

Wykorzystanie funkcji W-Lamberta do modelowania charakterystyk elektrolizera alkalicznego

Streszczenie: Praca przedstawia proces formułowania modelu elektrolizera alkalicznego z uwzględnieniem stężenia masowego roztworu wodnego KOH. W pracy została przeanalizowana przydatność różnych funkcji do opisu charakterystyk statycznych takiego elektrolizera. Zaproponowano opis matematyczny rozważanych charakterystyk zapewniający uzyskanie wysokiej dokładności modelowania i wykorzystujący stężenie roztworu jako parametr. Przedstawiono sposób automatycznego doboru wartości współczynników w zaproponowanym opisie matematycznym i zoptymalizowano liczbę tych współczynników. Poprawność modelowania zweryfikowano doświadczalnie w szerokim zakresie zmian stężenia roztworu.

Abstract: This paper presents the process of formulating an alkaline electrolyser model taking into account the mass concentration of KOH aqueous solution. The paper analyzes the usefulness of various functions for the description of the dc characteristics of such an electrolyser. A mathematical description of the considered characteristics has been proposed, ensuring high modeling accuracy and using the solution concentration as a parameter. The method of automatic selection of the values of the coefficients in the proposed mathematical description is presented and the number of these coefficients is optimized. The correctness of the modeling was verified experimentally in a wide range of changes in the concentration of the solution. (Using Lambert-W function in modelling characteristics of an alkaline electrolyser).

Słowa kluczowe: numpy, pandas, modelowanie, estymacja parametrów, elektrolizer alkaliczny, charakterystyki statyczne, python
Keywords: numpy, pandas, modelling, parameters estimation, alkaline electrolyser, dc characteristics, python

Wstęp

Obecnie dużą wagę przykładają się do wykorzystania alternatywnych źródeł energii. Jednym z nich jest wodór. Może być on produkowany przemysłowo przy wykorzystaniu różnych metod opisanych m.in. w pracy [1]. Jedną z popularnych metod produkcji wodoru jest elektroliza realizowana m.in. przy wykorzystaniu elektrolizerów alkalicznych [2].

Przy projektowaniu urządzeń elektrycznych wykorzystuje się modele komponentów tych urządzeń. W szczególności modele te opisują charakterystyki prądowo-napięciowe tych komponentów. Charakterystyki elektrolizerów alkalicznych są funkcjami nieliniowymi a ich przebieg zależy od stężenia roztworu [3]. Niestety, modele elektrolizerów prezentowane w literaturze [3, 4] nie zapewniają wysokiej dokładności opisu charakterystyk elektrycznych elektrolizerów alkalicznych. Dlatego celowe jest sformułowanie nowego modelu tego urządzenia.

Proces modelowania charakterystyk urządzenia elektrycznego wymaga dwóch kroków. Po pierwsze należy sformułować równanie opisujące takie charakterystyki. Wymaga to doboru odpowiednich funkcji matematycznych. Drugim krokiem jest wyznaczenie wartości współczynników występujących w tych funkcjach, zapewniających uzyskanie zadowalającej zgodności wyników obliczeń i pomiarów.

W klasycznym przypadku dobór funkcji użytej do opisu modelowanej charakterystyki jest rezultatem doświadczenia badacza oraz żmudnych prób poszukiwania najlepszego dopasowania wyników obliczeń i pomiarów. Obecnie są dostępne technologie informatyczne (jak python), wykorzystujące obliczenia numeryczne, wspomagające badacza na obu etapach modelowania.

W pracy został przedstawiony sposób sformułowania modelu elektrolizera opracowany z wykorzystaniem funkcji **W-Lamberta** oraz algorytmu dopasowywania, wykorzystującego metodę najmniejszych kwadratów. Na uwagę zasługuje metodyka, która może być wykorzystana podczas pracy z innymi trudnymi do zamodelowania obiektami.

Narzędziem wykorzystywanym do przygotowania modelu był python ze standardowymi modułami wykorzystywanymi w analizie danych, czyli **numpy** [5] i **pandas** [6]. Do

prezentacji wykresów został opracowany dedykowany moduł wykorzystujący **matplotlib**.

