almacenamiento que operan como unidades de amortiguación (*buffer tanks*), estabilizando las variaciones entre la producción de agua tratada y el consumo instantáneo del electrolizador.

2.5.1. Modelación del estanque de agua desmineralizada

En la literatura de optimización de sistemas energéticos, los dispositivos de almacenamiento intermedio se representan habitualmente mediante modelos basados en inventarios, donde el volumen almacenado se describe a partir de un balance de masa lineal. En [17] destacan que, para fines de optimización a nivel de planta, la descripción del comportamiento dinámico de los depósitos líquidos no requiere una modelación termodinámica detallada, dado que su función principal es la gestión de inventarios y no la acumulación de energía en forma significativa.

Consistentemente con este enfoque, el estanque de agua desmineralizada se modela mediante la ecuación:

$$V(t) = V(t - 1) + (Q_{in}(t) - Q_{out}(t)) \Delta t \quad (2.20)$$

donde $V(t)$ representa el volumen almacenado en el período t , $Q_{in}(t)$ y $Q_{out}(t)$ corresponden a los caudales de entrada y salida, respectivamente, y Δt es la duración del período de modelación. Este tipo de representación es ampliamente utilizado en trabajos de optimización de sistemas híbridos, incluyendo aquellos que integran electrolizadores y unidades de almacenamiento auxiliar, debido a su simplicidad y compatibilidad con formulaciones lineales o no lineales de gran escala [17].

2.5.2. Consideraciones operativas

Aunque la referencia utilizada no especifica límites operativos particulares para estanques atmosféricos, sí enfatiza la importancia de tratar el volumen como una variable acotada dentro de un intervalo operativo para garantizar factibilidad hidráulica y continuidad operacional del proceso. En este trabajo, el estanque se representa mediante un volumen equivalente cuyo nivel se restringe a un rango de operación definido por criterios de diseño y operación propios del caso de estudio, manteniendo coherencia con la literatura que modela estos elementos principalmente como unidades de regulación de inventario más que como equipos de almacenamiento energético.

En consecuencia, la modelación adoptada captura el rol esencial del estanque de agua desmineralizada en el sistema, como un amortiguador de variaciones de caudal y asegurar el suministro estable necesario para la operación del electrolizador, sin introducir complejidades que no aportan beneficios en el análisis de optimización a nivel de planta.

2.5.2.a. Rango operativo de niveles

Manuales de operación y control como el *Nalco Water Handbook* y trabajos clásicos de diseño de tanques de amortiguación [18] señalan que niveles demasiado bajos comprometen la succión de bombas, generan cavitación y reducen la capacidad del estanque para absorber variaciones de caudal. Por lo tanto, es necesario considerar un volumen mínimo de almacenamiento.

2.6. Almacenamiento de amoníaco

El amoníaco anhidro puede almacenarse de diversas formas según la escala de la instalación, los requerimientos operativos y el propósito de uso del producto. El informe [19] identifica dos modalidades principales de almacenamiento utilizadas actualmente en la industria, almacenamiento presurizado a temperatura ambiente y almacenamiento refrigerado a presión atmosférica. Estas tecnologías presentan diferencias relevantes en cuanto a costos, capacidades y aplicabilidad a plantas de producción de gran escala.

2.6.1. Almacenamiento presurizado

El almacenamiento presurizado consiste en mantener el amoníaco en estado líquido a temperatura ambiente mediante presiones elevadas. Conforme a [19], esta modalidad se utiliza principalmente en aplicaciones de menor escala o para distribución local, donde el volumen requerido es relativamente reducido y no se justifica la instalación de un sistema de refrigeración. Los tanques presurizados se emplean típicamente para capacidades del orden de algunos cientos a pocos miles de metros cúbicos.

A pesar de no requerir enfriamiento, su aplicabilidad en plantas de producción de gran tamaño es limitada, dado que los costos estructurales aumentan significativamente con el volumen, y el

almacenamiento a alta presión se vuelve poco competitivo para inventarios de decenas de miles de toneladas.

2.6.2. Almacenamiento refrigerado a presión atmosférica

Para instalaciones de producción industrial de mediana y gran escala, el almacenamiento refrigerado a presión atmosférica es la tecnología predominante. Según [19], el amoníaco se almacena típicamente a -33°C y aproximadamente 1 atm, lo que permite mantener el fluido en fase líquida en condiciones estables. Esta alternativa es ampliamente utilizada debido a que permite alcanzar capacidades del orden de decenas de miles de metros cúbicos por tanque, con menores costos unitarios y mejor desempeño térmico.

Los tanques refrigerados cuentan con aislamiento térmico, sistemas de refrigeración destinados a compensar el calor ganado, y configuraciones de simple, doble o total contención. Su escala y diseño los convierten en la opción estándar para plantas modernas de síntesis de amoníaco, especialmente cuando se requiere un volumen significativo de almacenamiento como buffer operativo.

2.6.3. Modelación y relevancia operativa

La operación a temperatura y presión prácticamente constantes (-33°C y 1 atm) permite representar el almacenamiento refrigerado mediante un modelo lineal basado en inventario, sin necesidad de incorporar ecuaciones termodinámicas complejas. En consecuencia, para aplicaciones de optimización en plantas integradas de hidrógeno y amoníaco, el tanque puede modelarse mediante un balance de masa lineal y límites de capacidad, coherente con la práctica descrita en [19].

El almacenamiento refrigerado permite absorber variaciones en la producción y demanda, entregar un margen de operación seguro y sostener la continuidad del proceso Haber–Bosch. Su capacidad buffer resulta especialmente relevante para plantas de gran escala, donde el flujo de producción es continuo y las variaciones externas pueden gestionarse mediante inventario disponible.

En consideración a lo anterior, y dado que este estudio se enfoca en una planta de producción de amoníaco de escala industrial, se adopta el almacenamiento refrigerado a presión atmosférica como la tecnología de referencia para efectos de modelación. Esta elección permite capturar adecuadamente el comportamiento operativo del inventario y mantener una formulación lineal compatible con el marco de optimización utilizado en este trabajo.

2.7. Sistema de almacenamiento de energía en baterías

Los sistemas de almacenamiento en baterías (BESS, por sus siglas en inglés) se han consolidado como una tecnología clave para la integración eficiente de energías renovables variables. Su capacidad para absorber energía en períodos de excedente y liberarla cuando la generación es

insuficiente permite desacoplar la producción renovable de la demanda y mitigar la variabilidad inherente a tecnologías como la eólica. En sistemas aislados, donde no existe respaldo de la red eléctrica, los BESS resultan esenciales para garantizar un suministro continuo y estable, actuando como el principal mecanismo de equilibrio entre generación y demanda [20].

El funcionamiento básico de un BESS se estructura en dos modos operativos:

- **Carga:** el sistema almacena energía excedente proveniente de la generación renovable.
- **Descarga:** el sistema suministra energía almacenada cuando la generación no satisface la demanda.

El documento base destaca que las baterías de ion-litio predominan en este tipo de aplicaciones debido a su alta densidad energética, elevada eficiencia, rápida respuesta dinámica y larga vida útil, características especialmente adecuadas para compensar la variabilidad rápida de la energía renovable [20].

2.7.1. Dinámica del estado de carga

El estado de carga (*State of Charge*, SOC) indica la fracción de energía disponible respecto de la capacidad útil del sistema. Su evolución se modela mediante un balance energético en tiempo discreto, considerando las potencias de carga y descarga junto con las eficiencias asociadas. El documento remarca que la correcta gestión del SOC es esencial para mantener la confiabilidad del sistema y evitar la degradación prematura de la batería [20].

2.7.2. Límites operacionales

El funcionamiento de un BESS está restringido por diversas condiciones técnicas que protegen su integridad y prolongan su vida útil. En primer lugar, existen límites de potencia asociados a las tasas máximas de carga y descarga que el convertidor puede procesar de manera segura. Asimismo, el sistema debe operar dentro de límites de capacidad, lo que implica mantener el SOC dentro de un rango operativo seguro que evite condiciones de sobrecarga o descarga profunda. Finalmente, en el caso particular de las baterías de ion-litio, se recomiendan ventanas de operación que eviten niveles extremos de SOC, dado que estas condiciones aceleran los procesos de degradación y reducen la vida útil del sistema.

2.7.3. Aplicación en sistemas con generación renovable

Aunque el documento se centra en instalaciones fotovoltaicas [20], los principios descritos se extienden naturalmente a sistemas eólicos. En configuraciones aisladas, el BESS cumple un rol fundamental al:

- amortiguar la variabilidad rápida de la potencia eólica,

- garantizar la continuidad del suministro eléctrico en ausencia de viento,
- entregar una potencia más estable a cargas sensibles, como electrolizadores,
- reducir la necesidad de sobredimensionar la generación renovable.

El artículo destaca que el uso de BESS incrementa la autosuficiencia energética y reduce la dependencia de recursos externos, principios que en un sistema aislado se traducen en una operación más confiable y con menor riesgo de pérdida de carga.

2.7.4. Justificación tecnológica

Si bien existen diversas tecnologías de almacenamiento, el documento identifica a las baterías de ion-litio como la opción más adecuada para aplicaciones con energías renovables variables. Esto se debe a su alta eficiencia, adecuada respuesta dinámica, madurez tecnológica y sostenido descenso de costos [20]. En consecuencia, su uso en sistemas eólicos aislados resulta plenamente justificado, ya que permiten gestionar de forma eficaz la intermitencia del recurso y asegurar un suministro continuo hacia las cargas críticas del sistema.

Capítulo 3

Metodología

3.1. Modelo Lineal

La presente sección describe la formulación matemática del modelo de optimización lineal propuesto para representar el funcionamiento de una planta de producción de hidrógeno y amoníaco verde alimentada a través de un parque eólico. Este modelo constituye la base estructural del sistema, sobre la cual se integrará posteriormente la representación no lineal del electrolizador presentada en la siguiente sección.

La formulación se basa en una representación tipo red, en la cual los distintos procesos se estructuran mediante nodos (entrada/salida de recursos) y arcos (flujos), permitiendo capturar la dinámica del sistema de manera generalizada y escalable.

El modelo se implementa como una formulación de programación lineal, utilizando conjuntos de equipos, flujos y períodos, y considerando restricciones técnicas de operación, balances de masa y energía.

3.1.1. Conjuntos

En esta sección se definen todos los conjuntos empleados en el modelo: los períodos temporales, que abarcan todas las horas del horizonte de simulación; los arcos, que representan las conexiones o flujos entre nodos del sistema; los equipos o procesos de transformación, que incluyen electrolizadores, ASU, reactores, BESS y demás unidades; así como cualquier otra clasificación de elementos, por ejemplo, fuentes de energía, unidades de almacenamiento, necesaria para describir por completo la estructura y las restricciones del problema de optimización. Cada conjunto se introducirá mediante su notación matemática y su significado en el contexto del sistema.

Períodos

Sea $\mathcal{T}$ el conjunto de períodos horarios de un año, de modo que cada $t \in \mathcal{T}$ representa una hora.

Nodos

Sea $\mathcal{N}$ el conjunto de nodos del sistema, de modo que cada $n \in \mathcal{N}$ corresponde a un punto de interconexión en la red donde pueden generarse, consumirse o transportarse flujos de recursos o productos.

Arcos

Sea $\mathcal{A}$ el conjunto de arcos que representan las conexiones dirigidas entre nodos del sistema. Cada arco $a \in \mathcal{A}$ describe una trayectoria de transporte entre un nodo de origen y un nodo de destino.

Cuando se requiera identificar los extremos del arco, se utilizará la notación $a_{i,j} \in \mathcal{A}$, donde i es el nodo de origen y j el nodo de destino.

Equipos

Sea $\mathcal{I}$ el conjunto de equipos o procesos de transformación del sistema, de modo que cada elemento $f \in \mathcal{I}$ representa una unidad específica (electrolizador, ASU, reactor Haber–Bosch, BESS, desaladora, etc.). Este conjunto engloba todas las máquinas y componentes que intervienen en las conversiones de energía y materia dentro del modelo.

Se definen los siguientes subconjuntos específicos de instalaciones:

- I_{source} : Conjunto de fuentes que proporcionan el producto inicial (por ejemplo, energía o agua).
- $I_{transform}$: Conjunto de *centros de transformación* capaces de convertir uno o más productos de entrada en un producto de salida.
- $I_{transport}$: Conjunto de *instalaciones de transporte* que mueven un producto desde una instalación a otra.
- $I_{storage}$: Conjunto de *instalaciones de almacenamiento* que pueden retener un producto para equilibrar la oferta y la demanda a lo largo del tiempo.
- I_{sump} : Conjunto de *instalaciones receptoras* que reciben un producto sin generar otro, cumpliendo un rol de destino final.
- $I_{spillage}$: Conjunto de *instalaciones ficticias* con capacidad ilimitada de recepción, utilizadas para modelar excedentes de producción que no pueden ser aprovechados.

Subconjuntos de arcos

En las ecuaciones 3.1 y 3.2, para cada equipo o proceso $f \in \mathcal{I}$, se definen los subconjuntos de arcos asociados a sus nodos de entrada y salida. Sea $n_f^{\text{in}} \in \mathcal{N}$ el nodo de entrada y $n_f^{\text{out}} \in \mathcal{N}$ el nodo de salida del equipo f . Se definen los siguientes subconjuntos de arcos:

$$\delta_f^- = \left\{ a_{i,j} \in \mathcal{A}_f \mid j = n_f^{\text{in}} \right\}, \quad (3.1)$$

$$\delta_f^+ = \left\{ a_{i,j} \in \mathcal{A}_f \mid i = n_f^{\text{out}} \right\}. \quad (3.2)$$

Estos conjuntos representan, respectivamente, los arcos que ingresan al nodo de entrada y los que salen desde el nodo de salida del equipo f .

En la ecuación 3.3 se presenta el caso de que el equipo cuente con múltiples nodos de entrada, estos se indexan mediante $\ell_{\text{in}} = 1, 2, \dots, L_f^{\text{in}}$, siendo $n_{f,\ell_{\text{in}}}^{\text{in}} \in \mathcal{N}$ el nodo correspondiente al insumo ℓ_{in} . Los subconjuntos de arcos entrantes se definen como:

$$\delta_{f,\ell_{\text{in}}}^- = \left\{ a_{i,j} \in \mathcal{A}_f \mid j = n_{f,\ell_{\text{in}}}^{\text{in}} \right\}, \quad \forall \ell_{\text{in}} = 1, \dots, L_f^{\text{in}}. \quad (3.3)$$

De manera análoga, en la ecuación 3.4 se presenta cuando el equipo posee múltiples nodos de salida, estos se indexan mediante $\ell_{\text{out}} = 1, 2, \dots, L_f^{\text{out}}$, con $n_{f,\ell_{\text{out}}}^{\text{out}} \in \mathcal{N}$. En este caso, los subconjuntos de arcos salientes se definen como:

$$\delta_{f,\ell_{\text{out}}}^+ = \left\{ a_{i,j} \in \mathcal{A}_f \mid i = n_{f,\ell_{\text{out}}}^{\text{out}} \right\}, \quad \forall \ell_{\text{out}} = 1, \dots, L_f^{\text{out}}. \quad (3.4)$$

3.1.2. Función objetivo

En los modelos, el objetivo principal es maximizar la producción total de amoníaco en el horizonte de planificación. Para ello, se considera que el amoníaco disponible para exportación se encuentra asociado al nodo que representa la salida del reactor Haber–Bosch. En la ecuación 3.5 se presenta la función objetivo:

$$\text{máx } Z = \sum_{t \in \mathcal{T}} \sum_{a \in \delta_{hb}^+} x_a(t), \quad (3.5)$$

donde:

- δ_{hb}^+ es la subconjunto de arcos que salen desde el nodo de salida del reactor Haber–Bosch,

es decir, se maximiza la suma de los flujos de amoníaco que abandonan el nodo de salida del reactor Haber–Bosch a lo largo de todo el horizonte temporal.

Esta formulación orienta la operación coordinada del electrolizador, la unidad de separación de aire, el reactor Haber–Bosch y los sistemas de almacenamiento, de manera que se utilicen los recursos disponibles para maximizar la producción final de NH_3 en el nodo de salida definido.

3.1.3. Restricciones

En esta sección se presentan las restricciones que conforman la formulación matemática del modelo. Estas se estructuran según los distintos equipos y procesos que integran la planta, generación renovable, electrólisis, separación de aire, síntesis de amoníaco, sistemas de almacenamiento y unidades auxiliares, con el fin de reflejar sus límites operativos, balances de masa y energía, y relaciones físico-químicas inherentes.

Cada conjunto de restricciones busca garantizar una representación coherente y físicamente consistente del funcionamiento de la planta híbrida, permitiendo que la función objetivo se optimice únicamente dentro del espacio factible determinado por las capacidades tecnológicas y las condiciones operativas de cada unidad.

3.1.3.a. Fuentes

Las restricciones presentadas en esta sección aplican exclusivamente al parque eólico, dado que tanto el agua de mar como el aire se consideran recursos ilimitados para los fines del modelo, tal como se estableció en el marco teórico. De este modo, el parque eólico constituye la única fuente primaria cuya disponibilidad se encuentra efectivamente acotada por condiciones físicas y operacionales.

Capacidad

El objetivo de esta restricción es imponer el límite máximo de energía eléctrica que puede generar el parque eólico en cada período del horizonte de planificación. Para cada instalación $f \in I_{\text{source}}$ y para cada período $t \in \mathcal{T}$, la capacidad de generación está determinada por la potencia disponible según el recurso eólico y los parámetros técnicos del conjunto de aerogeneradores. La ecuación 3.6 muestra la formulación matemática de esta restricción, la cual se expresa como:

$$\sum_{a \in \delta_f^+} x_a(t) \leq CAP_f, \quad \forall f \in I_{\text{source}}, \forall t \in \mathcal{T}, \quad (3.6)$$

donde:

- $x_a(t)$ representa el flujo a través del arco $a_{i,j}$ en el período t .
- δ_f^+ es el conjunto de arcos salientes desde la instalación fuente f .
- CAP_f denota la capacidad máxima de producción del producto k en la fuente f .

Balance de producción

Esta restricción asegura que la energía generada por la fuente primaria sea igual a la cantidad efectivamente inyectada a la red de procesos durante cada período del horizonte temporal. Con ello se garantiza que toda la energía disponible en la fuente durante un período determinado se traduzca íntegramente en los flujos que ingresan al sistema. De este modo, la generación eólica no puede exceder ni quedar por debajo de la energía realmente utilizada, asegurando consistencia entre la producción exógena y el flujo efectivo que alimenta a la planta. La ecuación 3.7 presenta la formulación matemática de esta relación, la cual se expresa como:

$$\sum_{a \in \delta_f^+} x_a(t) = \phi_f(t), \quad \forall f \in I_{\text{source}}, \forall t \in \mathcal{T}, \quad (3.7)$$

donde:

- $x_a(t)$ es el flujo a través del arco a en el período t .
- δ_f^+ representa el conjunto de arcos salientes desde la instalación fuente f .
- $\phi_f(t)$ es una serie temporal exógena que entrega la cantidad de energía disponible para ser inyectado al sistema por la fuente f en el tiempo t .

3.1.3.b. Almacenamientos

Las instalaciones de almacenamiento cumplen un rol fundamental dentro del sistema energético, permitiendo desacoplar temporalmente los distintos procesos. En esta sección se describen las restricciones que gobiernan su operación, las cuales aplican a todas las unidades $f \in I_{\text{storage}}$ y a cada período del horizonte temporal $t \in \mathcal{T}$.

Capacidad de entrada

Se limita la cantidad máxima de producto que puede ingresar a través de todos los arcos que llegan a la instalación de almacenamiento. La ecuación 3.8 presenta la formulación matemática de esta restricción, expresada como:

$$\sum_{a \in \delta_f^-} x_a(t) \leq \eta_f^{\text{in}} \quad \forall f \in I_{\text{storage}}, \forall t \in \mathcal{T}, \quad (3.8)$$

donde:

- $x_a(t)$ representa el flujo en el arco a en el período de tiempo t .
- δ_f^- es el conjunto de arcos entrantes a la instalación de almacenamiento f .
- η_f^{in} representa la capacidad máxima de entrada del sistema.

Capacidad de salida

De manera análoga a la restricción anterior, se limita la cantidad total de insumo o producto que puede ser extraído desde el sistema de almacenamiento. La ecuación 3.9 presenta la formulación matemática de esta restricción, expresada como:

$$\sum_{a \in \delta_f^+} x_a(t) \leq \eta_f^{\text{out}} \quad \forall f \in I_{\text{storage}}, \forall t \in \mathcal{T}, \quad (3.9)$$

donde:

- $x_a(t)$ representa el flujo en el arco a en el período de tiempo t .

- δ_f^+ es el conjunto de arcos salientes del almacenamiento f .
- η_f^{out} representa la capacidad máxima de descarga del sistema.

Capacidad total de almacenamiento

El estado de carga del almacenamiento no debe exceder su capacidad máxima. La ecuación 3.10 presenta la formulación matemática de esta restricción, expresada como:

$$y_f(t) \leq \eta_f^{\text{cap}} \quad \forall f \in I_{\text{storage}}, \forall t \in \mathcal{T}, \quad (3.10)$$

donde:

- $y_f(t)$ representa el estado de carga (nivel de almacenamiento) de la instalación f en el período t .
- η_f^{cap} denota la capacidad máxima de almacenamiento de la instalación f .

Ecuaciones de balance dinámico

En los sistemas de almacenamiento $f \in I_{\text{storage}}$, la variable $y_f(t)$ representa el estado de carga de la instalación al final de cada período t . Esta variable contabiliza la cantidad acumulada del producto almacenado después de considerar los flujos de entrada y salida que ocurren durante dicho intervalo.

Para modelar su evolución temporal, se emplean ecuaciones de balance dinámico que describen cómo varía el estado de carga en función del flujo neto entre los arcos entrantes y salientes. En este modelo, y_f^{init} se introduce como una variable adicional que representa el estado de carga en el instante previo al primer período. Su valor es determinado por la optimización, mientras que los estados para los períodos subsiguientes se calculan de manera recursiva mediante las ecuaciones de balance dinámico. Las ecuaciones 3.11 y 3.12 presentan las expresiones correspondientes al balance dinámico.

1. **Primer período** ($t = 1$): El balance dinámico para el primer período se define como:

$$y_f(1) - y_f^{\text{init}} = \sum_{a \in \delta_f^-} x_a(1) - \sum_{a \in \delta_f^+} x_a(1), \quad \forall f \in I_{\text{storage}}, \quad (3.11)$$

donde:

- δ_f^- es el conjunto de arcos que ingresan al nodo de almacenamiento f .
- δ_f^+ es el conjunto de arcos que salen desde dicho nodo.
- $x_a(t)$ es el flujo a través del arco a en el período t .

2. **Períodos subsiguientes** ($t > 1$): A partir del segundo período, el estado de carga se define según:

$$y_f(t) - y_f(t-1) = \sum_{a \in \delta_f^-} x_a(t) - \sum_{a \in \delta_f^+} x_a(t), \quad \forall f \in I_{\text{storage}}, \forall t = 2, \dots, T. \quad (3.12)$$

3.1.3.c. Centros de transformación tipo 1

Los centros de transformación tipo 1 corresponden a instalaciones que operan con un único insumo y generan un único producto. Estos procesos se agrupan en el subconjunto $I_{\text{transform}}^{(1)} \subseteq \mathcal{I}$. Cada instalación $f \in I_{\text{transform}}^{(1)}$ cuenta con un único nodo de entrada n_f^{in} y un único nodo de salida n_f^{out} . Las siguientes restricciones describen su operación en cada período del horizonte temporal $\mathcal{T}$.

Límite de capacidad de entrada

Para cada instalación, se restringe el flujo máximo que ingresa a través del nodo n_f^{in} , el cual no debe exceder la capacidad de entrada cap_f^{in} . Esta restricción se presenta en la ecuación 3.13.

$$\sum_{a \in \delta_f^-} x_a(t) \leq \text{cap}_f^{\text{in}} \quad \forall f \in I_{\text{transform}}^{(1)}, \quad \forall t \in \mathcal{T}, \quad (3.13)$$

donde:

- δ_f^- es el conjunto de arcos que ingresan al nodo de entrada de la instalación f .
- cap_f^{in} representa la capacidad máxima de ingreso al nodo de entrada.

Límite de capacidad de salida

Del mismo modo, el flujo total que sale desde el nodo n_f^{out} no puede superar la capacidad de salida $\text{cap}_f^{\text{out}}$. Esta restricción se presenta en la ecuación 3.14.

$$\sum_{a \in \delta_f^+} x_a(t) \leq \text{cap}_f^{\text{out}} \quad \forall f \in I_{\text{transform}}^{(1)}, \quad \forall t \in \mathcal{T}, \quad (3.14)$$

donde:

- δ_f^+ es el conjunto de arcos que emergen desde el nodo de salida de la instalación f .
- $\text{cap}_f^{\text{out}}$ corresponde a la capacidad máxima de despacho del producto generado.

Relación de transformación entre insumo y producto

La relación entre el único insumo y el único producto transformado se representa mediante un coeficiente de conversión lineal α_f , el cual indica la proporción entre la cantidad de producto generado y la cantidad de insumo consumido. Esta relación se modela mediante la ecuación 3.15.

$$\sum_{a \in \delta_f^-} x_a(t) = \alpha_f \sum_{a \in \delta_f^+} x_a(t) \quad \forall f \in I_{\text{transform}}^{(1)}, \quad \forall t \in \mathcal{T}. \quad (3.15)$$

3.1.3.d. Centros de transformación tipo 2

Los centros de transformación tipo 2 corresponden a instalaciones que requieren dos flujos de entrada simultáneos para generar un único producto de salida. Estos procesos se agrupan en el subconjunto $I_{\text{transform}}^{(2)} \subseteq \mathcal{I}$. Cada instalación $f \in I_{\text{transform}}^{(2)}$ posee dos nodos de entrada, $n_{f,1}^{\text{in}}$ y $n_{f,2}^{\text{in}}$, y un único nodo de salida n_f^{out} . Las siguientes restricciones describen la operación de estas instalaciones en cada período del horizonte temporal $\mathcal{T}$.

Límites de capacidad de entrada

Cada centro de transformación tipo 2 recibe dos insumos, asociados a los nodos de entrada $n_{f,1}^{\text{in}}$ y $n_{f,2}^{\text{in}}$. Para cada uno de ellos, el flujo total que ingresa a la instalación debe respetar su capacidad máxima. Estas condiciones se expresan en las ecuaciones 3.16 y 3.17.

$$\sum_{a \in \delta_{f,1}^-} x_a(t) \leq \text{cap}_{f,1}^{\text{in}} \quad \forall f \in I_{\text{transform}}^{(2)}, \quad \forall t \in \mathcal{T}, \quad (3.16)$$

$$\sum_{a \in \delta_{f,2}^-} x_a(t) \leq \text{cap}_{f,2}^{\text{in}} \quad \forall f \in I_{\text{transform}}^{(2)}, \quad \forall t \in \mathcal{T}, \quad (3.17)$$

donde:

- $\delta_{f,1}^-$ es el conjunto de arcos que abastecen el nodo de entrada 1 de la instalación f .
- $\delta_{f,2}^-$ es el conjunto de arcos que abastecen el nodo de entrada 2 de la instalación f .
- $\text{cap}_{f,1}^{\text{in}}$ y $\text{cap}_{f,2}^{\text{in}}$ representan las capacidades máximas de entrada en los nodos 1 y 2 respectivamente.

Límite de capacidad de salida

El flujo total del producto generado por la instalación se expulsa a través del nodo de salida n_f^{out} . Este flujo no puede superar la capacidad máxima de despacho establecida para el proceso. La ecuación 3.18 presenta esta restricción.

$$\sum_{a \in \delta_f^+} x_a(t) \leq \text{cap}_f^{\text{out}} \quad \forall f \in I_{\text{transform}}^{(2)}, \quad \forall t \in \mathcal{T}, \quad (3.18)$$

donde:

- δ_f^+ es el conjunto de arcos salientes desde el nodo de salida de la instalación f .
- $\text{cap}_f^{\text{out}}$ es la capacidad máxima de despacho del producto final.

Relación de transformación

La producción del proceso está determinada por las proporciones en que cada uno de los dos insumos contribuye a la generación del producto final. Esta relación se modela mediante los coeficientes lineales de transformación $\alpha_{f,1}$ y $\alpha_{f,2}$, asociados a cada uno de los nodos de entrada, y se expresa mediante las ecuaciones 3.19 y 3.20.

$$\sum_{a \in \delta_{f,1}^-} x_a(t) = \alpha_{f,1} \sum_{a \in \delta_f^+} x_a(t) \quad \forall f \in I_{\text{transform}}^{(2)}, \forall t \in \mathcal{T}, \quad (3.19)$$

$$\sum_{a \in \delta_{f,2}^-} x_a(t) = \alpha_{f,2} \sum_{a \in \delta_f^+} x_a(t) \quad \forall f \in I_{\text{transform}}^{(2)}, \forall t \in \mathcal{T}, \quad (3.20)$$

donde:

- $\alpha_{f,1}$ y $\alpha_{f,2}$ son los coeficientes de transformación correspondientes a cada nodo de entrada.

Estas ecuaciones aseguran que la cantidad de producto generado se encuentre en la proporción adecuada respecto de los flujos de los dos insumos.

3.1.3.e. Centros de transformación tipo 3

Los centros de transformación tipo 3 corresponden a procesos que requieren tres insumos distintos para generar un único producto de salida. En este modelo, la única instalación de este tipo es la unidad de separación de aire (ASU). Cada instalación $f \in I_{\text{transform}}^{(3)}$ cuenta con tres nodos de entrada, $n_f^{\text{in},1}$, $n_f^{\text{in},2}$ y $n_f^{\text{in},3}$, y un nodo de salida n_f^{out} . A continuación se presentan las restricciones que modelan su operación para cada período $t \in \mathcal{T}$.

Límites de capacidad de entrada

Cada uno de los tres insumos del proceso cuenta con una capacidad máxima de entrada. Para representarlo de forma compacta, se utiliza el índice $\ell \in \{1, 2, 3\}$, asociado al nodo de entrada correspondiente $n_{f,\ell}^{\text{in}}$. Esta restricción se expresa mediante la ecuación 3.21:

$$\sum_{a \in \delta_{f,\ell}^-} x_a(t) \leq \text{cap}_{f,\ell}^{\text{in}} \quad \forall f \in I_{\text{transform}}^{(3)}, \forall \ell \in \{1, 2, 3\}, \forall t \in \mathcal{T}, \quad (3.21)$$

donde:

- $\delta_{f,\ell}^-$ es el conjunto de arcos que abastecen el nodo de entrada ℓ de la instalación f .
- $\text{cap}_{f,\ell}^{\text{in}}$ corresponde a la capacidad máxima admitida por dicho nodo de entrada.

Límite de capacidad de salida

El flujo total del producto generado que sale a través del nodo n_f^{out} no puede superar la capacidad máxima de despacho asignada a la instalación. Esta restricción se expresa mediante la ecuación 3.22.

$$\sum_{a \in \delta_f^+} x_a(t) \leq \text{cap}_f^{\text{out}} \quad \forall f \in I_{\text{transform}}^{(3)}, \quad \forall t \in \mathcal{T}, \quad (3.22)$$

donde:

- δ_f^+ es el conjunto de arcos salientes desde el nodo de salida de la instalación f .
- $\text{cap}_f^{\text{out}}$ representa la capacidad máxima de despacho del producto final.

Relación de transformación

La contribución de cada uno de los tres insumos a la producción final se modela mediante coeficientes de transformación lineales $\alpha_{f,1}$, $\alpha_{f,2}$ y $\alpha_{f,3}$. Cada coeficiente especifica la proporción entre el flujo del insumo correspondiente y el flujo del producto generado. Esta relación se expresa mediante la ecuación 3.23:

$$\sum_{a \in \delta_{f,\ell}^-} x_a(t) = \alpha_{f,\ell} \sum_{a \in \delta_f^+} x_a(t) \quad \forall f \in I_{\text{transform}}^{(3)}, \quad \forall \ell \in \{1, 2, 3\}, \quad \forall t \in \mathcal{T}, \quad (3.23)$$

donde:

- $\alpha_{f,\ell}$ es el coeficiente que define la proporción en que el insumo que ingresa por el nodo ℓ contribuye al producto generado.

Estas ecuaciones aseguran que la salida del proceso se mantenga en proporción con los tres insumos requeridos.

3.1.3.f. Centros de transformación tipo 3 especial

Los centros de transformación tipo 3 especial corresponden a procesos que requieren tres insumos distintos para producir dos flujos de salida, típicamente un producto principal y un subproducto. En este caso, el único proceso es la electrólisis, donde se consumen energía eléctrica, agua desmineralizada y refrigeración para generar hidrógeno y oxígeno. A continuación, se detallan las restricciones que modelan el comportamiento operativo de este tipo de instalaciones.

Límites de capacidad de entrada

Cada insumo ingresa a través de un nodo y no debe superar una capacidad máxima de entrada. Para los tres insumos, identificados mediante el índice $\ell \in \{1, 2, 3\}$, se impone la siguiente restricción:

$$\sum_{a \in \delta_{f,\ell}^-} x_a(t) \leq \text{cap}_{f,\ell}^{\text{in}} \quad \forall f \in I_{\text{transform}}^{(3,2)}, \forall \ell \in \{1, 2, 3\}, \forall t \in \mathcal{T}, \quad (3.24)$$

donde:

- $\delta_{f,\ell}^-$ es el conjunto de arcos que abastecen el nodo de entrada ℓ de la instalación f .
- $\text{cap}_{f,\ell}^{\text{in}}$ es la capacidad máxima de entrada asociada al nodo ℓ .

Límites de capacidad de salida

La instalación produce dos salidas distintas: un producto principal (por ejemplo, hidrógeno) y un subproducto (por ejemplo, oxígeno). Cada salida posee una capacidad máxima de despacho. Para $s \in \{1, 2\}$, donde $s = 1$ corresponde al producto principal y $s = 2$ al subproducto, esta restricción se expresa mediante las ecuaciones 3.25 y 3.26:

$$\sum_{a \in \delta_f^{+,1}} x_a(t) \leq \text{cap}_f^{\text{out},1} \quad \forall f \in I_{\text{transform}}^{(3,2)}, \forall t \in \mathcal{T}, \quad (3.25)$$

$$\sum_{a \in \delta_f^{+,2}} x_a(t) \leq \text{cap}_f^{\text{out},2} \quad \forall f \in I_{\text{transform}}^{(3,2)}, \forall t \in \mathcal{T}, \quad (3.26)$$

donde:

- $\delta_f^{+,1}$ es el conjunto de arcos salientes asociados al producto principal (hidrógeno).
- $\delta_f^{+,2}$ es el conjunto de arcos salientes asociados al subproducto (oxígeno).
- $\text{cap}_f^{\text{out},1}$ y $\text{cap}_f^{\text{out},2}$ son las capacidades máximas de despacho para cada salida.

Relaciones de conversión con respecto a la salida principal

La producción del producto principal (salida $s = 1$) está asociada linealmente al consumo de cada insumo k_ℓ , a través de coeficientes de transformación. Para cada insumo se cumple la relación expresada en la ecuación 3.27:

$$\sum_{a \in \delta_{f,\ell}^-} x_a(t) = \alpha_{f,\ell} \sum_{a \in \delta_f^{+,1}} x_a(t) \quad \forall f \in I_{\text{transform}}^{(3,2)}, \forall \ell \in \{1, 2, 3\}, \forall t \in \mathcal{T}, \quad (3.27)$$

donde:

- $\alpha_{f,\ell}$ es el coeficiente de conversión entre el insumo del nodo ℓ y la producción del producto principal.

Relación estequiométrica con la segunda salida

El subproducto (salida $s = 2$) se genera en una proporción fija respecto del producto principal, determinada por la estequiometría de la reacción química. Para cada período, esta relación se expresa mediante la ecuación 3.28:

$$\sum_{a \in \delta_f^{+,2}} x_a(t) = \beta_f \sum_{a \in \delta_f^{+,1}} x_a(t) \quad \forall f \in I_{\text{transform}}^{(3-2)}, \forall t \in \mathcal{T}, \quad (3.28)$$

donde:

- β_f es el coeficiente estequiométrico que determina la proporción entre la producción del subproducto y la del producto principal.

3.1.3.g. Centros de transformación tipo 4

Los centros de transformación tipo 4 corresponden a procesos que requieren cuatro insumos distintos para generar un único producto de salida. En este caso, representa solamente la síntesis de amoníaco, la cual requiere energía eléctrica, refrigeración, nitrógeno e hidrógeno. A continuación, se presentan las restricciones que modelan su operación.

Límites de capacidad de entrada

Cada insumo ingresa a través de un nodo específico y se encuentra limitado por su respectiva capacidad máxima. Esta restricción sobre los distintos flujos de entrada se expresa mediante la ecuación 3.29:

$$\sum_{a \in \delta_{f,\ell}^-} x_a(t) \leq \text{cap}_{f,\ell}^{\text{in}} \quad \forall f \in I_{\text{transform}}^{(4)}, \forall \ell \in \{1, 2, 3, 4\}, \forall t \in \mathcal{T}, \quad (3.29)$$

donde:

- $\delta_{f,\ell}^-$ es el conjunto de arcos que llegan al nodo de entrada ℓ de la instalación f .
- $\text{cap}_{f,\ell}^{\text{in}}$ es la capacidad máxima de entrada asociada al nodo de entrada ℓ de la instalación f .

Límite de capacidad de salida

El flujo total del producto generado a través del nodo de salida no debe superar la capacidad máxima de la instalación. Esta restricción se expresa mediante la ecuación 3.30:

$$\sum_{a \in \delta_f^+} x_a(t) \leq \text{cap}_f^{\text{out}} \quad \forall f \in I_{\text{transform}}^{(4)}, \quad \forall t \in \mathcal{T}, \quad (3.30)$$

donde:

- δ_f^+ es el conjunto de arcos salientes desde el nodo de salida de la instalación f .
- $\text{cap}_f^{\text{out}}$ representa la capacidad máxima de despacho del producto generado.

Relaciones de conversión lineal

Cada insumo mantiene una relación proporcional con el producto generado, caracterizada mediante coeficientes de conversión $\alpha_{f,\ell}$. Para cada instalación, esta relación se modela mediante la ecuación 3.31:

$$\sum_{a \in \delta_{f,\ell}^-} x_a(t) = \alpha_{f,\ell} \sum_{a \in \delta_f^+} x_a(t) \quad \forall f \in I_{\text{transform}}^{(4)}, \quad \forall \ell \in \{1, 2, 3, 4\}, \quad \forall t \in \mathcal{T}, \quad (3.31)$$

donde:

- $\alpha_{f,\ell}$ es el coeficiente lineal que determina la cantidad de insumo que ingresa por el nodo ℓ .

Estas ecuaciones aseguran que la conversión de los insumos al producto final se mantenga de acuerdo con las proporciones técnicas especificadas para cada instalación.

3.2. Modelo no lineal

Esta sección presenta la extensión no lineal del modelo de optimización determinista desarrollado en la sección anterior. Manteniendo la misma representación en red y tomando como punto de partida la formulación lineal, se incorporan ahora elementos no lineales que permiten capturar con mayor fidelidad el comportamiento físico de los equipos y procesos involucrados.

En la subsección correspondiente al almacenamiento, se optó por separar los sistemas en dos conjuntos. El primero, denotado como I_{storage1} , agrupa los almacenamientos de agua desmineralizada, hidrógeno y amoníaco. El segundo conjunto, I_{storage2} , corresponde al sistema BESS, para el cual se modelan explícitamente las eficiencias de carga y descarga, así como el fenómeno de autodescarga característico de las baterías.

A continuación, se presentan los principales aspectos en los que se introducirán modificaciones no lineales dentro de la formulación:

3.2.1. Restricciones

3.2.1.a. Centros de transformación tipo 3 especial

Los centros de transformación tipo 3 especial corresponden al proceso de electrólisis, que consume tres insumos (energía eléctrica, agua y refrigeración) y genera dos productos (hidrógeno y oxígeno). Para cada $f \in I_{\text{transform}}^{(3-2)}$ y cada período $t \in \mathcal{T}$, definimos:

Límites de capacidad de entrada

La restricción que limita la capacidad de entrada de insumos se mantiene con la misma formulación utilizada en el modelo anterior, imponiendo un límite superior al flujo total que ingresa por los arcos de entrada a cada equipo. Esta condición garantiza que no se exceda la capacidad técnica definida para cada insumo y se expresa mediante la ecuación 3.24.

$$\sum_{a \in \delta_{f,\ell}^-} x_a(t) \leq \text{cap}_{f,\ell}^{\text{in}} \quad \forall f \in I_{\text{transform}}^{(3-2)}, \forall t \in \mathcal{T}.$$

Límites de capacidad de salida

La instalación considerada puede generar dos tipos de salidas: un producto principal (hidrógeno) y un subproducto (oxígeno). Cada uno de ellos presenta un límite máximo de despacho asociado a las capacidades físicas del equipo. Para simplificar la notación, se utiliza $s \in \{1, 2\}$, donde $s = 1$ representa la salida correspondiente al producto principal y $s = 2$ la del subproducto.

De este modo, la restricción de capacidad de salida se expresa mediante las ecuaciones 3.25 y 3.26:

$$\sum_{a \in \delta_f^{+,s}} x_a(t) \leq \text{cap}_f^{\text{out},s} \quad \forall f \in I_{\text{transform}}^{(3-2)}, \forall t \in \mathcal{T},$$

donde:

- $\delta_f^{+,1}$ es el conjunto de arcos salientes asociados al producto principal (hidrógeno).
- $\delta_f^{+,2}$ es el conjunto de arcos salientes asociados al subproducto (oxígeno).
- $\text{cap}_f^{\text{out},1}$ y $\text{cap}_f^{\text{out},2}$ representan las capacidades máximas de despacho correspondientes al producto principal y al subproducto, respectivamente.

Producción de hidrógeno

La producción de hidrógeno se modela a partir del comportamiento de un electrolizador representativo y se escala según el número total de unidades instaladas. Se asume que todos los

electrolizadores operan de forma simultánea y coordinada; es decir, el conjunto completo se enciende o se apaga al mismo tiempo, lo cual se representa mediante una única variable binaria de operación.