Narzędzia do aproksymacji funkcji

Przedmiotem badań jest dobór funkcji aproksymującej charakterystyki prądowo-napięciowe elektrolizera scharakteryzowanego w pracy [7]. Charakterystyki te zostały zmierzone dla różnych stężeń masowych **KOH** równych kolejno: 0.1%, 2%, 5%, 10%, 20%, 50% i 100%. Do aproksymacji wyników pomiarów została wykorzystana metoda **curve_fit** z klasy **optimize** modułu **scipy** [8].

```
from scipy.optimize import curve_fit
```

Używając tej metody, należy przekazać wektory zawierające współrzędne x , y punktów leżących na zmierzonej charakterystyce modelowanego elektrolizera oraz wskazać definicje funkcji, dla której należy dobrać współczynniki zapewniające najlepsze dopasowanie. Można też zadać wartości początkowe współczynników. Funkcja zwraca kolejne współczynniki używane w funkcji **popt** oraz szacowaną kowariancję **pcov**.

```
popt, pcov = curve_fit(fnc, y, x)
a, b, ... = popt
```

Dzięki wektorom **pcov** można obliczyć odchylenie standardowe, które posłuży do porównywania testowanych modeli.

```
err = np.sqrt(np.diag(pcov)))
a, b, ... = popt
```

Aby uprościć porównywanie różnych postaci modeli, w niniejszej pracy, wartości odchylen standardowych dla wszystkich współczynników są uśredniane i prezentowane jako jedna wartość, która dalej będzie nazywana współczynnikiem błęd. Im jego wartość jest mniejsza tym zbieżność uzyskiwana jest szybciej.

Rozważane funkcje aproksymujące

Zmierzone rodziny charakterystyk prądowo-napięciowych elektrolizera mają charakter wykładniczy [3]. Do modelowania tego typu przebiegów często wykorzystuje się funkcję **eksponencjalną** f_{EXP} [4, 9]

$$(1) \quad f_{EXP}(x) = e^{g(x)} - e^{g(0)}$$

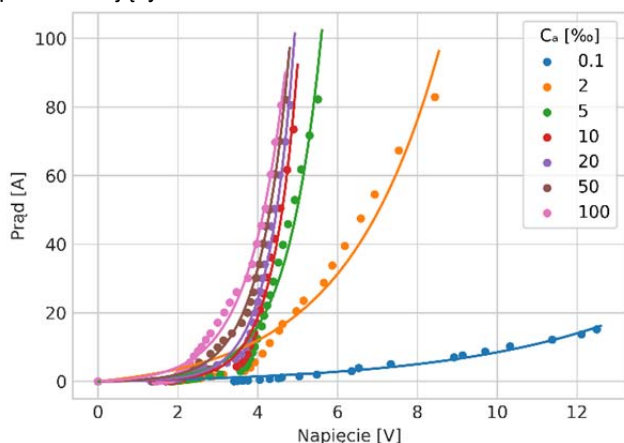
gdzie wykładnikiem jest funkcja liniowa $g(x)$ o postaci:

$$(2) \quad g(x) = ax + b$$

```
def FncExp(U:np.array, a, b):
    I = np.exp((U * a) + b) - np.exp(b)
    return I
```

Stosując dopasowanie współczynników funkcji f_{EXP} z wykorzystaniem narzędzia `curve_fit` uzyskuje się wartości współczynnika błędu w zakresie od **0,073** do **0,175**. Wyniki aproksymacji pokazano na rys. 1, na którym punkty oznaczają wyniki pomiarów, a linie wyniki obliczeń.

Mimo, iż błąd przyjmuje relatywnie małe wartości, na rys. 1 wyraźnie widać, że rozważany model nie zapewnia pożądanej dokładności dla małych prądów. Widać też, że dokładność jest niezadowalająca dla prądów przekraczających 80 A.