Bajo este supuesto, y aplicando la ley de Faraday, la producción total de hidrógeno se vincula directamente con el flujo que sale por el nodo principal de producto del electrolizador en cada período. De este modo, la expresión que define la generación de hidrógeno se expresa mediante la ecuación 3.32:

$$\sum_{a \in \delta_f^{+,1}} x_a(t) = N_{el} b(t) \frac{i_{dens}(t) A_{el}}{2 F} M_{H_2} \frac{3600}{10^6} \quad \forall t \in \mathcal{T}, \quad (3.32)$$

donde:

- N_{el} es el número de electrolizadores instalados.
- $b(t)$ es la variable binaria que indica el estado operativo del tren de electrólisis.
- $i_{dens}(t)$ es la densidad de corriente aplicada en el período t [A/m²].
- A_{el} es el área activa de todas las celdas del electrolizador [m²].
- F es la constante de Faraday [C/mol].
- M_{H_2} es la masa molar del hidrógeno [g/mol].
- $3600/10^6$ es el factor de conversión desde g/s a t/h.

Balance de potencia

La potencia eléctrica consumida por el electrolizador se modela en función del número de unidades activas, la densidad de corriente aplicada y la tensión por celda. Esta relación permite determinar el flujo eléctrico que debe ingresar al equipo a través del nodo asociado al insumo energético. La expresión correspondiente se presenta en la ecuación 3.33:

$$\sum_{a \in \delta_f^-,1} x_a(t) = N_{el} b(t) \frac{V_{cells} i_{dens}(t) A_{el}}{10^6} \quad \forall f \in I_{transform}^{(3_2)}, \quad \forall t \in \mathcal{T}, \quad (3.33)$$

donde:

- V_{cells} es la tensión por celda equivalente del electrolizador.
- $i_{dens}(t)$ es la densidad de corriente aplicada en el período t .
- N_{el} es el número total de electrolizadores.
- $b(t)$ es la variable binaria que indica si el electrolizador está en operación.

Límites técnicos de densidad de corriente

El electrolizador sólo puede operar dentro del rango de densidad de corriente permitido por el fabricante, lo que asegura que su potencia de operación se mantenga dentro de los límites técnicos definidos. Para ello, se imponen las siguientes restricciones, expresadas en la ecuación 3.34:

$$i_{\text{dens}}(t) \leq i_{\text{dens}}^{\text{máx}} b(t), \quad i_{\text{dens}}(t) \geq i_{\text{dens}}^{\text{mín}} b(t) \quad \forall t \in \mathcal{T}, \quad (3.34)$$

donde:

- $i_{\text{dens}}(t)$ es la densidad de corriente aplicada en el período t .
- $i_{\text{dens}}^{\text{mín}}$ y $i_{\text{dens}}^{\text{máx}}$ corresponden al mínimo y máximo técnico permitidos.
- $b(t)$ es la variable binaria que indica si el electrolizador se encuentra operativo.

Relaciones de conversión con respecto a salida principal

En esta formulación, los insumos asociados al proceso de electrólisis se identifican mediante índices numéricos para simplificar la notación. En particular, se utiliza $\ell = 2$ para representar el consumo de agua desmineralizada y $\ell = 3$ para el requerimiento de refrigeración. De este modo, las relaciones de conversión entre la producción de hidrógeno y los insumos necesarios para su generación se expresan de manera compacta mediante la misma formulación presentada previamente, la cual corresponde a la ecuación 3.27.

$$\sum_{a \in \delta_{\ell}} x_a(t) = \alpha_{\ell} \sum_{a \in \delta_f^{+,1}} x_a(t), \quad \forall \ell \in \{2, 3\}, \quad \forall t \in \mathcal{T}.$$

Estas relaciones se mantienen equivalentes a las utilizadas en otros centros de transformación, con excepción del insumo energético, cuya conversión se detalla en el balance de potencia de la electrólisis.

Relación estequiométrica con la segunda salida

El oxígeno generado en el proceso de electrólisis se modela como un subproducto en proporción fija respecto de la producción de hidrógeno, de acuerdo con la estequiometría de la reacción química, tal como se expresa en la ecuación 3.28.

$$\sum_{a \in \delta_f^{+,2}} x_a(t) = \beta_f \sum_{a \in \delta_f^{+,1}} x_a(t) \quad \forall t \in \mathcal{T}.$$

3.2.2. Almacenamiento tipo 1

En esta subsección se describen las restricciones adicionales que se incorporan al modelo, manteniéndose aquellas definidas en la sección anterior. Estas restricciones se aplican a todas las unidades $f \in I_{\text{storage1}}$ y a cada período del horizonte temporal $t \in \mathcal{T}$.

Almacenamiento mínimo

Se establece una condición de operación mínima que refleja los requerimientos técnicos del sistema. Su formulación matemática se expresa mediante la ecuación 3.35:

$$y_f(t) \geq \eta_f^{\text{cap_min}}, \quad \forall f \in I_{\text{storage}}, \forall t \in \mathcal{T}, \quad (3.35)$$

donde:

- $y_f(t)$ representa el estado de carga del almacenamiento f en el instante t .
- $\eta_f^{\text{cap_min}}$ es la capacidad total de almacenamiento de la instalación f .

3.2.2.a. Almacenamiento de hidrógeno

Cabe destacar que la siguiente restricción se aplica exclusivamente al almacenamiento de hidrógeno, dado que este sistema presenta particularidades operacionales y físicas que requieren una formulación distinta del resto de los almacenamientos.

Presión estanque de hidrógeno

Esta restricción tiene como objetivo representar el comportamiento termodinámico del hidrógeno comprimido en el estanque equivalente, estableciendo la relación entre la presión interna y la masa almacenada en cada período de tiempo. Dicha relación se basa en una ecuación de estado para un gas real, adaptada a las unidades empleadas en el modelo, considerando la presión expresada en bar y la masa en toneladas.

La formulación matemática de esta relación se expresa mediante la ecuación 3.36:

$$p_{H_2}(t) V_{H_2} = \frac{1}{100} y_{H_2}(t) R_{H_2} T Z(t), \quad \forall t \in \mathcal{T}, \quad (3.36)$$

donde:

- $p_{H_2}(t)$ es la presión interna del estanque en el período t , en bar.
- V_{H_2} corresponde al volumen interno del estanque equivalente de hidrógeno, en m^3 .
- $y_{H_2}(t)$ representa el estado de carga del almacenamiento de hidrógeno en el período t , en t.

- R_{H_2} es la constante específica del hidrógeno, en $\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$.
- T es la temperatura fija del gas en el estanque, en K.
- $Z(t)$ es el factor de compresibilidad del hidrógeno en el período t (adimensional).
- $1/100$ corresponde al factor de conversión desde toneladas a kilogramos y desde pascales a bar.

Rango operativo de presión del estanque de hidrógeno

El objetivo de esta restricción es asegurar que el estanque equivalente de hidrógeno opere dentro de un intervalo seguro de presiones, determinado por los límites estructurales del recipiente y por las condiciones de operación del sistema. Este rango garantiza que la masa almacenada mantenga una presión compatible con el diseño mecánico del estanque y con los datos termodinámicos utilizados en el modelo.

La formulación matemática de esta restricción se expresa mediante la ecuación 3.37:

$$P_{\min} \leq p_{H_2}(t) \leq P_{\max}, \quad \forall t \in \mathcal{T}, \quad (3.37)$$

donde:

- $p_{H_2}(t)$ es la presión interna del estanque en el período t [bar].
- $P_{\min}$ corresponde a la presión mínima de operación permitida [bar].
- $P_{\max}$ corresponde a la presión máxima admisible para el estanque [bar].

3.2.3. Almacenamiento tipo 2

En esta sección se describen las restricciones relacionadas con la operación de este sistema de almacenamiento. Dichas restricciones mantienen la misma estructura que las definidas para el sistema de almacenamiento descrito en la sección anterior, salvo por la ecuación de balance dinámico. Estas se aplican a todas las unidades $f \in I_{\text{storage2}}$ y a cada período del horizonte temporal $t \in \mathcal{T}$. Adicionalmente, se incorporan las siguientes restricciones específicas:

3.2.3.a. Almacenamiento mínimo

Se establece una condición de operación mínima que refleja los requerimientos técnicos del sistema. Su formulación matemática es la siguiente:

$$y_f(t) \geq \eta_f^{\text{cap_min}}, \quad \forall f \in I_{\text{storage2}}, \quad \forall t \in \mathcal{T}, \quad (3.38)$$

donde:

- $y_f(t)$ representa el estado de carga del almacenamiento f en el instante t .
- $\eta_f^{\text{cap_min}}$ es la capacidad total de almacenamiento de la instalación f .

La BESS se representa mediante un modelo de balance energético en tiempo discreto, adecuado para la planificación y operación de sistemas híbridos. El modelo incorpora explícitamente las eficiencias de carga y descarga, así como la autodescarga característica de las baterías de ion-litio, con el fin de capturar de manera más realista el desempeño técnico del sistema.

3.2.3.b. Ecuaciones de balance dinámico

Se presentan las ecuaciones de balance dinámico que describen el estado de carga del sistema de almacenamiento. Estas ecuaciones consideran la autodescarga asociada al almacenamiento, así como las eficiencias de carga y descarga, y permiten relacionar el estado del sistema entre períodos consecutivos en función de los flujos de entrada y salida.

Dado que el primer período del horizonte temporal requiere de una condición inicial, el balance dinámico se formula de manera diferenciada para $t = 1$ y para los períodos subsiguientes $t > 1$, tal como se detalla a continuación.

1. **Primer período ($t = 1$):** El balance dinámico para el primer período se define como:

$$y_{2,f}(1) - (1 - \rho)y_{2,f}^{\text{init}} = \eta^{\text{ch}} \sum_{a \in \delta_f^-} x_a(1) - \frac{1}{\eta^{\text{dis}}} \sum_{a \in \delta_f^+} x_a(1), \quad \forall f \in I_{\text{storage}}, \quad (3.39)$$

donde:

- δ_f^- es el conjunto de arcos que ingresan al nodo de almacenamiento f .
- δ_f^+ es el conjunto de arcos que salen desde el nodo de almacenamiento f .
- $x_a(t)$ es el flujo a través del arco a en el período t .
- ρ es el parámetro de autodescarga del almacenamiento por período.
- η^{ch} es la eficiencia de carga del sistema de almacenamiento.
- η^{dis} es la eficiencia de descarga del sistema de almacenamiento.

2. **Períodos subsiguientes ($t > 1$):** A partir del segundo período, el estado de carga se define según:

$$y_{2,f}(t) - (1 - \rho)y_{2,f}(t-1) = \eta^{\text{ch}} \sum_{a \in \delta_f^-} x_a(t) - \frac{1}{\eta^{\text{dis}}} \sum_{a \in \delta_f^+} x_a(t), \quad \forall f \in I_{\text{storage}}, \quad \forall t = 2, \dots, T. \quad (3.40)$$

A modo de síntesis y con el objetivo de facilitar la comprensión del análisis realizado, a continuación se presentan las principales ventajas identificadas del modelo no lineal:

- En el cálculo de la potencia del electrolizador se consideran explícitamente la tensión de celda y la densidad de corriente, lo que permite estimar de manera más precisa el comportamiento operativo del equipo.

- Para lograr una mayor precisión, se utilizó la Ley de Faraday con el fin de obtener una estimación de la producción de oxígeno más cercana a la realidad.
- Adicionalmente, se incorporaron restricciones de nivel mínimo para los sistemas de almacenamiento, con el fin de garantizar condiciones operativas adecuadas y evitar estados no deseados durante la operación.
- En particular, para el almacenamiento de hidrógeno se empleó la ley de gases reales, lo que permite representar de manera más precisa la presión interna del tanque y, por consiguiente, mejorar la fidelidad del modelo frente al comportamiento físico del sistema.

Capítulo 4

Resultados y comparación de modelos

El capítulo 3 de este trabajo presenta los modelos generales desarrollados y sus metodologías de manera conceptual y aplicables a proyectos. En contraste, el capítulo 4 se centra en la aplicación práctica del modelo, mostrando los resultados obtenidos, lo que permite evaluar su comportamiento y desempeño en condiciones representativas de la operación real.

4.1. Descripción de datos

Los datos utilizados en este trabajo fueron proporcionados por la empresa MAKO INVERSIONES SpA y constituyen la base de datos empleada para la formulación y evaluación de los modelos de optimización desarrollados. Dichos datos incluyen información agregada sobre los procesos de producción, el rendimiento de los equipos y el consumo de recursos, permitiendo representar de manera coherente la operación del sistema bajo condiciones representativas del proyecto en estudio.

La implementación de estos datos se realiza a través de los archivos `hv.dat` y `hvNL.dat` utilizados en los modelos de AMPL. Por razones de extensión los archivos completos no se incluye íntegramente en el documento; sin embargo, un extracto representativo de los mismos se presentan en los Anexos A.3 y A.5.

El proyecto en estudio, denominado “Canelo”, corresponde a una planta de producción de hidrógeno y amoníaco verde ubicada en la Región de Magallanes, Chile. Debido a las condiciones climáticas características de la zona, la planta utiliza energía proveniente del parque eólico como su única fuente primaria.

La Figura 4.1 muestra un mapa de calor horario–anual del factor de planta del parque eólico del proyecto Canelo, el cual permite visualizar la variabilidad temporal de la generación disponible a lo largo de un año completo. El eje horizontal representa el día del año, mientras que el eje vertical corresponde a la hora del día, y la escala de colores indica el valor del factor de planta horario, expresado en porcentaje.

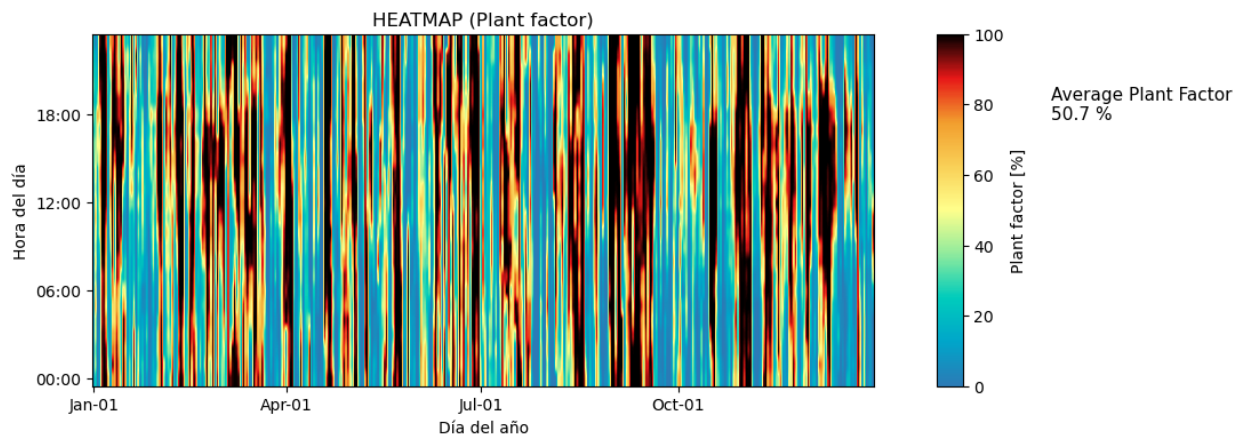


Figura 4.1: Mapa de calor horario–anual del factor de planta del parque eólico Canelo. Elaboración propia.

Se observa una alta variabilidad tanto diaria como estacional en la disponibilidad del recurso eólico, con períodos de alta generación intercalados con intervalos de baja producción. El factor de planta promedio anual alcanza un valor de 50.7 %, lo que evidencia un recurso eólico favorable para la producción de hidrógeno y amoníaco verde. Esta variabilidad condiciona directamente la operación del sistema, en particular la carga del electrolizador y el uso de los sistemas de almacenamiento, y constituye la principal restricción energética considerada en los modelos de optimización analizados en este capítulo.

Además de la serie temporal de generación eólica, el modelo utiliza un conjunto de parámetros técnicos asociados a los distintos equipos que componen la planta. Estos parámetros incluyen, principalmente, las capacidades máximas instalables de cada unidad, así como las relaciones de conversión entre insumos y productos, tales como consumo eléctrico, consumo de agua, generación de calor y producción de hidrógeno, nitrógeno y amoníaco, según corresponda a cada proceso.

Las relaciones insumo–producto fueron representadas mediante coeficientes constantes en el modelo lineal, mientras que en el modelo no lineal se emplearon aproximaciones por tramos (*piecewise linear*, PWL), lo que permite capturar de manera más realista el comportamiento operativo de equipos clave del sistema, en particular del electrolizador.

En el modelo no lineal, el proceso de electrólisis se basa en las características técnicas de un electrolizador PEM de escala industrial, utilizando como referencia el equipo *Silyzer 300* de Siemens, cuyos parámetros se obtienen de [9] y se presentan en el Anexo B.1. Este equipo se emplea para definir los rangos operacionales, la capacidad nominal y la relación no lineal entre el consumo eléctrico y la producción de hidrógeno, la cual es incorporada al modelo mediante curvas PWL.

4.2. Planteamiento computacional

Para implementar los modelos matemáticos, tanto el modelo lineal (**LP**) como el modelo no lineal (**MILP**), se utilizó **AMPL** como lenguaje de modelación algebraica, el cual permite describir y resolver problemas complejos de optimización de manera estructurada. Para la resolución numérica

de ambos modelos se empleó el solver **Gurobi 12.0**, seleccionado debido a su alto desempeño en problemas de gran escala y su capacidad para manejar de forma eficiente modelos con múltiples restricciones y variables, incluyendo formulaciones lineales y mixtas entero–lineales.

La función objetivo de ambos modelos, lineal y no lineal, consiste en maximizar la producción total de amoníaco (NH_3) producido a lo largo del horizonte anual. Matemáticamente, la función objetivo puede escribirse como:

$$\text{máx } Z = \sum_{t \in \mathcal{T}} \sum_{a \in \delta_{55}^+} x_a(t), \quad (4.1)$$

La cual representa la suma del flujo de amoníaco generado por la unidad Haber–Bosch hacia la etapa de almacenamiento durante las 8 760 horas, el cual es representado por el Nodo 55, tal como se puede observar en la Figura 4.2 . Esta formulación busca determinar las capacidades óptimas del sistema para maximizar la producción anual, sujetas a las restricciones físicas, energéticas y de capacidad de cada proceso. Teniendo como principal limitante la generación del parque eólico.

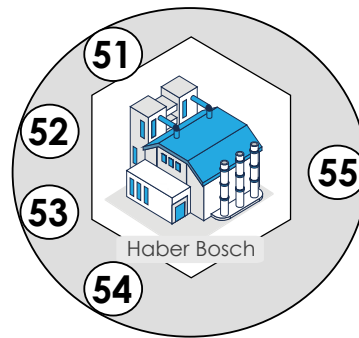


Figura 4.2: Nodos unidad Haber-Bosch. Elaboración propia.

La formulación del modelo lineal se presenta en el archivo `hv.mod`, donde se definen la función objetivo y el conjunto de restricciones que representan el sistema. La ejecución del modelo se realiza mediante el archivo `hv.run`, el cual se encarga de cargar los datos de entrada (`hv.dat`) y el modelo (`hv.mod`), resolver el problema de optimización y gestionar la generación de los resultados de salida. Estos códigos se presentan en las Anexos A.1 y A.2.

A diferencia del caso lineal, en la formulación no lineal se incorpora una representación más detallada del electrolizador mediante curvas PWL, las cuales aproximan la relación no lineal entre la densidad de corriente y el consumo eléctrico del electrolizador. De este modo, se captura de manera indirecta la relación no lineal del voltaje y la corriente, manteniendo el resto de la cadena de procesos con estructuras similares. Además, se incorporan no linealidades en los sistemas de almacenamiento. De manera similar al modelo lineal, la implementación del modelo no lineal se realiza mediante los archivos `hvNL.mod` y `hvNL.run`. Estos códigos se presentan en los Anexos A.4 y A.6.

4.3. Resultados del modelo lineal

En esta sección se presentan los resultados obtenidos a partir de la optimización determinista del modelo lineal de la planta híbrida de hidrógeno y amoníaco. El modelo considera la cadena completa desde la generación eólica, el tratamiento de agua, la electrólisis y la síntesis de amoníaco, hasta el almacenamiento. La exportación y venta del producto no se incluyen dentro del alcance de este trabajo. El objetivo del modelo es determinar las capacidades óptimas de cada proceso, la producción anual y los principales indicadores económicos del proyecto, bajo un enfoque lineal basado en relaciones de insumo–producto. El tiempo total de solución registrado fue de 6.5 segundos.

4.3.1. Capacidades óptimas de diseño

La Tabla 4.1 resume las capacidades óptimas obtenidas para cada unidad del sistema mediante el modelo lineal. Estas capacidades corresponden a los valores máximos de flujo o capacidad encontrados en las distintas instalaciones a lo largo del horizonte anual, equivalente a 8 760 horas.

Tabla 4.1: Capacidades óptimas instaladas del modelo lineal.

Instalación	Unidad	Capacidad
Planta Eólica	MW	1 260
Almacenamiento de agua desmineralizada	m ³	68 765
Almacenamiento de hidrógeno	ton	52.8
Almacenamiento de amoníaco	ton	68 200
BESS	MWh	81
Planta Desaladora	m ³ /h	659
Bombeo de agua	m ³ /h	659
Sistema de enfriamiento	MW _{th}	342.9
Producción de agua desmineralizada	m ³ /h	319.0
Electrolizador	tH ₂ /h	18.33
Compresor 30/100 bar	tH ₂ /h	2.00
Compresor 100/200 bar	tH ₂ /h	2.00
Unidad de separación de aire	tN ₂ /h	71.27
Haber–Bosch	tNH ₃ /h	96.32

Estas capacidades reflejan las decisiones óptimas del modelo, cuyo objetivo es maximizar la producción de amoníaco. Destacan especialmente el flujo del electrolizador y de los compresores, dado que determinan la disponibilidad de hidrógeno para el proceso Haber–Bosch y, por ende, condicionan la producción total de amoníaco.

4.3.2. Producción anual de hidrógeno y amoníaco

En esta sección se presenta la producción anual de hidrógeno y amoníaco obtenida a partir del modelo lineal. Estos valores se determinan a partir de los flujos de salida de cada producto, lo que permite integrar su producción total anual. Adicionalmente, se incluye el porcentaje de energía vertida.

La Tabla 4.2 resume los resultados obtenidos.

Tabla 4.2: Producción anual obtenida por el modelo lineal.

Producto	Unidad	Producción anual
Hidrógeno (H ₂)	ton/año	81 717
Amoníaco (NH ₃)	ton/año	462 987
Spillage energético	%	0.71

El bajo nivel de vertimiento energético, inferior al 1 %, evidencia un uso eficiente de la producción del parque eólico, ya que la mayor parte del recurso es aprovechada en los distintos procesos de la planta. Este resultado se asocia a un dimensionamiento adecuado del sistema, especialmente de aquellas unidades que almacenan o consumen grandes volúmenes de energía o insumos, como la BESS y el electrolizador.

4.3.3. Resultados económicos

A partir de las capacidades óptimas de los flujos máximos y cantidad de producción, mostrados en las Tablas 4.1 y 4.2. Se calcula el CAPEX, el OPEX, los ingresos del proyecto y los principales indicadores económicos. Estos resultados se obtienen a partir del archivo `hv_eco.csv` generado por AMPL y del cálculo posterior realizado mediante un script de Python.

Tabla 4.3: Indicadores económicos del modelo lineal.

Indicador	Unidad	Valor
CAPEX total	MUSD	2 801
OPEX anual	MUSD/año	46.3
Ingresos anuales	MUSD/año	509
Valor Actual Neto (VAN) (20 años, 8 %)	MUSD	1 745
Tasa Interna de Retorno (TIR)	%	15.6
<i>Payback</i> simple	años	7
Costo Nivelado del Amoníaco (LCOA)	USD/ton NH ₃	716

El proyecto muestra una rentabilidad atractiva bajo las condiciones del modelo lineal, con un VAN positivo considerable, una TIR superior al 15 % y un período de recuperación menor a 8 años.

Es importante recordar que el LCOA obtenido considera el amoníaco hasta el almacenamiento, no incluyendo los gastos de transporte.

4.4. Resultados del modelo no lineal

En esta sección se presentan los resultados obtenidos a partir de la optimización determinista del modelo no lineal de la planta híbrida de hidrógeno y amoníaco. A diferencia del modelo lineal, esta formulación incorpora no linealidades presentes en los procesos mediante aproximaciones por tramos (*piecewise linear*, PWL), permitiendo una representación más precisa del comportamiento del electrolizador, el sistema de almacenamiento y otras unidades del proceso. Al igual que en el caso anterior, la exportación y venta del producto no se incluyen dentro del alcance de este trabajo. El objetivo de este modelo es determinar las capacidades óptimas, los perfiles de operación y los indicadores económicos del proyecto bajo una formulación mixta entero–lineal que captura de manera más realista las relaciones físico–químicas del sistema. El tiempo total de solución registrado fue de aproximadamente 729 segundos.

4.4.1. Capacidades óptimas de diseño

La Tabla 4.4 resume las capacidades óptimas obtenidas para cada unidad del sistema mediante el modelo no lineal. Al igual que en el caso anterior, las capacidades se calculan a partir de los flujos máximos a lo largo del horizonte de tiempo.

Tabla 4.4: Capacidades óptimas instaladas del modelo no lineal.

Instalación	Unidad	Capacidad
Planta Eólica	MW	1 260
Almacenamiento de agua desmineralizada	m ³	47 694.72
Almacenamiento de hidrógeno	ton	52.83
Almacenamiento de amoníaco	ton	68 200
BESS	MWh	81
Planta Desaladora	m ³ /h	659
Bombeo de agua	m ³ /h	659
Sistema de enfriamiento	MW _{th}	293.58
Producción de agua desmineralizada	m ³ /h	318.97
Electrolizador	tH ₂ /h	14.44
Compresor 30/100 bar	tH ₂ /h	2.00
Compresor 100/200 bar	tH ₂ /h	2.00
Unidad de separación de aire	tN ₂ /h	79.32
Haber–Bosch	tNH ₃ /h	96.32

En comparación cualitativa con el modelo lineal, se observa una reducción en la capacidad óptima del electrolizador y del sistema de refrigeración, mientras que la capacidad de la unidad de

separación de aire aumenta ligeramente. Esto es coherente con una representación más realista del electrolizador, que limita la potencia conveniente a instalar.

4.4.2. Producción anual de hidrógeno y amoníaco

La producción anual obtenida se resume en la Tabla 4.5, junto con el porcentaje de vertimiento de energía. Los valores presentados corresponden a la suma de los flujos horarios de hidrógeno y amoníaco.

Tabla 4.5: Producción anual obtenida por el modelo no lineal.

Producto	Unidad	Producción anual
Hidrógeno (H ₂)	ton/año	71 799
Amoníaco (NH ₃)	ton/año	406 796
<i>Spillage</i> energético	%	12.61

En este caso, la producción anual de amoníaco es menor que en el modelo lineal y se observa un mayor vertimiento de energía eólica, del orden de 12 %, lo cual se explica por el mínimo técnico en la operación del electrolizador.

4.4.3. Resultados económicos

A partir de las capacidades instaladas y los flujos anuales del modelo no lineal se construyen los indicadores económicos del proyecto, utilizando el mismo horizonte de 20 años y una tasa de descuento del 8 %. Los resultados se muestran en la Tabla 4.6.

Tabla 4.6: Indicadores económicos del modelo no lineal.

Indicador	Unidad	Valor
CAPEX total	MUSD	2 680
OPEX anual	MUSD/año	43.2
Ingresos anuales	MUSD/año	447.5
Valor Actual Neto (VAN) (20 años, 8 %)	MUSD	1 290
Tasa Interna de Retorno (TIR)	%	13.97
<i>Payback</i> simple	años	7
Costo Nivelado del Amoníaco (LCOA)	USD/ton NH ₃	777.74

En términos económicos, el modelo no lineal sigue arrojando un proyecto rentable, con VAN positivo, TIR cercano al 14 % y un período de recuperación cercano a 7 años. Sin embargo, el CAPEX efectivo y el LCOA resultan mayores que en el caso lineal, mientras que los ingresos anuales y la producción de amoníaco son menores. Esto confirma que la inclusión de una representación más detallada del electrolizador hace que el sistema sea más conservador en cuanto a producción y más exigente en términos de costo específico por tonelada de NH₃.

4.5. Comparación de modelos

La Tabla 4.7 muestra que ambos modelos coinciden en la mayoría de las capacidades instaladas, especialmente en los sistemas de almacenamiento y en las unidades de agua. No obstante, se observan diferencias relevantes en los equipos cuya operación presenta relaciones no lineales: el electrolizador reduce su capacidad en un 21 % en el modelo no lineal, mientras que el sistema de enfriamiento disminuye en un 14 %. Esto indica que el modelo lineal tiende a sobredimensionar ciertos equipos energéticamente intensivos, mientras que la formulación no lineal captura de forma más realista las variaciones internas de eficiencia.

Tabla 4.7: Comparación de capacidades óptimas instaladas entre el modelo lineal y no lineal.

Instalación	Unidad	Lineal	No lineal	Diferencia
Planta Eólica	MW	1 260	1 260	0 %
Almacenamiento agua desmineralizada	m ³	68 765	47 694	−30.6 %
Almacenamiento de hidrógeno	ton	52.83	52.83	0 %
Almacenamiento de amoníaco	ton	68 200	68 200	0 %
BESS	MWh	81	81	0 %
Planta Desaladora	m ³ /h	659	659	0 %
Bombeo de agua	m ³ /h	659	659	0 %
Sistema de enfriamiento	MW _{th}	342.93	293.58	−14.4 %
Producción de agua desmineralizada	m ³ /h	318.97	318.97	0 %
Electrolizador	tH ₂ /h	18.33	14.44	−21.2 %
Compresor 30/100 bar	tH ₂ /h	2	2	0 %
Compresor 100/200 bar	tH ₂ /h	2	2	0 %
Unidad de separación de aire	tN ₂ /h	71.27	79.32	11.3 %
Haber–Bosch	tNH ₃ /h	96.32	96.32	0 %

La Tabla 4.8 evidencia que el modelo lineal sobreestima la producción anual de hidrógeno y amoníaco en aproximadamente un 12 %, debido al supuesto de relaciones constantes entre energía y producto. Por el contrario, el modelo no lineal representa de forma realista reduciendo la producción efectiva. Esto se refleja especialmente en el vertimiento energético, que aumenta desde 0.71 % en el modelo lineal hasta 12.4 % en el no lineal, indicando que la planta no puede utilizar completamente la energía renovable cuando se consideran las limitaciones operativas del electrolizador.

Tabla 4.8: Producción anual y spillage energético en los modelos lineal y no lineal.

Producto	Unidad	Lineal	No lineal	Diferencia
Hidrógeno (H ₂)	ton/año	81 717	71 799	−12.1 %
Amoníaco (NH ₃)	ton/año	462 987	406 796	−12.1 %
Spillage energético	%	0.71	12.60	1.7 %

La Tabla 4.9 muestra que el CAPEX y OPEX del modelo no lineal son ligeramente menores, principalmente debido a un dimensionamiento más ajustado de equipos críticos como el electrolizador y el sistema de enfriamiento. Sin embargo, la menor producción anual del modelo no lineal conlleva una reducción significativa en los ingresos, lo que impacta directamente en los indicadores económicos. El VAN disminuye en un 22 % y la TIR cae desde 15.6 % a 14.3 %. Además, el LCOA aumenta en un 7 %, reflejando un costo unitario mayor por tonelada de amoníaco cuando se consideran las no linealidades del proceso. Esto indica que el modelo lineal ofrece una visión más optimista del proyecto, mientras que el modelo no lineal entrega una evaluación económica más conservadora y realista.

Tabla 4.9: Comparación de indicadores económicos entre el modelo lineal y no lineal.

Indicador	Unidad	Lineal	No lineal	Diferencia
CAPEX total	MUSD	2 801	2 682	−4.2 %
OPEX anual	MUSD/año	46.31	43.2	−6.7 %
Ingresos anuales	MUSD/año	509.30	447.5	−12.1 %
Valor Actual Neto (VAN) (20 años, 8 %)	MUSD	1 745	1 287	−26.2 %
Tasa Interna de Retorno (TIR)	%	15.62	13.97	−10.6 %
Payback simple	años	7	7	0 %
Costo Nivelado del Amoníaco (LCOA)	USD/ton NH ₃	716.21	777.74	8.6 %

Capítulo 5

Conclusiones y trabajos futuros

5.1. Conclusiones

El presente informe tiene como objetivo desarrollar y evaluar un modelo de optimización determinista no lineal para la planificación y el diseño de plantas híbridas de hidrógeno verde, integrando una representación electroquímica detallada del electrolizador PEM y un modelo dinámico de almacenamiento de hidrógeno y amoníaco. Además, se busca comparar este enfoque con el modelo lineal, identificando las ventajas que ofrece un modelo no lineal en el desarrollo de proyectos y cómo permite obtener una representación más precisa de las plantas.

En términos generales, los resultados muestran que el modelo lineal es adecuado como una primera aproximación al diseño de la planta; sin embargo, tiende a sobreestimar el desempeño técnico y económico del sistema debido a la suposición de rendimientos constantes y a la ausencia de relaciones internas no lineales. Aunque ambos modelos coinciden en la mayoría de las capacidades instaladas, el modelo no lineal reduce la potencia requerida en equipos como el electrolizador y el sistema de enfriamiento, lo que evidencia que la formulación lineal sobredimensiona unidades de alto consumo energético.

La incorporación de las pérdidas cinéticas y resistivas asociadas al funcionamiento interno del electrolizador permite capturar correctamente la variación del voltaje de celda y, por lo tanto, la eficiencia del equipo en función de la corriente. Para lograr una mayor precisión, se utilizó la Ley de Faraday con el fin de obtener una estimación de la producción de oxígeno más cercana a la realidad. Asimismo, se determinó el flujo eléctrico que ingresa a través de los nodos del equipo, manteniendo los límites de densidad de corriente permitidos.

Adicionalmente, se incorporaron restricciones de nivel mínimo para los sistemas de almacenamiento, con el fin de garantizar condiciones operativas adecuadas y evitar estados no deseados durante la operación. En particular, para el almacenamiento de hidrógeno se empleó la ley de gases reales, lo que permite representar de manera más precisa la presión interna del tanque y, por consiguiente, mejorar la fidelidad del modelo frente al comportamiento físico del sistema.

La formulación lineal subestima el consumo energético del electrolizador, y estas diferencias se acentúan durante la operación del sistema. El modelo lineal sobreestima la producción anual de hidrógeno y amoníaco en aproximadamente un 12 %, mientras que el modelo no lineal presenta un aumento significativo del vertimiento energético. Esto sugiere que, al considerar eficiencias variables, pérdidas internas y restricciones operativas, la planta no puede absorber completamente la energía renovable disponible, lo que se traduce en una menor eficiencia global del proceso y puede conducir a decisiones de inversión sesgadas.

Estas diferencias técnicas tienen un impacto directo en los indicadores económicos. Aunque el

modelo no lineal requiere un CAPEX y OPEX ligeramente menores, la reducción en la producción anual disminuye los ingresos proyectados, lo que se traduce en una caída significativa del VAN de cerca de un 26,2 %, una reducción de la TIR de alrededor de un 10,6 % y un aumento del LCOA de aproximadamente un 8,6 %. En consecuencia, el modelo lineal ofrece una visión más optimista del desempeño económico, mientras que el modelo no lineal presenta una evaluación más conservadora y realista al capturar adecuadamente las ineficiencias internas del sistema.

En consecuencia, las capacidades óptimas del electrolizador tiende a ser menor en la formulación no lineal, lo que refleja un diseño más conservador y coherente con el comportamiento real del sistema. La inclusión de relaciones no lineales resulta fundamental para obtener una valoración técnica y económica robusta en proyectos de hidrógeno verde y amoníaco. Aunque el modelo lineal es útil para la exploración preliminar y para reducir los tiempos de cómputo, las decisiones de inversión deberían basarse en el modelo no lineal, ya que representa con mayor fidelidad el comportamiento físico y operativo de la planta.

Si bien el modelo desarrollado ofrece resultados sólidos, aún existen oportunidades de mejora. En estudios futuros, se podría incorporar la degradación de los equipos a lo largo del tiempo, ya que esta afecta tanto la eficiencia como la capacidad máxima admisible. Asimismo, sería conveniente considerar fallas potenciales, mantenimientos programados y su impacto en el rendimiento operativo. En particular, el modelo térmico del electrolizador no contempla dinámicas de temperatura, y la modelación del almacenamiento de hidrógeno no incorpora pérdidas térmicas ni efectos transitorios asociados a procesos de compresión rápida. Integrar estos aspectos permitiría aumentar la precisión del modelo y ampliar su aplicabilidad.

Considerando los resultados técnicos y económicos, a través de esta memoria se demuestra que la incorporación de modelos electroquímicos no lineales no solo es técnicamente relevante, sino además necesaria para el desarrollo de proyectos de hidrógeno verde competitivos y sustentables en el futuro energético nacional e internacional.

5.2. Trabajos futuros

A partir del desarrollo y análisis del modelo de optimización determinista no lineal para la planificación de plantas híbridas de hidrógeno verde, se proponen las siguientes recomendaciones orientadas a mejorar la precisión del diseño, la operación y la evaluación económica del sistema:

- Incorporar las no linealidades asociadas no solo al electrolizador, sino también a procesos posteriores como el reactor Haber-Bosch o la unidad de separación de aire (ASU), con el fin de evitar el sobredimensionamiento de equipos y obtener estimaciones más realistas del costo nivelado de hidrógeno (LCOH) y del desempeño global del sistema.
- Incorporar restricciones de operación realistas, tales como períodos mínimos de encendido y apagado, en caso de contar con datos suficientes del fabricante del electrolizador.
- Evaluar y contrastar los errores de los modelos a partir de datos experimentales del electrolizador, con el objetivo de fortalecer su proceso de validación y determinar con mayor exactitud su precisión.

- Incorporar la degradación de los equipos a lo largo del tiempo, en estudios de horizontes de tiempo más grandes.

Referencias

- [1] International Energy Agency, “The future of hydrogen: Seizing today’s opportunities,” 2019. [Online]. Available: https://iea.blob.core.windows.net/assets/9e3a3493-b9a6-4b7d-b499-7ca48e357561/The_Future_of_Hydrogen.pdf
- [2] Ministerio de Energía, Gobierno de Chile, “Estrategia nacional de hidrógeno verde,” 2020. [Online]. Available: <https://energia.gob.cl/hidrogeno-verde>
- [3] R. H. A. Ajanovic*, M. Sayer, “The economics and the environmental benignity of different colors of hydrogen,” *Vienna University of Technology (TU WIEN), Vienna, Austria*, 2022.
- [4] Sauma, Enzo, “El amoníaco verde: una solución para el almacenamiento y transporte,” 2023. [Online]. Available: <https://energia.uc.cl/opinion/el-amoniaco-verde-una-solucion-para-el-almacenamiento-y-transporte>
- [5] F. A. Jiménez Becerra, F. Oviedo Tolentino, M. Loredó Tóvías, M. A. Gallegos Guerrero, and R. I. Hernández Molinar, “Estudio experimental de la producción de hidrógeno en una celda electrolítica alcalina,” *Tendencias en Energías Renovables y Sustentabilidad*, vol. 1, no. 1, pp. 1–15, 2022. [Online]. Available: <https://aldeser.org/journals/index.php/TERYS/article/view/252>
- [6] P. L. Muñoz Córdova, “Sistema de respaldo energético basado en pilas de combustible para hospitales,” Master’s thesis, Universidad de Ingeniería y Tecnología (Perú), 2018, tesis de Título Profesional, Repositorio Institucional UTEC. [Online]. Available: <https://hdl.handle.net/20.500.12815/83>
- [7] A. Segura Hernández, “Modelado de electrolizador de agua PEM utilizado en la producción de hidrógeno verde,” Memoria de título, Universidad Técnica Federico Santa María, 2023, profesor guía: Dr. Hugues Renaudineau; Profesor co-referente: Dr. Samir Kouro.
- [8] T. Cristi, “Aplicaciones domiciliarias del hidrógeno verde,” Memoria para Optar al Título de Ingeniera Civil Mecánica, 2024, profesor guía: Ramón Frederick González.
- [9] M. Pfennig, B. Schiffer, and T. Clees, “Thermodynamical and electrochemical model of a pem electrolyzer plant in the megawatt range with a literature analysis of the fitting parameters,” *International Journal of Hydrogen Energy*, 2024, in press.
- [10] F. Marangio, M. Santarelli, and M. Calı, “Theoretical model and experimental analysis of a high pressure pem water electrolyser for hydrogen production,” *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 34, no. 3, pp. 1143–1158, 2009.
- [11] C. Demirhan, M. U. Hasan, D. J. García, and F. You, “A multi-scale energy systems engineering approach towards integrated hydrogen production,” *Energy Conversion and Management*, 2021, documento proporcionado por el usuario.

- [12] A. Khan, D. F. del Río *et al.*, “An integrated framework of open-source tools for designing and evaluating green hydrogen production opportunities,” *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2023, documento proporcionado por el usuario.
- [13] L. Schlapbach and A. Züttel, “Hydrogen-storage materials for mobile applications,” *Nature*, vol. 414, no. 6861, pp. 353–358, 2001.
- [14] J. Dutton, “Hydrogen storage,” *Encyclopedia of Chemical Technology*, 2010.
- [15] S. Aceves, G. Petitpas, J. Martinez-Frias, and B. Feng, “High-density automotive hydrogen storage with cryogenic capable pressure vessels,” *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 43, no. 23, pp. 10 530–10 538, 2018.
- [16] NIST Chemistry WebBook, “Thermophysical properties of fluid systems,” 2024, available at: <https://webbook.nist.gov/chemistry/fluid/>.
- [17] R. Ciarambino, G. Ferruzzi, and A. Sorce, “Optimization of multi-energy systems with hydrogen storage: A review,” *Energy Conversion and Management*, vol. 244, p. 114492, 2021.
- [18] S. Skogestad, “The dos and don’ts of process control: Buffer tanks,” *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 86, no. 7, pp. 731–742, 2008.
- [19] 4E Chile and GIZ, “Industria del amoníaco: estado actual y oportunidades para la descarbonización,” <https://4echile.cl/wp-content/uploads/2022/10/Industria-del-amoniaco-estado-actual-y-oportunidades-para-la-descarbonizacion.pdf>, 2022, accedido: 2025-01-10.
- [20] N. G. Chatzigeorgiou, S. Theocharides, G. Makrides, and G. E. Georghiou, “A review on battery energy storage systems: Applications, developments, and research trends of hybrid installations in the end-user sector,” *Journal of Energy Storage*, 2024.