Rys. 1. Dopasowanie wyników obliczeń i pomiarów przy wykorzystaniu funkcji eksponencjalnej danej wzorem (1)

Z prac [10-13] wiadomo, że do modelowania podobnych przebiegów coraz częściej wykorzystuje się funkcję **W-Labmerta** $W(x)$ zwaną też **omega**. Jest ona odwrotnością funkcji $f(x)=xe^x$, a jej postać przedstawia się równaniem (3).

$$(3) \quad x = W(x) \cdot e^{W(x)}$$

Funkcja ta została złożona z funkcją eksponencjalną oraz została pozbawiona offsetu, tworząc funkcję f_{LW} .

$$(4) \quad f_{LW}(x) = W(e^{g(x)}) - W(e^{g(0)})$$

```
def FncLw(U:np.array, a, b):
    I = lambertw(np.exp((U * a) + b)) -
    lambertw(np.exp(b))
    return I.real
```

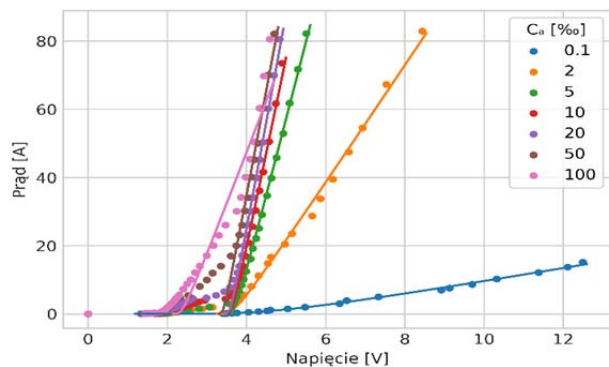
Stosując dopasowanie współczynników funkcji f_{LW} z użyciem narzędzia `curve_fit` uzyskuje się bardzo duży zakres zmian wartości współczynnika błędu. Jego wartości są większe niż w poprzednim przypadku i mieszczą się w zakresie od **0,19** do **11**. Jednak dla dużych wartości prądów model jest poprawny i wykazuje właściwą tendencję zmian. Wyniki modelowania pokazano na rys. 2.

Ze względu na niesatysfakcjonujące dopasowanie wyników obliczeń do wyników pomiarów, które zapewniają pojedyncze funkcje, sprawdzono przydatność do aproksymacji rozważanych zależności trzech funkcji składanych o postaci:

$$(5) \quad f_A(x) = f_{EXP_1}(x) + f_{EXP_2}(x)$$

$$(6) \quad f_B(x) = f_{EXP}(x) + f_{LW}(x)$$

$$(7) \quad f_C(x) = f_{LW_1}(x) + f_{LW_2}(x)$$



Rys. 2. Dopasowanie wyników obliczeń i pomiarów przy wykorzystaniu funkcji W-Lamberta danej wzorem (3)

```
def FncA(U:np.array, a, b, c, d):
    I = (FncExp(U, a, b) + FncExp(U, c, d))
    return I
def FncB(U:np.array, a, b, c, d):
    I = (FncExp(U, a, b) + FncLw(U, c, d))
    return I
def FncC(U:np.array, a, b, c, d):
    I = (FncLw(U, a, b) + FncLw(U, c, d))
    return I
```

Żadna z rozważanych funkcji nie zapewnia bezbłędnej aproksymacji. Dla każdej z tych funkcji wybrano jedną charakterystykę, dla której współczynniki posłużyły jako warunki początkowe do obliczeń współczynników w kolejnej iteracji. Wybór tych współczynników był podyktowany następującymi czynnikami:

- możliwie małą wartością współczynnika błędu,
- wartościami współczynników, które zachowują trend względem współczynników z pozostałych przebiegów,
- wartością stężenia - najlepiej 5‰, 10‰ lub 20‰, ewentualnie 2‰ lub 50‰.

Wartości współczynnika błędu zostały podane w Tabeli 1. Na zielono zostały oznaczone wartości tych błędów dla przebiegów, których współczynniki początkowe posłużyły jako warunki początkowe dla kolejnej iteracji.