Anexo A

Códigos de los modelos AMPL

A.1. Archivo hv.mod

Este archivo define la estructura del modelo lineal de optimización, incluyendo la función objetivo y el conjunto de restricciones que representan los procesos, los flujos y las limitaciones operacionales del sistema.

```
1  /*****  
2  /** CONJUNTOS **/  
3  *****/  
4  param NNODES, >=1 , integer;  
5  set  NODES := 0..NNODES;  
6  param NEDGES, >=1 , integer;  
7  set  EDGES := 1..NEDGES;  
8  param NSOURCE, >=1 , integer ;  
9  set  SOURCES := 1..NSOURCE ;  
10 param NTRANS1, >=0 , integer ;  
11 set  TRANS1 := 1..NTRANS1 ;  
12 param NTRANS2, >=0 , integer ;  
13 set  TRANS2 := 1..NTRANS2 ;  
14 param NTRANS3, >=0 , integer ;  
15 set  TRANS3 := 1..NTRANS3 ;  
16 param NTRANS3_2, >=0 , integer ;  
17 set  TRANS3_2 := 1..NTRANS3_2 ;  
18 param NTRANS4, >=0 , integer ;  
19 set  TRANS4 := 1..NTRANS4 ;  
20 param NSTORAGE, >=0 , integer ;  
21 set  STORAGES := 1..NSTORAGE ;  
22 param NTS, >=1 , integer ;  
23 set  TIMESERIES := 1..NTS ;  
24 param NPERIODS, >=1 , integer ;  
25 set  PERIODS := 1..NPERIODS ;  
26  
27  
28  
29 /*****  
30 /** GENERAL **/  
31 *****/  
32 param src_name{SOURCES}, symbolic ;  
33 param src_node{SOURCES}, integer ;
```

```

34 param src_ts{SOURCES}, integer ;
35 param src_cap{SOURCES} ;
36 param src_capex{SOURCES} ;
37 param src_opex{SOURCES} ;
38
39 param sto_name{STORAGES}, symbolic ;
40 param sto_inode{STORAGES}, integer ;
41 param sto_onode{STORAGES}, integer ;
42 param sto_k1{STORAGES} ;
43 param sto_icap{STORAGES} ;
44 param sto_ocap{STORAGES} ;
45 param sto_cap{STORAGES} ;
46 param sto_capex{STORAGES} ;
47 param sto_opex{STORAGES} ;
48
49
50 param tr1_name{TRANS1}, symbolic ;
51 param tr1_inode{TRANS1}, integer ;
52 param tr1_iid{TRANS1}, symbolic ;
53 param tr1_onode{TRANS1}, integer ;
54 param tr1_oid{TRANS1}, symbolic ;
55 param tr1_k1{TRANS1} ;
56 param tr1_icap{TRANS1} ;
57 param tr1_ocap{TRANS1} ;
58 param tr1_capex{TRANS1} ;
59 param tr1_opex{TRANS1} ;
60
61 param tr2_name{TRANS2}, symbolic ;
62 param tr2_ilnode{TRANS2}, integer ;
63 param tr2_ilid{TRANS2}, symbolic ;
64 param tr2_i2node{TRANS2}, integer ;
65 param tr2_i2id{TRANS2}, symbolic ;
66 param tr2_onode{TRANS2}, integer ;
67 param tr2_oid{TRANS2}, symbolic ;
68 param tr2_k1{TRANS2} ;
69 param tr2_k2{TRANS2} ;
70 param tr2_ilcap{TRANS2} ;
71 param tr2_i2cap{TRANS2} ;
72 param tr2_ocap{TRANS2} ;
73 param tr2_capex{TRANS2} ;
74 param tr2_opex{TRANS2} ;
75
76 param tr3_name{TRANS3}, symbolic ;
77 param tr3_ilnode{TRANS3}, integer ;
78 param tr3_ilid{TRANS3}, symbolic ;
79 param tr3_i2node{TRANS3}, integer ;

```

```

80  param tr3_i2id{TRANS3}, symbolic ;
81  param tr3_i3node{TRANS3}, integer ;
82  param tr3_i3id{TRANS3}, symbolic ;
83  param tr3_onode{TRANS3}, integer ;
84  param tr3_oid{TRANS3}, symbolic ;
85  param tr3_k1{TRANS3} ;
86  param tr3_k2{TRANS3} ;
87  param tr3_k3{TRANS3} ;
88  param tr3_ilcap{TRANS3} ;
89  param tr3_i2cap{TRANS3} ;
90  param tr3_i3cap{TRANS3} ;
91  param tr3_ocap{TRANS3} ;
92  param tr3_capex{TRANS3} ;
93  param tr3_opex{TRANS3} ;
94
95
96
97  param tr3_2_name{TRANS3_2}, symbolic ;
98  param tr3_2_ilnode{TRANS3_2}, integer ;
99  param tr3_2_ilid{TRANS3_2}, symbolic ;
100 param tr3_2_i2node{TRANS3_2}, integer ;
101 param tr3_2_i2id{TRANS3_2}, symbolic ;
102 param tr3_2_i3node{TRANS3_2}, integer ;
103 param tr3_2_i3id{TRANS3_2}, symbolic ;
104 param tr3_2_onode{TRANS3_2}, integer ;
105 param tr3_2_oid{TRANS3_2}, symbolic ;
106 param tr3_2_o2node{TRANS3_2}, integer ;
107 param tr3_2_o2id{TRANS3_2}, symbolic ;
108 param tr3_2_k1{TRANS3_2} ;
109 param tr3_2_k2{TRANS3_2} ;
110 param tr3_2_k3{TRANS3_2} ;
111 param tr3_2_ilcap{TRANS3_2} ;
112 param tr3_2_i2cap{TRANS3_2} ;
113 param tr3_2_i3cap{TRANS3_2} ;
114 param tr3_2_ocap{TRANS3_2} ;
115 param tr3_2_o2cap{TRANS3_2} ;
116 param tr3_min{TRANS3_2} ;
117 param tr3_2_capex{TRANS3_2} ;
118 param tr3_2_opex{TRANS3_2} ;
119
120
121 param tr4_name{TRANS4}, symbolic ;
122 param tr4_ilnode{TRANS4}, integer ;
123 param tr4_ilid{TRANS4}, symbolic ;
124 param tr4_i2node{TRANS4}, integer ;
125 param tr4_i2id{TRANS4}, symbolic ;

```

```

126 param tr4_i3node{TRANS4}, integer ;
127 param tr4_i3id{TRANS4}, symbolic ;
128 param tr4_i4node{TRANS4}, integer ;
129 param tr4_i4id{TRANS4}, symbolic ;
130 param tr4_onode{TRANS4}, integer ;
131 param tr4_oid{TRANS4}, symbolic ;
132 param tr4_k1{TRANS4} ;
133 param tr4_k2{TRANS4} ;
134 param tr4_k3{TRANS4} ;
135 param tr4_k4{TRANS4} ;
136 param tr4_i1cap{TRANS4} ;
137 param tr4_i2cap{TRANS4} ;
138 param tr4_i3cap{TRANS4} ;
139 param tr4_i4cap{TRANS4} ;
140 param tr4_ocap{TRANS4} ;
141 param tr4_capex{TRANS4} ;
142 param tr4_opex{TRANS4} ;
143
144 param edge_from_node{EDGES}, integer ;
145 param edge_to_node{EDGES}, integer ;
146 param edge_name{EDGES}, symbolic ;
147
148 param ts_data{PERIODS,TIMESERIES} ;
149
150 /*****/
151 /** VARIABLES DE DECISION **/
152 /*****/
153 var x{EDGES,PERIODS}, >= 0 ;
154 var y{STORAGES,PERIODS}, >= 0 ;
155
156
157 /*****/
158 /** OBJETIVO **/
159 /*****/
160 maximize NH3_production:
161     sum{j in EDGES, t in PERIODS : edge_from_node[j] == 55} x[j,t];
162
163
164
165
166 /*****/
167 /** RESTRICCIONES **/
168 /*****/
169 #.....
170 s.t. src_limit {i in SOURCES, t in PERIODS}:
171     sum{j in EDGES: (edge_from_node[j]==src_node[i])} x[j,t] <= src_cap[

```

```

    i] ;
172
173 s.t. src_balance {i in SOURCES, t in PERIODS}:
174     sum{j in EDGES: (edge_from_node[j]==src_node[i])} x[j,t] == ts_data[
        t,src_ts[i]] ;
175
176 #.....
177 s.t. sto_ilimit {i in STORAGES, t in PERIODS}:
178     sum{j in EDGES: (edge_to_node[j]==sto_inode[i])} x[j,t] <= sto_icap[
        i] ;
179
180 s.t. sto_olimit {i in STORAGES, t in PERIODS}:
181     sum{j in EDGES: (edge_from_node[j]==sto_onode[i])} x[j,t] <=
        sto_ocap[i] ;
182
183 s.t. sto_limit {i in STORAGES, t in PERIODS}:
184     y[i,t] <= sto_cap[i] ;
185
186
187
188 s.t. sto_balance {i in STORAGES, t in PERIODS}:
189     y[i,t] - (if (t>1) then y[i,t-1] else y[i,NPERIODS]) ==
190         sum{j in EDGES: (edge_to_node[j]==sto_inode[i])} x[j,t] -
191         sum{j in EDGES: (edge_from_node[j]==sto_onode[i])} x[
            j,t] ;
192
193 #.....
194 s.t. tr1_ilimit {i in TRANS1, t in PERIODS}:
195     sum{j in EDGES: (edge_to_node[j]==tr1_inode[i])} x[j,t] <= tr1_icap[
        i] ;
196
197 s.t. tr1_olimit {i in TRANS1, t in PERIODS}:
198     sum{j in EDGES: (edge_from_node[j]==tr1_onode[i])} x[j,t] <=
        tr1_ocap[i] ;
199
200 s.t. tr1_ibalance {i in TRANS1, t in PERIODS}:
201     sum{j in EDGES: (edge_to_node[j]==tr1_inode[i])} x[j,t] ==
202         tr1_k1[i]*sum{j in EDGES: (edge_from_node[j]==tr1_onode[i])
            } x[j,t] ;
203
204 #.....
205 s.t. tr2_illimit {i in TRANS2, t in PERIODS}:
206     sum{j in EDGES: (edge_to_node[j]==tr2_ilnode[i])} x[j,t] <=
        tr2_ilcap[i] ;
207
208 s.t. tr2_i2limit {i in TRANS2, t in PERIODS}:

```

```

209     sum{j in EDGES: (edge_to_node[j]==tr2_i2node[i])} x[j,t] <=
        tr2_i2cap[i] ;
210
211 s.t. tr2_olimit {i in TRANS2, t in PERIODS}:
212     sum{j in EDGES: (edge_from_node[j]==tr2_onode[i])} x[j,t] <=
        tr2_ocap[i] ;
213
214 s.t. tr2_ilbalance {i in TRANS2, t in PERIODS}:
215     sum{j in EDGES: (edge_to_node[j]==tr2_ilnode[i])} x[j,t] ==
216     tr2_k1[i]*sum{j in EDGES: (edge_from_node[j]==tr2_onode[i])
        } x[j,t] ;
217
218 s.t. tr2_i2balance {i in TRANS2, t in PERIODS}:
219     sum{j in EDGES: (edge_to_node[j]==tr2_i2node[i])} x[j,t] ==
220     tr2_k2[i]*sum{j in EDGES: (edge_from_node[j]==tr2_onode[i])
        } x[j,t] ;
221
222 #.....
223 s.t. tr3_illimit {i in TRANS3, t in PERIODS}:
224     sum{j in EDGES: (edge_to_node[j]==tr3_ilnode[i])} x[j,t] <=
        tr3_ilcap[i] ;
225
226 s.t. tr3_i2limit {i in TRANS3, t in PERIODS}:
227     sum{j in EDGES: (edge_to_node[j]==tr3_i2node[i])} x[j,t] <=
        tr3_i2cap[i] ;
228
229 s.t. tr3_i3limit {i in TRANS3, t in PERIODS}:
230     sum{j in EDGES: (edge_to_node[j]==tr3_i3node[i])} x[j,t] <=
        tr3_i3cap[i] ;
231
232 s.t. tr3_olimit {i in TRANS3, t in PERIODS}:
233     sum{j in EDGES: (edge_from_node[j]==tr3_onode[i])} x[j,t] <=
        tr3_ocap[i] ;
234
235 s.t. tr3_ilbalance {i in TRANS3, t in PERIODS}:
236     sum{j in EDGES: (edge_to_node[j]==tr3_ilnode[i])} x[j,t] ==
237     tr3_k1[i]*sum{j in EDGES: (edge_from_node[j]==tr3_onode[i])
        } x[j,t] ;
238
239 s.t. tr3_i2balance {i in TRANS3, t in PERIODS}:
240     sum{j in EDGES: (edge_to_node[j]==tr3_i2node[i])} x[j,t] ==
241     tr3_k2[i]*sum{j in EDGES: (edge_from_node[j]==tr3_onode[i])
        } x[j,t] ;
242
243 s.t. tr3_i3balance {i in TRANS3, t in PERIODS}:
244     sum{j in EDGES: (edge_to_node[j]==tr3_i3node[i])} x[j,t] ==

```

```

245         tr3_k3[i]*sum{j in EDGES: (edge_from_node[j]==tr3_onode[i])
           } x[j,t] ;
246
247
248 #.....
249 s.t. tr3_2_i1limit {i in TRANS3_2, t in PERIODS}:
250     sum{j in EDGES: (edge_to_node[j]==tr3_2_i1node[i])} x[j,t] <=
        tr3_2_i1cap[i] ;
251
252 s.t. tr3_2_i2limit {i in TRANS3_2, t in PERIODS}:
253     sum{j in EDGES: (edge_to_node[j]==tr3_2_i2node[i])} x[j,t] <=
        tr3_2_i2cap[i] ;
254
255 s.t. tr3_2_i3limit {i in TRANS3_2, t in PERIODS}:
256     sum{j in EDGES: (edge_to_node[j]==tr3_2_i3node[i])} x[j,t] <=
        tr3_2_i3cap[i] ;
257
258 s.t. tr3_2_olimit {i in TRANS3_2, t in PERIODS}:
259     sum{j in EDGES: (edge_from_node[j]==tr3_2_onode[i])} x[j,t] <=
        tr3_2_ocap[i] ;
260
261 s.t. tr3_2_o2limit {i in TRANS3_2, t in PERIODS}:
262     sum{j in EDGES: (edge_from_node[j]==tr3_2_o2node[i])} x[j,t] <=
        tr3_2_o2cap[i] ;
263
264 s.t. tr3_2_i1balance {i in TRANS3_2, t in PERIODS}:
265     sum{j in EDGES: (edge_to_node[j]==tr3_2_i1node[i])} x[j,t] ==
266         tr3_2_k1[i]*sum{j in EDGES: (edge_from_node[j]==tr3_2_onode
           [i])} x[j,t] ;
267
268 s.t. tr3_2_i2balance {i in TRANS3_2, t in PERIODS}:
269     sum{j in EDGES: (edge_to_node[j]==tr3_2_i2node[i])} x[j,t] ==
270         tr3_2_k2[i]*sum{j in EDGES: (edge_from_node[j]==tr3_2_onode
           [i])} x[j,t] ;
271
272 s.t. tr3_2_i3balance {i in TRANS3_2, t in PERIODS}:
273     sum{j in EDGES: (edge_to_node[j]==tr3_2_i3node[i])} x[j,t] ==
274         tr3_2_k3[i]*sum{j in EDGES: (edge_from_node[j]==tr3_2_onode
           [i])} x[j,t] ;
275
276 s.t. tr3_2_oxygen_balance {i in TRANS3_2, t in PERIODS}:
277     sum {j in EDGES: edge_from_node[j] == tr3_2_o2node[i]} x[j,t] ==
278         8 * sum {j in EDGES: edge_from_node[j] == tr3_2_onode[i]} x[j,t]
        ;
279
280 #.....

```

```

281 s.t. tr4_i1limit {i in TRANS4, t in PERIODS}:
282     sum{j in EDGES: (edge_to_node[j]==tr4_i3node[i])} x[j,t] <=
        tr4_i3cap[i] ;
283
284 s.t. tr4_i2limit {i in TRANS4, t in PERIODS}:
285     sum{j in EDGES: (edge_to_node[j]==tr4_i2node[i])} x[j,t] <=
        tr4_i2cap[i] ;
286
287 s.t. tr4_i3limit {i in TRANS4, t in PERIODS}:
288     sum{j in EDGES: (edge_to_node[j]==tr4_i1node[i])} x[j,t] <=
        tr4_i1cap[i] ;
289
290 s.t. tr4_i4limit {i in TRANS4, t in PERIODS}:
291     sum{j in EDGES: (edge_to_node[j]==tr4_i4node[i])} x[j,t] <=
        tr4_i4cap[i] ;
292
293 s.t. tr4_olimit {i in TRANS4, t in PERIODS}:
294     sum{j in EDGES: (edge_from_node[j]==tr4_onode[i])} x[j,t] <=
        tr4_ocap[i] ;
295
296 s.t. tr4_i1balance {i in TRANS4, t in PERIODS}:
297     sum{j in EDGES: (edge_to_node[j]==tr4_i1node[i])} x[j,t] ==
298         tr4_k1[i]*sum{j in EDGES: (edge_from_node[j]==tr4_onode[i])
        } x[j,t] ;
299
300 s.t. tr4_i2balance {i in TRANS4, t in PERIODS}:
301     sum{j in EDGES: (edge_to_node[j]==tr4_i2node[i])} x[j,t] ==
302         tr4_k2[i]*sum{j in EDGES: (edge_from_node[j]==tr4_onode[i])
        } x[j,t] ;
303
304 s.t. tr4_i3balance {i in TRANS4, t in PERIODS}:
305     sum{j in EDGES: (edge_to_node[j]==tr4_i3node[i])} x[j,t] ==
306         tr4_k3[i]*sum{j in EDGES: (edge_from_node[j]==tr4_onode[i])
        } x[j,t] ;
307
308 s.t. tr4_i4balance {i in TRANS4, t in PERIODS}:
309     sum{j in EDGES: (edge_to_node[j]==tr4_i4node[i])} x[j,t] ==
310         tr4_k4[i]*sum{j in EDGES: (edge_from_node[j]==tr4_onode[i])
        } x[j,t] ;

```

A.2. Archivo `hv.run`

Corresponde al archivo de ejecución del modelo lineal, encargado de cargar los archivos de formulación (.mod) y de datos (.dat), configurar el solver, resolver el problema de optimización y gestionar la generación de los datos de salida.

```

1  /*****
2  /** CONFIGURACION SOLVER **/
3  *****/
4
5  option solver gurobi ;
6  option log_file 'hv.log';
7  model hv.mod ;
8  data hv.dat ;
9  param csvFile symbolic := "hv.csv";
10 param ecoFile symbolic := "hv_eco.csv";
11 param DEL symbolic := ",";
12
13
14 /*****
15 /** OPTIMIZACION **/
16 *****/
17 solve;
18
19
20
21
22
23
24 # --- Declaracion de todos los parametros de maximos ---
25 param max_x5;
26 param max_x10;
27 param max_x17;
28 param max_x18;
29 param max_x20;
30 param max_x36;
31 param max_x38;
32
33 param max_node22;
34 param max_node37;
35 param max_node40;
36 param max_node50;
37 param max_node55;
38 param max_node31;
39
40 param max_y1;

```

```

41 param max_y2;
42 param max_y3;
43 param max_y4;
44
45
46 # --- Asignacion de valores de maximos (despues del solve) ---
47 let max_x5 := max {t in PERIODS} x[5,t];
48 let max_x10 := max {t in PERIODS} x[10,t];
49 let max_x17 := max {t in PERIODS} x[17,t];
50 let max_x18 := max {t in PERIODS} x[18,t];
51 let max_x20 := max {t in PERIODS} x[20,t];
52 let max_x36 := max {t in PERIODS} x[36,t];
53 let max_x38 := max {t in PERIODS} x[38,t];
54
55 let max_node22 := max {t in PERIODS} ( sum{j in EDGES: edge_from_node[j]
    ] == tr2_onode[3]} x[j,t] );
56 let max_node37 := max {t in PERIODS} ( sum{j in EDGES: edge_from_node[j]
    ] == tr2_onode[5]} x[j,t] );
57 let max_node40 := max {t in PERIODS} ( sum{j in EDGES: edge_from_node[j]
    ] == tr2_onode[6]} x[j,t] );
58 let max_node50 := max {t in PERIODS} ( sum{j in EDGES: edge_to_node[j]
    == tr3_onode[1]} x[j,t] );
59 let max_node55 := max {t in PERIODS} ( sum{j in EDGES: edge_from_node[j]
    ] == tr4_onode[1]} x[j,t] );
60 let max_node31 := max {t in PERIODS} ( sum{j in EDGES: edge_from_node[j]
    ] == tr3_2_onode[1]} x[j,t] );
61
62 let max_y1 := max {t in PERIODS} y[1,t];
63 let max_y2 := max {t in PERIODS} y[2,t];
64 let max_y3 := max {t in PERIODS} y[3,t];
65 let max_y4 := max {t in PERIODS} y[4,t];
66
67
68 # --- Declaracion de resultados ---
69 param capex_calc;
70 param opex_calc;
71 param ing_calc;
72 param NH3_annual_prod;
73 param H2_annual_prod;
74 # --- Resultados ---
75 let capex_calc :=
76     src_capex[1]*src_cap[1]
77     + sto_capex[1]*max_y1
78     + sto_capex[2]*max_y2
79     + sto_capex[3]*max_y3
80     + sto_capex[4]*max_y4

```

```

81      + tr1_capex[3]*max_x5
82      + tr1_capex[5]*2
83      + (tr2_capex[1] + tr2_capex[2]) * max_x17
84      + tr2_capex[3]*max_x10
85      + tr2_capex[4]*max_x20
86      + tr2_capex[5]*max_node37
87      + tr2_capex[6]*max_node40
88      + tr3_capex[1]*max_x36
89      + tr3_2_capex[1]*max_node31
90      + tr4_capex[1]*max_x38
91      + 130000000 + 57700*2;
92
93  let opex_calc :=
94      src_opex[1]*src_cap[1]
95      + sto_opex[1]*max_y1
96      + sto_opex[2]*max_y2
97      + sto_opex[3]*max_y3
98      + sto_opex[4]*max_y4
99      + tr1_opex[3]*max_x5
100     + tr1_opex[5]*2
101     + (tr2_opex[1] + tr2_opex[2]) * max_x17
102     + tr2_opex[3]*max_x10
103     + tr2_opex[4]*max_x20
104     + tr2_opex[5]*max_node37
105     + tr2_opex[6]*max_node40
106     + tr3_opex[1]*max_x36
107     + tr3_2_opex[1]*max_node31
108     + tr4_opex[1]*max_x38
109     + 577*2;
110
111  let ing_calc :=
112      ( sum{j in EDGES, t in PERIODS: edge_from_node[j] == 55} x[j,t] ) *
113        1.1 * 1000;
114
115  # --- Mostrar ---
116  display capex_calc, opex_calc, ing_calc;
117
118
119  let NH3_annual_prod :=
120      sum{j in EDGES, t in PERIODS : edge_from_node[j] == 55} x[j,t];
121
122  let H2_annual_prod :=
123      sum{j in EDGES, t in PERIODS : edge_from_node[j] == 31} x[j,t];
124
125

```

```

126
127
128 # =====
129 # Mostrar en pantalla todos los maximos relevantes
130 # =====
131
132 print "===== CAPACIDADES CALCULADAS =====";
133
134 # Fuente renovable
135 print "Wind Plant (MW) ..... ", src_cap[1];
136
137 # Almacenamientos
138 print "BESS (MWh) ..... ", max_y1;
139 print "Demineralized Water Storage (m3) .... ", max_y2;
140 #print "Oxygen Storage (ton) ..... ", max_y3;
141 print "Hydrogen Storage (ton) ..... ", max_y3;
142 print "Ammonia Storage (ton) ..... ", max_y4;
143
144 # Agua y bombeo
145 print "Desalination Plant (m3/h) ..... ", max_x17;
146 print "Water Pumping (m3/h) ..... ", max_x17;
147 print "Water Pipeline (km) ..... ", 2;
148
149 # Demineralizacion
150 print "Demineralized Water (m3/h) ..... ", max_x20;
151
152 # Cooling System
153 print "Cooling System (MWth) ..... ", max_node22;
154
155 # Electrolizador y cadena de H2
156 print "Electrolyzer H2 (t/h) ..... ", max_node31;
157 print "Compressor 30/100 (t/h) ..... ", max_node37;
158 print "Compressor 100/200 (t/h) ..... ", max_node40;
159
160 # ASU y Haber-Bosch
161 print "ASU N2 (t/h) ..... ", max_x36;
162 print "Haber-Bosch NH3 (t/h) ..... ", max_x38;
163
164 print "===== ";
165
166
167
168
169
170
171

```

```

172 printf "Tiempo de solucion: %.3f segundos\n", _solve_elapsed_time;
173 print "H2 production (ton) ..... ", sum{e in EDGES, t in PERIODS :
      edge_from_node[e] == 31} x[e,t] ;
174 print "NH3 production (%) ..... ", sum{j in EDGES, t in PERIODS :
      edge_from_node[j] == 55} x[j,t] ;
175 print "Energy spillage (%) ..... ", 100*(sum{t in PERIODS} x[40,t])/
      sum{t in PERIODS} ts_data[t,1]) ;
176
177
178 /*****
179 /** POSTPROCESOS **/
180 *****/
181 printf "Period (h)" > (csvFile) ;
182 for {i in EDGES} {
183     printf "%s%s", DEL, edge_name[i] >> (csvFile) ;
184 }
185 for {i in STORAGES} {
186     printf "%s%s (m3)", DEL, sto_name[i] >> (csvFile) ;
187 }
188 for {i in SOURCES} {
189     printf "%s%s (MW)", DEL, src_name[i] >> (csvFile) ;
190 }
191 printf "\n" >> (csvFile) ;
192 for {t in PERIODS} {
193     printf "%d", t >> (csvFile) ;
194     for {i in EDGES} {
195         printf "%s%.6f", DEL, x[i,t] >> (csvFile) ;
196     }
197     for {i in STORAGES} {
198         printf "%s%.6f", DEL, y[i,t] >> (csvFile) ;
199     }
200     for {i in SOURCES} {
201         printf "%s%.6f", DEL, ts_data[t,src_ts[i]] >> (csvFile) ;
202     }
203     printf "\n" >> (csvFile) ;
204 }
205
206 # Encabezado
207 printf "Variable,Valor\n" > (ecoFile);
208
209 # KPIs principales
210 printf "CAPEX,%.6f\n", capex_calc >> (ecoFile);
211 printf "OPEX anual,%.6f\n", opex_calc >> (ecoFile);
212 printf "INGRESOS,%.6f\n", ing_calc >> (ecoFile);
213 printf "H2_prod,%.6f\n", H2_annual_prod >> (ecoFile);
214 printf "NH3_prod,%.6f\n", NH3_annual_prod >> (ecoFile);

```

```

215
216 # =====
217 # Capacidades instaladas (para tabla tipo Excel)
218 # =====
219
220 # Fuente renovable
221 printf "Cap_WindPlant_MW, %.6f\n", src_cap[1] >> (ecoFile);
222
223 # Almacenamientos (STORAGES)
224 printf "Cap_BEES_MWh, %.6f\n", max_y1 >> (ecoFile);
225 printf "Cap_DemWaterStorage_m3, %.6f\n", max_y2 >> (ecoFile);
226 printf "Cap_H2Storage_ton, %.6f\n", max_y3 >> (ecoFile);
227 printf "Cap_NH3Storage_ton, %.6f\n", max_y4 >> (ecoFile);
228
229 # Sistemas de agua y calor
230 printf "Cap_Desalination_m3ph, %.6f\n", max_x17 >> (ecoFile);
231 printf "Cap_WaterPumping_m3ph, %.6f\n", max_x17 >> (ecoFile);
232
233 printf "Cap_CoolingSystem_MWth, %.6f\n", max_node22 >> (ecoFile);
234 printf "Cap_DemineralizedWater_m3ph, %.6f\n", max_x20 >> (ecoFile);
235
236 # Electrolizador y cadena de H2
237 printf "Cap_Electrolyzer_tH2ph, %.6f\n", max_node31 >> (ecoFile);
238 printf "Cap_Comp30_100_tH2ph, %.6f\n", max_node37 >> (ecoFile);
239 printf "Cap_Comp100_200_tH2ph, %.6f\n", max_node40 >> (ecoFile);
240
241
242 # ASU y Haber-Bosch
243 printf "Cap_ASU_tN2ph, %.6f\n", max_x36 >> (ecoFile);
244 printf "Cap_HB_tNH3ph, %.6f\n", max_x38 >> (ecoFile);

```

A.3. Archivo hv.dat (extracto)

Por razones de extensión, en este anexo se presenta únicamente un extracto representativo del archivo de datos del modelo lineal. La serie temporal completa considera 8760 períodos horarios y fue utilizada en las simulaciones.

```

1  /*****
2  /** GENERAL **/
3  *****/
4  param NNODES := 60 ;
5  param NEDGES := 41 ;
6  param NSOURCE := 1 ;
7  param NTRANS1 := 7 ;
8  param NTRANS2 := 7 ;
9  param NTRANS3 := 1 ;
10 param NTRANS3_2 := 1 ;
11 param NTRANS4 := 1 ;
12 param NSTORAGE := 4 ;
13 param NTS := 1 ;
14 param NPERIODS := 8760 ;
15
16 /*****
17 /* Source elements
18 *****/
19 param: src_name src_node src_ts src_cap src_capex src_opex :=
20 1 "WindPlant" 1 1 1260 1210000 15000
21 ;
22
23 /*****
24 /* Storage system
25 *****/
26 param: sto_name sto_inode sto_onode sto_kl sto_icap sto_ocap sto_cap
      sto_capex sto_opex :=
27 1 "BESS (MWh)" 6 7 1.01010101 40.5 40.5 81 206000 2500
28 2 "DemineralizedWaterStorage (m3)" 26 27 1.0 225.42949 225.42949
      68765.21589 113 2
29 3 "HydrogenStorage (ton)" 41 42 1.0 17.10828 17.10828 52.82561 515000
      6200
30 4 "AmmoniaStorage (ton)" 58 59 1.0 300.0 300.0 68200.0 2346 24.8
31 ;
32
33
34 /*****
35 /* Transformation center 1 input
36 *****/
37 param: trl_name trl_inode trl_iid trl_onode trl_oid trl_kl trl_icap

```

```

    tr1_ocap tr1_capex tr1_opex :=
38 1 "ElectricalSubstation" 2 "EnergyIn" 3 "EnergyOut" 1.0 1260 1260 0 0
39 2 "DCin" 4 "EnergyIn" 5 "EnergyOut" 1.020408 92.9 91.1 0 0
40 3 "GridForming" 8 "EnergyIn" 9 "EnergyOut" 1.020408 77.8 76.2 51500 600
41 4 "DistributionLine" 10 "EnergyIn" 11 "EnergyOut" 1.0 7.0 7.0 750000
    7500
42 5 "WaterPipeline" 18 "DesalinatedWaterIn" 19 "DesalinatedWaterOut" 1.0
    659.0 659.0 500000 65000
43 6 "HydrogenDecompression" 43 "HydrogenIn" 44 "HydrogenOut" 1.0 1E6 1E6
    0 0
44 7 "Mixer" 45 "HydrogenIn" 46 "HydrogenOut" 1.0 1E6 1E6 0 0
45 ;
46
47 /*****
48 /* Transformation center 2 input
49 /*****
50 param: tr2_name tr2_ilnode tr2_ilid tr2_i2node tr2_i2id tr2_onode
    tr2_oid tr2_k1 tr2_k2 tr2_ilcap tr2_i2cap tr2_ocap tr2_capex
    tr2_opex :=
51 1 "DesalinationPlant" 12 "Energy" 13 "SeaWater" 14 "DesalinatedWater"
    0.004 2.0 3.0 1318.0 659.0 41200 994
52 2 "WaterPumping" 15 "Energy" 16 "DesalinatedWaterIn" 17 "
    DesalinatedWaterOut" 0.0062 1.0 4.1 659.0 659.0 26450 608
53 3 "CoolingSystem" 20 "Energy" 21 "DesalinatedWater" 22 "Cooling" 0.018
    1.719 7.0 659.0 383.0 36600 1100
54 4 "DesmineralizationPlant" 23 "Energy" 24 "DesalinatedWater" 25 "
    DemineralizedWater" 0.0017 1.67 0.33 319.0 191.0 9270 335
55 5 "Compression30_100" 35 "Energy" 36 "HydrogenIn" 37 "HydrogenOut" 0.74
    1.0 2.0 2.0 2.0 610426 29600
56 6 "Compression100_200" 38 "Energy" 39 "HydrogenIn" 40 "HydrogenOut"
    0.48 1.0 2.0 2.0 2.0 488160 24000
57 7 "AmmoniaRefrigeration" 60 "Energy" 56 "AmmoniaIn" 57 "AmmoniaOut"
    0.038 1.0 1E6 1E6 1E6 0 0
58 ;
59
60 /*****
61 /* Transformation center 3 input
62 /*****
63 param: tr3_name tr3_ilnode tr3_ilid tr3_i2node tr3_i2id tr3_i3node
    tr3_i3id tr3_onode tr3_oid tr3_k1 tr3_k2 tr3_k3 tr3_ilcap tr3_i2cap
    tr3_i3cap tr3_ocap tr3_capex tr3_opex :=
64 1 "AirSeparatorUnit" 47 "Energy" 48 "Cooling" 49 "Air" 50 "Nitrogen"
    0.208 0.49 1.3 17.0 39.0 104.0 80.0 705000 21260
65 ;
66
67 /*****/

```

```

68  /* Transformation center 3 input 2 output
69  /*****
70  param: tr3_2_name tr3_2_ilnode tr3_2_ilid tr3_2_i2node tr3_2_i2id
        tr3_2_i3node tr3_2_i3id tr3_2_onode tr3_2_oid tr3_2_o2node
        tr3_2_o2id tr3_2_k1 tr3_2_k2 tr3_2_k3 tr3_2_ilcap tr3_2_i2cap
        tr3_2_i3cap tr3_2_ocap tr3_2_o2cap tr3_min tr3_2_capex tr3_2_opex
        :=
71  1 "Electrolysis" 28 "Energy" 29 "DemineralizedWater" 30 "Cooling" 31 "
        Hydrogen" 32 "Oxygen" 56.0 11.0 12.7 2000 202.0 233.0 18.33 1E6 0.1
        31388000 784700
72  ;
73
74  /*****
75  /* Transformation center 4 input
76  /*****
77  param: tr4_name tr4_ilnode tr4_ilid tr4_i2node tr4_i2id tr4_i3node
        tr4_i3id tr4_i4node tr4_i4id tr4_onode tr4_oid tr4_k1 tr4_k2 tr4_k3
        tr4_k4 tr4_ilcap tr4_i2cap tr4_i3cap tr4_i4cap tr4_ocap tr4_capex
        tr4_opex :=
78  1 "HaberBosch" 51 "Nitrogen" 52 "Cooling" 53 "Energy" 54 "Hydrogen" 55
        "Ammonia" 0.8235 0.74 0.13 0.1765 80.0 72.0 13.0 17.0 97.0 2657760
        80130
79  ;
80
81  /*****
82  /* Edges (variables)
83  /*****
84  param: edge_from_node edge_to_node edge_name :=
85  1 0 13 "Sea water (m3/h) "
86  2 1 2 "Energy S/E (MW) "
87  3 3 4 "Energy DCin (MW) "
88  4 5 6 "Energy BESS (MW) "
89  5 7 8 "Energy GF (MW) "
90  6 9 2 "Energy GF to S/E (MW) "
91  7 3 10 "Energy Line (MW) "
92  8 11 12 "Energy DS (MW) "
93  9 11 15 "Energy WP (MW) "
94  10 3 20 "Energy CS (MW) "
95  11 3 23 "Energy DM (MW) "
96  12 3 28 "Energy EL (MW) "
97  13 3 35 "Energy Comp 30/100 (MW) "
98  14 3 38 "Energy Comp 100/200 (MW) "
99  15 3 47 "Energy ASU (MW) "
100 16 3 53 "Energy HB (MW) "
101 17 14 16 "Desalinated water WP (m3/h) "
102 18 17 18 "Desalinated water PL (m3/h) "

```

```

103 19 19 21 "Desalinated water CS (m3/h) "
104 20 19 24 "Desalinated water DM (m3/h) "
105 21 25 29 "Demineralized water EL (m3/h) "
106 22 25 26 "Demineralized water ST (m3/h) "
107 23 27 29 "Demineralized water ST-EL (m3/h) "
108 24 22 30 "Heat EL (MWt) "
109 25 32 0 "Oxygen Spillage (ton/h) "
110 26 31 45 "Hydrogen MX (ton/h) "
111 27 31 36 "Hydrogen Comp 30/100 (ton/h) "
112 28 37 39 "Hydrogen Comp 100/200 (ton/h) "
113 29 40 41 "Hydrogen ST (ton/h) "
114 30 42 43 "Hydrogen Comp 200/30 (ton/h) "
115 31 44 45 "Hydrogen Comp to MX (ton/h) "
116 32 46 54 "Hydrogen MX to HB (ton/h) "
117 33 0 49 "Air ASU (ton/h) "
118 34 22 48 "Heat ASU (MWt) "
119 35 50 51 "Nitrogen HB (ton/h) "
120 36 22 52 "Heat HB (MWt) "
121 37 55 56 "Ammonia to refrigerated (ton/h) "
122 38 57 58 "Ammonia refrigerated to ST (ton/h) "
123 39 59 0 "Ammonia ST to Port (ton/h) "
124 40 1 0 "Energy spillage (MW) "
125 41 3 60 "Energy ammonia refrigerated (MW) "
126 ;
127
128 /*****
129 /* Time series (MW)
130 /*****
131 param ts_data: 1 :=
132 1 46.3
133 2 19.5
134 3 14.6
135 4 25.3
136 5 6.0
137 6 0.0
138 7 0.0
139 8 0.0
140 9 0.0
141 10 0.0
142 11 0.0
143 12 15.4
144 13 30.4
145 14 58.6
146 15 179.6
147 16 281.3
148 17 355.6

```

```
149 18 273.2
150 19 426.0
151 20 308.6
152 21 361.6
153 22 307.1
154 23 296.3
155 24 243.5;
```

A.4. Archivo hvNL.mod

Este archivo define la estructura del modelo de optimización no lineal, el cual incorpora aproximaciones por tramos (PWL) para representar funciones no lineales, incluyendo la función objetivo y el conjunto de restricciones que describen los procesos, los flujos y las limitaciones operacionales del sistema.

```

1  /*****
2  /** CONJUNTOS **/
3  *****/
4  param NNODES, >=1 , integer;
5  set NODES := 0..NNODES;
6  param NEDGES, >=1 , integer;
7  set EDGES := 1..NEDGES;
8  param NSOURCE, >=1 , integer ;
9  set SOURCES := 1..NSOURCE ;
10 param NTRANS1, >=0 , integer ;
11 set TRANS1 := 1..NTRANS1 ;
12 param NTRANS2, >=0 , integer ;
13 set TRANS2 := 1..NTRANS2 ;
14 param NTRANS3, >=0 , integer ;
15 set TRANS3 := 1..NTRANS3 ;
16 param NTRANS3_2, >=0 , integer ;
17 set TRANS3_2 := 1..NTRANS3_2 ;
18 param NTRANS4, >=0 , integer ;
19 set TRANS4 := 1..NTRANS4 ;
20 param NSTORAGE, >=0 , integer ;
21 set STORAGES := 1..NSTORAGE ;
22 param NSTORAGE2, >=0 , integer ;
23 set STORAGES2 := 1..NSTORAGE2 ;
24 param NTS, >=1 , integer ;
25 set TIMESERIES := 1..NTS ;
26 param NPERIODS, >=1 , integer ;
27 set PERIODS := 1..NPERIODS ;
28
29 param total_electrolizers := 60; # Total de electrolizadores
30
31
32 # =====
33 # PARAMETROS ELECTROQUIMICOS
34 # =====
35
36
37 # Constantes fisicoquimicas
38 param F := 96485; # Constante de Faraday [C/mol]
39 param R := 8.314462618; # Constante de los gases [J/mol/K]

```

```

40
41
42
43 # Configuracion de electrolizadores
44 param stacks_per_electrolizer := 24; # Stacks por electrolizador
45 param cells_per_stack := 25; # Celdas por stack
46 param cell_area := 6000; # Area por celda [cm^2]
47 param A_unit := stacks_per_electrolizer * cells_per_stack * cell_area;
    # Area por electrolizador [cm^2]
48
49
50 param i_dens_min := 0.3864; # Minimo tecnico [A/cm^2]
51 param i_dens_max := 1.778; # Maximo [A/cm^2]
52 # =====
53 # LINEALIZACION PWL DE LA CURVA DE POLARIZACION
54 # =====
55
56
57 param b1 > 0;
58 param b2 > b1;
59 param b3 > b2;
60 param b4 > b3;
61 param b5 > b4;
62 param b6 > b5;
63 param b7 > b6;
64 param b8 > b7;
65 param b9 > b8;
66 param b10 > b9;
67 param b11 > b10;
68 #param b12 > b11;
69 #param b13 > b12;
70 #param b14 > b13;
71 #param b15 > b14;
72
73 param r0 >= 0;
74 param r1 >= 0;
75 param r2 >= 0;
76 param r3 >= 0;
77 param r4 >= 0;
78 param r5 >= 0;
79 param r6 >= 0;
80 param r7 >= 0;
81 param r8 >= 0;
82 param r9 >= 0;
83 param r10 >= 0;
84 param r11 >= 0;

```

```

85 #param r12 >= 0;
86 #param r13 >= 0;
87 #param r14 >= 0;
88 #param r15 >= 0;
89
90 param h1 > 0;
91 param h2 > h1;
92 param h3 > h2;
93 #param h4 > h3;
94 #param h5 > h4;
95 #param h6 > h5;
96
97 param q0 >= 0;
98 param q1 >= 0;
99 param q2 >= 0;
100 param q3 >= 0;
101 #param q4 >= 0;
102 #param q5 >= 0;
103 #param q6 >= 0;
104
105 # =====
106 # VARIABLES
107 # =====
108 var x{EDGES,PERIODS}, >= 0 ; # Flujo en arcos
109 var y{STORAGES,PERIODS}, >= 0 ; # Almacenamiento
110 var y2{STORAGES2,PERIODS}, >= 0 ;
111 var H2_injection {t in PERIODS} >= 0; # Produccion total H2 [ton/h]
112 var Power {t in PERIODS} >= 0;
113 var i_dens{t in PERIODS} >= 0;
114 var V_cell{t in PERIODS} >= 0;
115 var z{t in PERIODS} binary;
116 var p_h2{t in PERIODS} >= 0;
117 /*****
118 /** GENERAL **/
119 *****/
120 param src_name{SOURCES}, symbolic ;
121 param src_node{SOURCES}, integer ;
122 param src_ts{SOURCES}, integer ;
123 param src_cap{SOURCES} ;
124 param src_capex{SOURCES} ;
125 param src_opex{SOURCES} ;
126
127 param sto_name{STORAGES}, symbolic ;
128 param sto_inode{STORAGES}, integer ;
129 param sto_onode{STORAGES}, integer ;
130 param sto_k1{STORAGES} ;

```

```

131 param sto_icap{STORAGES} ;
132 param sto_ocap{STORAGES} ;
133 param sto_cap{STORAGES} ;
134 param sto_capmin{STORAGES} ;
135 param sto_capex{STORAGES} ;
136 param sto_opex{STORAGES} ;
137
138 param sto2_name{STORAGES2}, symbolic ;
139 param sto2_inode{STORAGES2}, integer ;
140 param sto2_onode{STORAGES2}, integer ;
141 param sto2_k1{STORAGES2} ;
142 param sto2_icap{STORAGES2} ;
143 param sto2_ocap{STORAGES2} ;
144 param sto2_cap{STORAGES2} ;
145 param sto2_capmin{STORAGES2} ;
146 param sto2_capex{STORAGES2} ;
147 param sto2_opex{STORAGES2} ;
148 param sto2_ieta{STORAGES2} ;
149 param sto2_oeta{STORAGES2} ;
150 param sto2_sigma{STORAGES2} ;
151
152 param tr1_name{TRANS1}, symbolic ;
153 param tr1_inode{TRANS1}, integer ;
154 param tr1_iid{TRANS1}, symbolic ;
155 param tr1_onode{TRANS1}, integer ;
156 param tr1_oid{TRANS1}, symbolic ;
157 param tr1_k1{TRANS1} ;
158 param tr1_icap{TRANS1} ;
159 param tr1_ocap{TRANS1} ;
160 param tr1_capex{TRANS1} ;
161 param tr1_opex{TRANS1} ;
162
163 param tr2_name{TRANS2}, symbolic ;
164 param tr2_ilnode{TRANS2}, integer ;
165 param tr2_ilid{TRANS2}, symbolic ;
166 param tr2_i2node{TRANS2}, integer ;
167 param tr2_i2id{TRANS2}, symbolic ;
168 param tr2_onode{TRANS2}, integer ;
169 param tr2_oid{TRANS2}, symbolic ;
170 param tr2_k1{TRANS2} ;
171 param tr2_k2{TRANS2} ;
172 param tr2_ilcap{TRANS2} ;
173 param tr2_i2cap{TRANS2} ;
174 param tr2_ocap{TRANS2} ;
175 param tr2_capex{TRANS2} ;
176 param tr2_opex{TRANS2} ;

```

```

177
178 param tr3_name{TRANS3}, symbolic ;
179 param tr3_ilnode{TRANS3}, integer ;
180 param tr3_ilid{TRANS3}, symbolic ;
181 param tr3_i2node{TRANS3}, integer ;
182 param tr3_i2id{TRANS3}, symbolic ;
183 param tr3_i3node{TRANS3}, integer ;
184 param tr3_i3id{TRANS3}, symbolic ;
185 param tr3_onode{TRANS3}, integer ;
186 param tr3_oid{TRANS3}, symbolic ;
187 param tr3_k1{TRANS3} ;
188 param tr3_k2{TRANS3} ;
189 param tr3_k3{TRANS3} ;
190 param tr3_ilcap{TRANS3} ;
191 param tr3_i2cap{TRANS3} ;
192 param tr3_i3cap{TRANS3} ;
193 param tr3_ocap{TRANS3} ;
194 param tr3_capex{TRANS3} ;
195 param tr3_opex{TRANS3} ;
196
197
198
199 param tr3_2_name{TRANS3_2}, symbolic ;
200 param tr3_2_ilnode{TRANS3_2}, integer ;
201 param tr3_2_ilid{TRANS3_2}, symbolic ;
202 param tr3_2_i2node{TRANS3_2}, integer ;
203 param tr3_2_i2id{TRANS3_2}, symbolic ;
204 param tr3_2_i3node{TRANS3_2}, integer ;
205 param tr3_2_i3id{TRANS3_2}, symbolic ;
206 param tr3_2_onode{TRANS3_2}, integer ;
207 param tr3_2_oid{TRANS3_2}, symbolic ;
208 param tr3_2_o2node{TRANS3_2}, integer ;
209 param tr3_2_o2id{TRANS3_2}, symbolic ;
210 param tr3_2_k1{TRANS3_2} ;
211 param tr3_2_k2{TRANS3_2} ;
212 param tr3_2_k3{TRANS3_2} ;
213 param tr3_2_ilcap{TRANS3_2} ;
214 param tr3_2_i2cap{TRANS3_2} ;
215 param tr3_2_i3cap{TRANS3_2} ;
216 param tr3_2_ocap{TRANS3_2} ;
217 param tr3_2_o2cap{TRANS3_2} ;
218 param tr3_min{TRANS3_2} ;
219 param tr3_2_capex{TRANS3_2} ;
220 param tr3_2_opex{TRANS3_2} ;
221
222

```

```

223 param tr4_name{TRANS4}, symbolic ;
224 param tr4_ilnode{TRANS4}, integer ;
225 param tr4_ilid{TRANS4}, symbolic ;
226 param tr4_i2node{TRANS4}, integer ;
227 param tr4_i2id{TRANS4}, symbolic ;
228 param tr4_i3node{TRANS4}, integer ;
229 param tr4_i3id{TRANS4}, symbolic ;
230 param tr4_i4node{TRANS4}, integer ;
231 param tr4_i4id{TRANS4}, symbolic ;
232 param tr4_onode{TRANS4}, integer ;
233 param tr4_oid{TRANS4}, symbolic ;
234 param tr4_k1{TRANS4} ;
235 param tr4_k2{TRANS4} ;
236 param tr4_k3{TRANS4} ;
237 param tr4_k4{TRANS4} ;
238 param tr4_ilcap{TRANS4} ;
239 param tr4_i2cap{TRANS4} ;
240 param tr4_i3cap{TRANS4} ;
241 param tr4_i4cap{TRANS4} ;
242 param tr4_ocap{TRANS4} ;
243 param tr4_capex{TRANS4} ;
244 param tr4_opex{TRANS4} ;
245
246 param edge_from_node{EDGES}, integer ;
247 param edge_to_node{EDGES}, integer ;
248 param edge_name{EDGES}, symbolic ;
249
250 param ts_data{PERIODS,TIMESERIES} ;
251
252 #var y {i in STORAGES, t in PERIODS}
253 # >= sto_capmin[i]
254 # <= sto_cap[i];
255 #var y2 {i in STORAGES2, t in PERIODS}
256 # >= sto2_capmin[i]
257 # <= sto2_cap[i];
258
259 #var p_h2{t in PERIODS} >= 20
260 # <= 200;
261 /*****
262 /** OBJETIVO **/
263 *****/
264
265
266 maximize NH3_production:
267     sum{j in EDGES, t in PERIODS : edge_from_node[j] == 55} x[j,t];
268

```

```

269
270 /*****
271 /** RESTRICCIONES **/
272 *****/
273 s.t. src_limit {i in SOURCES, t in PERIODS}:
274     sum{j in EDGES: (edge_from_node[j]==src_node[i])} x[j,t] <= src_cap[
        i] ;
275
276 s.t. src_balance {i in SOURCES, t in PERIODS}:
277     sum{j in EDGES: (edge_from_node[j]==src_node[i])} x[j,t] == ts_data[
        t,src_ts[i]] ;
278
279 #.....
280 s.t. sto_ilimit {i in STORAGES, t in PERIODS}:
281     sum{j in EDGES: (edge_to_node[j]==sto_inode[i])} x[j,t] <= sto_icap[
        i] ;
282
283 s.t. sto_olimit {i in STORAGES, t in PERIODS}:
284     sum{j in EDGES: (edge_from_node[j]==sto_onode[i])} x[j,t] <=
        sto_ocap[i] ;
285
286 #s.t. sto_limit {i in STORAGES, t in PERIODS}:
287 # sto_capmin[i] <= y[i,t] <= sto_cap[i] ;
288
289 s.t. sto_balance {i in STORAGES, t in PERIODS}:
290     y[i,t] - (if (t>1) then y[i,t-1] else y[i,NPERIODS]) ==
291         sum{j in EDGES: (edge_to_node[j]==sto_inode[i])} x[j,t] -
292         sum{j in EDGES: (edge_from_node[j]==sto_onode[i])} x[
            j,t] ;
293
294
295
296 s.t. Y_LowerBound {i in STORAGES, t in PERIODS}:
297     y[i,t] >= sto_capmin[i];
298
299 s.t. Y_UpperBound {i in STORAGES, t in PERIODS}:
300     y[i,t] <= sto_cap[i];
301
302
303 s.t. pH2 {t in PERIODS}:
304     p_h2[t] =
305         << h1, h2, h3 ;
306         q0, q1, q2, q3 >>
307     y[2,t];
308
309 s.t. PH2_LowerBound {t in PERIODS}:

```

```

310     p_h2[t] >= 20;
311
312 s.t. PH2_UpperBound {t in PERIODS}:
313     p_h2[t] <= 200;
314
315 #.....
316 s.t. sto2_ilimit {i in STORAGES2, t in PERIODS}:
317     sum{j in EDGES: (edge_to_node[j]==sto2_inode[i])} x[j,t] <=
318         sto2_icap[i] ;
319
320 s.t. sto2_olimit {i in STORAGES2, t in PERIODS}:
321     sum{j in EDGES: (edge_from_node[j]==sto2_onode[i])} x[j,t] <=
322         sto2_ocap[i] ;
323
324 s.t. Y2_LowerBound {i in STORAGES2, t in PERIODS}:
325     y2[i,t] >= sto2_capmin[i];
326
327 s.t. Y2_UpperBound {i in STORAGES2, t in PERIODS}:
328     y2[i,t] <= sto2_cap[i];
329
330 s.t. sto2_balance {i in STORAGES2, t in PERIODS}:
331     y2[i,t] =
332         (if t > 1 then (1 - sto2_sigma[i]) * y2[i,t-1] else (1 -
333             sto2_sigma[i]) * y2[i,NPERIODS])
334         + sto2_ieta[i] * sum{j in EDGES: edge_to_node[j] == sto2_inode[i]}
335             x[j,t]
336         - (1 / sto2_oeta[i]) * sum{j in EDGES: edge_from_node[j] ==
337             sto2_onode[i]} x[j,t];
338
339 #.....
340 s.t. tr1_ilimit {i in TRANS1, t in PERIODS}:
341     sum{j in EDGES: (edge_to_node[j]==tr1_inode[i])} x[j,t] <= tr1_icap[
342         i] ;
343
344 s.t. tr1_olimit {i in TRANS1, t in PERIODS}:
345     sum{j in EDGES: (edge_from_node[j]==tr1_onode[i])} x[j,t] <=
346         tr1_ocap[i] ;
347
348 s.t. tr1_ibalance {i in TRANS1, t in PERIODS}:
349     sum{j in EDGES: (edge_to_node[j]==tr1_inode[i])} x[j,t] ==
350         tr1_k1[i]*sum{j in EDGES: (edge_from_node[j]==tr1_onode[i])
351             } x[j,t] ;
352
353 #.....
354 s.t. tr2_illimit {i in TRANS2, t in PERIODS}:
355     sum{j in EDGES: (edge_to_node[j]==tr2_inode[i])} x[j,t] <=

```

```

        tr2_ilcap[i] ;
348
349 s.t. tr2_i2limit {i in TRANS2, t in PERIODS}:
350     sum{j in EDGES: (edge_to_node[j]==tr2_i2node[i])} x[j,t] <=
        tr2_i2cap[i] ;
351
352 s.t. tr2_olimit {i in TRANS2, t in PERIODS}:
353     sum{j in EDGES: (edge_from_node[j]==tr2_onode[i])} x[j,t] <=
        tr2_ocap[i] ;
354
355 s.t. tr2_ilbalance {i in TRANS2, t in PERIODS}:
356     sum{j in EDGES: (edge_to_node[j]==tr2_ilnode[i])} x[j,t] ==
357         tr2_k1[i]*sum{j in EDGES: (edge_from_node[j]==tr2_onode[i])
        } x[j,t] ;
358
359 s.t. tr2_i2balance {i in TRANS2, t in PERIODS}:
360     sum{j in EDGES: (edge_to_node[j]==tr2_i2node[i])} x[j,t] ==
361         tr2_k2[i]*sum{j in EDGES: (edge_from_node[j]==tr2_onode[i])
        } x[j,t] ;
362
363 #.....
364 s.t. tr3_illimit {i in TRANS3, t in PERIODS}:
365     sum{j in EDGES: (edge_to_node[j]==tr3_ilnode[i])} x[j,t] <=
        tr3_ilcap[i] ;
366
367 s.t. tr3_i2limit {i in TRANS3, t in PERIODS}:
368     sum{j in EDGES: (edge_to_node[j]==tr3_i2node[i])} x[j,t] <=
        tr3_i2cap[i] ;
369
370 s.t. tr3_i3limit {i in TRANS3, t in PERIODS}:
371     sum{j in EDGES: (edge_to_node[j]==tr3_i3node[i])} x[j,t] <=
        tr3_i3cap[i] ;
372
373 s.t. tr3_olimit {i in TRANS3, t in PERIODS}:
374     sum{j in EDGES: (edge_from_node[j]==tr3_onode[i])} x[j,t] <=
        tr3_ocap[i] ;
375
376 s.t. tr3_ilbalance {i in TRANS3, t in PERIODS}:
377     sum{j in EDGES: (edge_to_node[j]==tr3_ilnode[i])} x[j,t] ==
378         tr3_k1[i]*sum{j in EDGES: (edge_from_node[j]==tr3_onode[i])
        } x[j,t] ;
379
380 s.t. tr3_i2balance {i in TRANS3, t in PERIODS}:
381     sum{j in EDGES: (edge_to_node[j]==tr3_i2node[i])} x[j,t] ==
382         tr3_k2[i]*sum{j in EDGES: (edge_from_node[j]==tr3_onode[i])
        } x[j,t] ;

```

```

383
384 s.t. tr3_i3balance {i in TRANS3, t in PERIODS}:
385     sum{j in EDGES: (edge_to_node[j]==tr3_i3node[i])} x[j,t] ==
386     tr3_k3[i]*sum{j in EDGES: (edge_from_node[j]==tr3_onode[i])
387         } x[j,t] ;
388
389 #.....
390 s.t. tr4_i1limit {i in TRANS4, t in PERIODS}:
391     sum{j in EDGES: (edge_to_node[j]==tr4_i3node[i])} x[j,t] <=
392     tr4_i3cap[i] ;
393
394 s.t. tr4_i2limit {i in TRANS4, t in PERIODS}:
395     sum{j in EDGES: (edge_to_node[j]==tr4_i2node[i])} x[j,t] <=
396     tr4_i2cap[i] ;
397
398 s.t. tr4_i3limit {i in TRANS4, t in PERIODS}:
399     sum{j in EDGES: (edge_to_node[j]==tr4_i1node[i])} x[j,t] <=
400     tr4_i1cap[i] ;
401
402 s.t. tr4_i4limit {i in TRANS4, t in PERIODS}:
403     sum{j in EDGES: (edge_to_node[j]==tr4_i4node[i])} x[j,t] <=
404     tr4_i4cap[i] ;
405
406 s.t. tr4_olimit {i in TRANS4, t in PERIODS}:
407     sum{j in EDGES: (edge_from_node[j]==tr4_onode[i])} x[j,t] <=
408     tr4_ocap[i] ;
409
410 s.t. tr4_i1balance {i in TRANS4, t in PERIODS}:
411     sum{j in EDGES: (edge_to_node[j]==tr4_i1node[i])} x[j,t] ==
412     tr4_k1[i]*sum{j in EDGES: (edge_from_node[j]==tr4_onode[i])
413         } x[j,t] ;
414
415 s.t. tr4_i2balance {i in TRANS4, t in PERIODS}:
416     sum{j in EDGES: (edge_to_node[j]==tr4_i2node[i])} x[j,t] ==
417     tr4_k2[i]*sum{j in EDGES: (edge_from_node[j]==tr4_onode[i])
418         } x[j,t] ;
419
420 s.t. tr4_i3balance {i in TRANS4, t in PERIODS}:
421     sum{j in EDGES: (edge_to_node[j]==tr4_i3node[i])} x[j,t] ==
422     tr4_k3[i]*sum{j in EDGES: (edge_from_node[j]==tr4_onode[i])
423         } x[j,t] ;
424
425 s.t. tr4_i4balance {i in TRANS4, t in PERIODS}:
426     sum{j in EDGES: (edge_to_node[j]==tr4_i4node[i])} x[j,t] ==
427     tr4_k4[i]*sum{j in EDGES: (edge_from_node[j]==tr4_onode[i])
428         } x[j,t] ;

```

```

419
420 # =====
421 # RESTRICCIONES ELECTROLIZADORES
422 # =====
423
424 # 1. Produccion total de H2 [ton/h]
425 s.t. Def_H2_injection {t in PERIODS}:
426     H2_injection[t] = total_electrolizers *
427         (i_dens[t] * A_unit / (2 * F))
428         * 0.002016 * 3600 / 1000;
429
430
431
432 s.t. Electrolyzer_Power {t in PERIODS}:
433     Power[t] =
434         << b1, b2, b3, b4, b5, b6, b7, b8, b9;
435             r0, r1, r2, r3, r4, r5, r6, r7, r8, r9 >>
436         i_dens[t];
437
438
439 # Restriccion de cota inferior
440 s.t. LowerBound_i_dens {t in PERIODS}:
441     i_dens[t] >= i_dens_min * z[t];
442
443 # Restriccion de cota superior
444 s.t. UpperBound_i_dens {t in PERIODS}:
445     i_dens[t] <= i_dens_max * z[t];
446
447
448
449 # 2. Balance de energia
450 s.t. Electrolyzer_Power_Balance {t in PERIODS}:
451     sum {j in EDGES: edge_to_node[j] == 28} x[j,t] = Power[t] ;
452
453 # 5. Balance de H2 en nodo de salida
454 s.t. balance_H2_node {t in PERIODS}:
455     sum {j in EDGES: edge_from_node[j] == 31} x[j,t] = H2_injection[t];
456
457 # 6. Proporciones para insumos
458 s.t. Water_Balance {t in PERIODS}:
459     sum {j in EDGES: edge_to_node[j] == 29} x[j,t] = tr3_2_k2[1] *
460         H2_injection[t];
461
462 s.t. Cooling_Balance {t in PERIODS}:
463     sum {j in EDGES: edge_to_node[j] == 30} x[j,t] = tr3_2_k3[1] *
464         H2_injection[t];

```

```
463
464 #7. Relacion H2:O2
465 s.t. Oxygen_Production {t in PERIODS}:
466     sum {j in EDGES: edge_from_node[j] == 32} x[j,t] = 8 * H2_injection[
        t];
```

A.5. Archivo hvNL.dat(extracto)

Por razones de extensión, en este anexo se presenta únicamente un extracto representativo del archivo de datos del modelo no lineal. La serie temporal completa considera 8760 períodos horarios y fue utilizada en las simulaciones.

```

1  /*****
2  /** GENERAL **/
3  *****/
4  param NNODES := 62 ;
5  param NEDGES := 41 ;
6  param NSOURCE := 1 ;
7  param NTRANS1 := 7 ;
8  param NTRANS2 := 7 ;
9  param NTRANS3 := 1 ;
10 param NTRANS3_2 := 1 ;
11 param NTRANS4 := 1 ;
12 param NSTORAGE := 3 ;
13 param NSTORAGE2 := 1 ;
14 param NTS := 1 ;
15 param NPERIODS := 8760 ;
16
17 # -----
18 # Valores fijos de los break-points de la curva PWL
19 # -----
20 #Electrolizador
21
22
23 # Breakpoints (i_dens)
24 param b1 := 0.3864 ;
25 param b2 := 0.45 ;
26 param b3 := 0.55 ;
27 param b4 := 0.65 ;
28 param b5 := 0.75 ;
29 param b6 := 0.9 ;
30 param b7 := 1.1 ;
31 param b8 := 1.3 ;
32 param b9 := 1.5 ;
33 param b10 := 1.65 ;
34 param b11 := 1.778 ;
35
36
37 # Pendiente inicial
38 param r0 := 407.5248133 ;
39
40 # Pendientes por tramo (P/i)

```

```
41 param r1 := 429.5523261 ;
42 param r2 := 434.1276652 ;
43 param r3 := 438.9272509 ;
44 param r4 := 443.0295203 ;
45 param r5 := 447.3965865 ;
46 param r6 := 452.5116796 ;
47 param r7 := 457.3570484 ;
48 param r8 := 461.4265026 ;
49 param r9 := 464.5273047 ;
50 param r10 := 466.7410321 ;
51 param r11 := 466.7410321 ;
52
53
54
55
56
57
58
59
60
61
62
63
64
65
66
67
68
69
70
71 #Almacenamiento H2
72
73
74 # Breakpoints (masa almacenada y2, en ton)
75 param h1 := 5.873251676 ;
76 param h2 := 25.8937032 ;
77 param h3 := 52.84255598 ;
78
79 # Pendientes (p / y2)
80 # q0: desde 0 hasta h1
81 param q0 := 3.405268683 ;
82 param q1 := 3.596322487 ;
83 param q2 := 4.007591747 ;
84 param q3 := 4.007591747 ;
85
86
```

```

87
88 /*****
89 /* Source elements
90 /*****
91 param: src_name src_node src_ts src_cap src_capex src_opex :=
92 1 "WindPlant" 1 1 1260 1210000 15000
93 ;
94
95
96 /*****
97 /* Storage system
98 /*****
99 param: sto_name sto_inode sto_onode sto_k1 sto_icap sto_ocap sto_cap
    sto_capmin sto_capex sto_opex :=
100 1 "DemineralizedWaterStorage (m3)" 26 27 1.0 225.42949 225.42949
    68765.21589 0 113 2
101 2 "HydrogenStorage (ton)" 41 42 1.0 17.10828 17.10828 52.82561
    5.873251676 515000 6200
102 3 "AmmoniaStorage (ton)" 58 59 1.0 300.0 300.0 68200.0 0 2346 24.8
103 ;
104
105 param: sto2_name sto2_inode sto2_onode sto2_k1 sto2_icap sto2_ocap
    sto2_cap sto2_capmin sto2_capex sto2_opex sto2_ieta sto2_oeta
    sto2_sigma :=
106 1 "BESS (MWh)" 6 7 1 40.5 40.5 81 16.2 206000 2500 0.9747 0.9747 1E-4
107 ;
108
109 /*****
110 /* Transformation center 1 input
111 /*****
112 param: trl_name trl_inode trl_iid trl_onode trl_oid trl_k1 trl_icap
    trl_ocap trl_capex trl_opex :=
113 1 "ElectricalSubstation" 2 "EnergyIn" 3 "EnergyOut" 1.0 1260 1260 0 0
114 2 "DCin" 4 "EnergyIn" 5 "EnergyOut" 1.020408 92.9 91.1 0 0
115 3 "GridForming" 8 "EnergyIn" 9 "EnergyOut" 1.020408 77.8 76.2 51500 600
116 4 "DistributionLine" 10 "EnergyIn" 11 "EnergyOut" 1.0 7.0 7.0 750000
    7500
117 5 "WaterPipeline" 18 "DesalinatedWaterIn" 19 "DesalinatedWaterOut" 1.0
    659.0 659.0 500000 65000
118 6 "HydrogenDecompression" 43 "HydrogenIn" 44 "HydrogenOut" 1.0 1E6 1E6
    0 0
119 7 "Mixer" 45 "HydrogenIn" 46 "HydrogenOut" 1.0 1E6 1E6 0 0
120 ;
121
122
123 /*****/

```

```

124  /* Transformation center 2 input
125  /*****
126  param: tr2_name tr2_ilnode tr2_ilid tr2_i2node tr2_i2id tr2_onode
        tr2_oid tr2_k1 tr2_k2 tr2_ilcap tr2_i2cap tr2_ocap tr2_capex
        tr2_opex :=
127  1 "DesalinationPlant" 12 "Energy" 13 "SeaWater" 14 "DesalinatedWater"
        0.004 2.0 3.0 1318.0 659.0 41200 994
128  2 "WaterPumping" 15 "Energy" 16 "DesalinatedWaterIn" 17 "
        DesalinatedWaterOut" 0.0062 1.0 4.1 659.0 659.0 26450 608
129  3 "CoolingSystem" 20 "Energy" 21 "DesalinatedWater" 22 "Cooling" 0.018
        1.719 7.0 659.0 383.0 36600 1100
130  4 "DesmineralizationPlant" 23 "Energy" 24 "DesalinatedWater" 25 "
        DemineralizedWater" 0.0017 1.67 0.33 319.0 191.0 9270 335
131  5 "Compression30_100" 35 "Energy" 36 "HydrogenIn" 37 "HydrogenOut" 0.74
        1.0 2.0 2.0 2.0 610426 29600
132  6 "Compression100_200" 38 "Energy" 39 "HydrogenIn" 40 "HydrogenOut"
        0.48 1.0 2.0 2.0 2.0 488160 24000
133  7 "AmmoniaRefrigeration" 60 "Energy" 56 "AmmoniaIn" 57 "AmmoniaOut"
        0.38 1.0 1E6 1E6 1E6 0 0
134  ;
135
136
137
138  /*****
139  /* Transformation center 3 input
140  /*****
141  param: tr3_name tr3_ilnode tr3_ilid tr3_i2node tr3_i2id tr3_i3node
        tr3_i3id tr3_onode tr3_oid tr3_k1 tr3_k2 tr3_k3 tr3_ilcap tr3_i2cap
        tr3_i3cap tr3_ocap tr3_capex tr3_opex :=
142  1 "AirSeparatorUnit" 47 "Energy" 48 "Cooling" 49 "Air" 50 "Nitrogen"
        0.208 0.49 1.3 17.0 39.0 104.0 80.0 705000 21260
143  ;
144
145
146  /*****
147  /* Transformation center 3 input 2 output
148  /*****
149  param: tr3_2_name tr3_2_ilnode tr3_2_ilid tr3_2_i2node tr3_2_i2id
        tr3_2_i3node tr3_2_i3id tr3_2_onode tr3_2_oid tr3_2_o2node
        tr3_2_o2id tr3_2_k1 tr3_2_k2 tr3_2_k3 tr3_2_ilcap tr3_2_i2cap
        tr3_2_i3cap tr3_2_ocap tr3_2_o2cap tr3_min tr3_2_capex tr3_2_opex
        :=
150  1 "Electrolysis" 28 "Energy" 29 "DemineralizedWater" 30 "Cooling" 31 "
        Hydrogen" 32 "Oxygen" 56.0 11.0 12.7 1050 1E6 1E6 1E6 1E6 0.1
        31388000 784700
151  ;

```

```

152
153
154 /*****
155 /* Transformation center 4 input
156 /*****
157 param: tr4_name tr4_ilnode tr4_ilid tr4_i2node tr4_i2id tr4_i3node
        tr4_i3id tr4_i4node tr4_i4id tr4_onode tr4_oid tr4_k1 tr4_k2 tr4_k3
        tr4_k4 tr4_ilcap tr4_i2cap tr4_i3cap tr4_i4cap tr4_ocap tr4_capex
        tr4_opex :=
158 1 "HaberBosch" 51 "Nitrogen" 52 "Cooling" 53 "Energy" 54 "Hydrogen" 55
        "Ammonia" 0.8235 0.74 0.13 0.1765 80.0 72.0 13.0 17.0 97.0 2657760
        80130
159 ;
160
161
162
163 /*****
164 /* Edges (variables)
165 /*****
166 param: edge_from_node edge_to_node edge_name :=
167 1 0 13 "Sea water (m3/h) "
168 2 1 2 "Energy S/E (MW) "
169 3 3 4 "Energy DCin (MW) "
170 4 5 6 "Energy BESS (MW) "
171 5 7 8 "Energy GF (MW) "
172 6 9 2 "Energy GF to S/E (MW) "
173 7 3 10 "Energy Line (MW) "
174 8 11 12 "Energy DS (MW) "
175 9 11 15 "Energy WP (MW) "
176 10 3 20 "Energy CS (MW) "
177 11 3 23 "Energy DM (MW) "
178 12 3 28 "Energy EL (MW) "
179 13 3 35 "Energy Comp 30/100 (MW) "
180 14 3 38 "Energy Comp 100/200 (MW) "
181 15 3 47 "Energy ASU (MW) "
182 16 3 53 "Energy HB (MW) "
183 17 14 16 "Desalinated water WP (m3/h) "
184 18 17 18 "Desalinated water PL (m3/h) "
185 19 19 21 "Desalinated water CS (m3/h) "
186 20 19 24 "Desalinated water DM (m3/h) "
187 21 25 29 "Demineralized water EL (m3/h) "
188 22 25 26 "Demineralized water ST (m3/h) "
189 23 27 29 "Demineralized water ST-EL (m3/h) "
190 24 22 30 "Heat EL(MWt) "
191 25 32 0 "Oxygen Spillage (ton/h) "
192 26 31 45 "Hydrogen MX (ton/h) "

```

```

193 27 31 36 "Hydrogen Comp 30/100 (ton/h) "
194 28 37 39 "Hydrogen Comp 100/200 (ton/h) "
195 29 40 41 "Hydrogen ST (ton/h) "
196 30 42 43 "Hydrogen Comp 200/30 (ton/h) "
197 31 44 45 "Hydrogen Comp to MX (ton/h) "
198 32 46 54 "Hydrogen MX to HB (ton/h) "
199 33 0 49 "Air ASU (ton/h) "
200 34 22 48 "Heat ASU (MWt) "
201 35 50 51 "Nitrogen HB (ton/h) "
202 36 22 52 "Heat HB (MWt) "
203 37 55 56 "Ammonia to refrigerated (ton/h) "
204 38 57 58 "Ammonia refrigerated to ST (ton/h) "
205 39 59 0 "Ammonia ST to Port (ton/h) "
206 40 1 0 "Energy spillage (MW) "
207 41 3 60 "Energy ammonia refrigerated (MW) "
208 ;
209
210 /*****
211 /* Time series (MW)
212 /*****
213 param ts_data: 1 :=
214 1 46.3
215 2 19.5
216 3 14.6
217 4 25.3
218 5 6.0
219 6 0.0
220 7 0.0
221 8 0.0
222 9 0.0
223 10 0.0
224 11 0.0
225 12 15.4
226 13 30.4
227 14 58.6
228 15 179.6
229 16 281.3
230 17 355.6
231 18 273.2
232 19 426.0
233 20 308.6
234 21 361.6
235 22 307.1
236 23 296.3
237 24 243.5;

```

A.6. Archivo hvNL.run

Corresponde al archivo de ejecución del modelo no lineal, encargado de cargar los archivos de formulación (.mod) y de datos (.dat), configurar el solver, resolver el problema de optimización y gestionar la generación de los datos de salida.

```

1  /*****
2  /** CONFIGURACION SOLVER **/
3  *****/
4  suffix runtime OUT;
5  option solver gurobi;
6  option solver_msg 1;
7
8  option log_file 'hvNL.log';
9  model hvNL.mod ;
10 data hvNL.dat ;
11
12 param csvFile symbolic := "hvNL.csv";
13 param ecoFile symbolic := "hvNL_eco.csv";
14 param DEL symbolic := ",";
15
16
17 /*****
18 /** OPTIMIZACION **/
19 *****/
20 solve;
21
22
23 /*****
24 /** CALCULO DE MAXIMOS (CAPACIDAD) **/
25 *****/
26
27 # --- Declaracion de todos los parametros de maximos ---
28 param max_x5;
29 param max_x10;
30 param max_x17;
31 param max_x18;
32 param max_x20;
33 param max_x35;
34 param max_x38;
35
36 param max_node22;
37 param max_node37;
38 param max_node40;
39 param max_node50;
40 param max_node55;

```

```

41 param max_node31;
42
43 param max_y1; # DemineralizedWaterStorage
44 param max_y2; # HydrogenStorage
45 param max_y3; # AmmoniaStorage
46 param max_y21; # BESS (y2[1,t])
47
48 # --- Asignacion de valores de maximos (despues del solve) ---
49 let max_x5 := max {t in PERIODS} x[5,t];
50 let max_x10 := max {t in PERIODS} x[10,t];
51 let max_x17 := max {t in PERIODS} x[17,t];
52 let max_x18 := max {t in PERIODS} x[18,t];
53 let max_x20 := max {t in PERIODS} x[20,t];
54 let max_x35 := max {t in PERIODS} x[35,t];
55 let max_x38 := max {t in PERIODS} x[38,t];
56
57 let max_node22 := max {t in PERIODS} ( sum{j in EDGES: edge_from_node[j
    ] == tr2_onode[3]} x[j,t] );
58 let max_node37 := max {t in PERIODS} ( sum{j in EDGES: edge_from_node[j
    ] == tr2_onode[5]} x[j,t] );
59 let max_node40 := max {t in PERIODS} ( sum{j in EDGES: edge_from_node[j
    ] == tr2_onode[6]} x[j,t] );
60 let max_node50 := max {t in PERIODS} ( sum{j in EDGES: edge_to_node[j]
    == tr3_onode[1]} x[j,t] );
61 let max_node55 := max {t in PERIODS} ( sum{j in EDGES: edge_from_node[j
    ] == tr4_onode[1]} x[j,t] );
62 let max_node31 := max {t in PERIODS} ( sum{j in EDGES: edge_from_node[j
    ] == tr3_2_onode[1]} x[j,t] );
63
64 let max_y1 := max {t in PERIODS} y[1,t];
65 let max_y2 := max {t in PERIODS} y[2,t];
66 let max_y3 := sto_cap[3];
67 let max_y21 := max {t in PERIODS} y2[1,t];
68
69
70 /*****/
71 /** KPIs **/
72 /*****/
73
74 param capex_calc;
75 param opex_calc;
76 param ing_calc;
77 param NH3_annual_prod;
78 param H2_annual_prod;
79
80 # --- CAPEX ---

```

```

81 let capex_calc :=
82     src_capex[1]*src_cap[1]
83     + sto_capex[1]*max_y1 # DemineralizedWaterStorage
84     + sto_capex[2]*max_y2 # HydrogenStorage
85     + sto_capex[3]*max_y3 # AmmoniaStorage
86     + sto2_capex[1]*max_y21 # BESS
87     + tr1_capex[3]*max_x5
88     + tr1_capex[5]*2
89     + (tr2_capex[1] + tr2_capex[2]) * max_x17
90     + tr2_capex[3]*max_x10
91     + tr2_capex[4]*max_x20
92     + tr2_capex[5]*max_node37
93     + tr2_capex[6]*max_node40
94     + tr3_capex[1]*max_x35
95     + tr3_2_capex[1]*max_node31
96     + tr4_capex[1]*max_x38
97     + 130000000 + 57700*2;
98
99 # --- OPEX (anual aproximado) ---
100 let opex_calc :=
101     src_opex[1]*src_cap[1]
102     + sto_opex[1]*max_y1
103     + sto_opex[2]*max_y2
104     + sto_opex[3]*max_y3
105     + tr1_opex[3]*max_x5
106     + tr1_opex[5]*2
107     + (tr2_opex[1] + tr2_opex[2]) * max_x17
108     + tr2_opex[3]*max_x10
109     + tr2_opex[4]*max_x20
110     + tr2_opex[5]*max_node37
111     + tr2_opex[6]*max_node40
112     + tr3_opex[1]*max_x35
113     + tr3_2_opex[1]*max_node31
114     + tr4_opex[1]*max_x38
115     + 577*2;
116
117 # --- Ingresos (solo NH3) ---
118 let ing_calc :=
119     ( sum{j in EDGES, t in PERIODS: edge_from_node[j] == 55} x[j,t] ) *
120     1.1 * 1000;
121
122 # Producciones anuales
123 let NH3_annual_prod :=
124     sum{j in EDGES, t in PERIODS : edge_from_node[j] == 55} x[j,t];
125
126 let H2_annual_prod :=

```

```

126     sum{j in EDGES, t in PERIODS : edge_from_node[j] == 31} x[j,t];
127
128 # --- Mostrar KPIs base ---
129 display capex_calc, opex_calc, ing_calc;
130
131
132
133
134 /*****
135 /** RESUMEN DE CAPACIDADES EN CONSOLA **/
136 *****/
137
138 print "===== CAPACIDADES CALCULADAS =====";
139
140 # Fuente renovable
141 print "Wind Plant (MW) ..... ", src_cap[1];
142
143 # Almacenamientos
144 print "Demineralized Water Storage (m3) .... ", max_y1;
145 print "Hydrogen Storage (ton) ..... ", max_y2;
146 print "Ammonia Storage (ton) ..... ", max_y3;
147 print "BESS (MWh) ..... ", max_y21;
148
149 # Agua y bombeo
150 print "Desalination Plant (m3/h) ..... ", max_x17;
151 print "Water Pumping (m3/h) ..... ", max_x17;
152 print "Water Pipeline (km) ..... ", 2;
153
154 # Demineralizacion
155 print "Demineralized Water (m3/h) ..... ", max_x20;
156
157 # Cooling System
158 print "Cooling System (MWth) ..... ", max_node22;
159
160 # Electrolizador y cadena de H2
161 print "Electrolyzer H2 (t/h) ..... ", max_node31;
162 print "Compressor 30/100 (t/h) ..... ", max_node37;
163 print "Compressor 100/200 (t/h) ..... ", max_node40;
164
165 # ASU y Haber-Bosch
166 print "ASU N2 (t/h) ..... ", max_x35;
167 print "Haber-Bosch NH3 (t/h) ..... ", max_x38;
168
169 print "===== ";
170
171 # Tiempo de solucion y produccion

```

```

172 printf "Tiempo total (AMPL): %.2f segundos\n", _solve_time;
173 print "H2 production (ton) ..... ", H2_annual_prod ;
174 print "NH3 production (ton) ..... ", NH3_annual_prod ;
175 print "Energy spillage (%) ..... ",
176     100*(sum{t in PERIODS} x[40,t])/(sum{t in PERIODS} ts_data[t,1]) ;
177
178
179 /*****
180 /** POSTPROCESOS **/
181 *****/
182
183 # ----- Archivo de flujos hv.csv -----
184
185 printf "Period (h)" > (csvFile) ;
186 for {i in EDGES} {
187     printf "%s%s", DEL, edge_name[i] >> (csvFile) ;
188 }
189 for {i in STORAGES} {
190     printf "%s%s (m3)", DEL, sto_name[i] >> (csvFile) ;
191 }
192 for {i in SOURCES} {
193     printf "%s%s (MW)", DEL, src_name[i] >> (csvFile) ;
194 }
195 printf "\n" >> (csvFile) ;
196
197 for {t in PERIODS} {
198     printf "%d", t >> (csvFile) ;
199     for {i in EDGES} {
200         printf "%s%.6f", DEL, x[i,t] >> (csvFile) ;
201     }
202     for {i in STORAGES} {
203         printf "%s%.6f", DEL, y[i,t] >> (csvFile) ;
204     }
205     for {i in SOURCES} {
206         printf "%s%.6f", DEL, ts_data[t,src_ts[i]] >> (csvFile) ;
207     }
208     printf "\n" >> (csvFile) ;
209 }
210
211 # ----- Archivo economico hv_eco.csv -----
212
213 printf "Variable,Valor\n" > (ecoFile);
214
215 # KPIs principales (para Python)
216 printf "CAPEX,%.6f\n", capex_calc >> (ecoFile);
217 printf "OPEX anual,%.6f\n", opex_calc >> (ecoFile);

```

```

218 printf "INGRESOS, %.6f\n", ing_calc >> (ecoFile);
219 printf "H2_prod, %.6f\n", H2_annual_prod >> (ecoFile);
220 printf "NH3_prod, %.6f\n", NH3_annual_prod >> (ecoFile);
221
222 # Capacidades instaladas (para tabla tipo Excel)
223
224 # Fuente renovable
225 printf "Cap_WindPlant_MW, %.6f\n", src_cap[1] >> (ecoFile);
226
227 # BESS (STORAGES2)
228 printf "Cap_BESS_MWh, %.6f\n", max_y21 >> (ecoFile);
229
230 # Almacenamientos (STORAGES)
231 printf "Cap_DemWaterStorage_m3, %.6f\n", max_y1 >> (ecoFile);
232 printf "Cap_H2Storage_ton, %.6f\n", max_y2 >> (ecoFile);
233 printf "Cap_NH3Storage_ton, %.6f\n", max_y3 >> (ecoFile);
234
235 # Sistemas de agua y calor
236 printf "Cap_Desalination_m3ph, %.6f\n", max_x17 >> (ecoFile);
237 printf "Cap_WaterPumping_m3ph, %.6f\n", max_x17 >> (ecoFile);
238
239 printf "Cap_CoolingSystem_MWth, %.6f\n", max_node22 >> (ecoFile);
240 printf "Cap_DemineralizedWater_m3ph, %.6f\n", max_x20 >> (ecoFile);
241
242 # Electrolizador y cadena de H2
243 printf "Cap_Electrolyzer_tH2ph, %.6f\n", max_node31 >> (ecoFile);
244 printf "Cap_Comp30_100_tH2ph, %.6f\n", max_node37 >> (ecoFile);
245 printf "Cap_Comp100_200_tH2ph, %.6f\n", max_node40 >> (ecoFile);
246
247
248 # ASU y Haber-Bosch
249 printf "Cap_ASU_tN2ph, %.6f\n", max_x35 >> (ecoFile);
250 printf "Cap_HB_tNH3ph, %.6f\n", max_x38 >> (ecoFile);

```

Anexo B

Tablas

B.1. Parámetros

La Tabla B.1 presenta los parámetros utilizados para el cálculo de la tensión del electrolizador en el modelo no lineal.

Tabla B.1: Parámetros geométricos, eléctricos y electroquímicos del sistema

Parámetro	Símbolo	Valor	Unidad
Espesor placa bipolar	δ_{bp}	0.012	m
Espesor colector	δ_{cc}	0.002	m
Espesor membrana	δ_{me}	1.78×10^{-4}	m
Conductividad placa	σ_{bp}	133,35	S/cm
Conductividad colector	σ_{cc}	145,50	S/cm
Conductividad membrana	σ_m	0,179	S/cm
Área activa (MEA)	A_{me}	0.6	m ²
Coef. transferencia de carga ánodo	α_{an}	0.5	-
Coef. transferencia de carga cátodo	α_{cat}	0.5	-
Densidad de corriente de intercambio ánodo	$i_{0,an}$	1.0×10^{-5}	A/cm ²
Densidad de corriente de intercambio cátodo	$i_{0,cat}$	0.278	A/cm ²
Contenido de agua (lambda)	λ	22	-