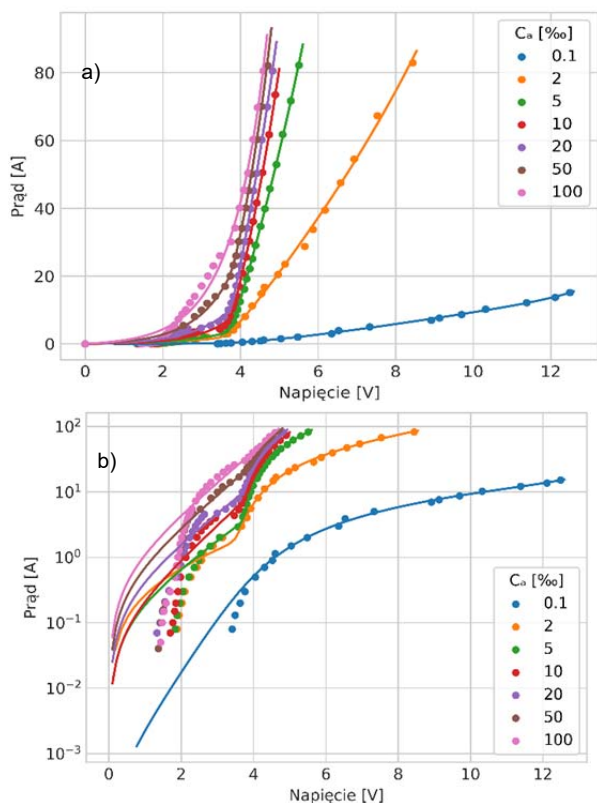
```
curve_fit(FncX, U, I, p0=(a0,b0,c0,d0))
```

Na czerwono oznaczono wartości błędu, przy której iteracja druga, z modyfikacją stanów początkowych, znacznie pogorszyła dokładność aproksymacji.

Funkcja f_A będąca złożeniem dwóch funkcji eksponencjalnych cechuje się zdecydowanie największym współczynnikiem błędu. Funkcja f_B złożona z funkcji eksponencjalnej i funkcji W-Lamberta na wykresie w skali liniowej wykazuje dobrą zgodność z wynikami pomiarów (rys. 3a). Jednak wykres w skali liniowo-logarytmicznej (rys. 3b) ujawnia, że dla małych prądów dopasowanie nie jest zadowalające. Z kolei, model oparty na funkcji f_C złożonej z dwóch funkcji W-Lamberta zapewnia najlepsze dopasowanie wyników obliczeń i pomiarów, co potwierdza rys. 3.

Tabela. 1. Wartości współczynników błędu dla funkcji (5-7)

stężenie C_a [%o]	iteracja 1			iteracja 2		
	f_A	f_B	f_C	f_A	f_B	f_C
0,1	$1,2 \times 10^6$	2,22	2,51	$2,51 \times 10^6$	2,22	2,51
2,0	$1,08 \times 10^6$	inf	2,11	$5,78 \times 10^5$	0,84	2,99
5,0	$1,75 \times 10^6$	inf	8,44	$2,4 \times 10^6$	0,85	1,44
10,0	NaN	inf	11,95	675,3	2,22	1,87
20,0	inf	2,42	1,47	646,3	2,41	1,47
50,0	NaN	4,49	1,68	$6,47 \times 10^6$	4,48	1,68
100,0	inf	0,87	2,23	149×10^6	36,82	2,23



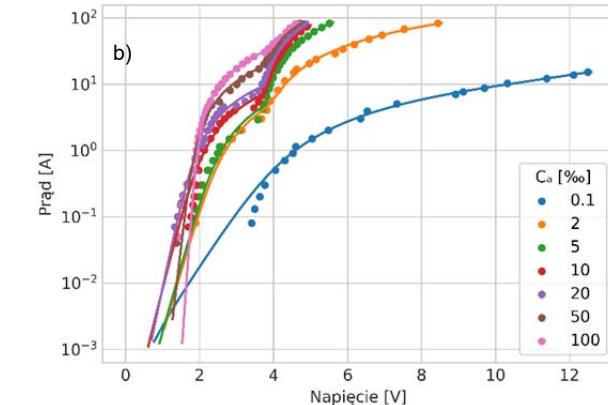
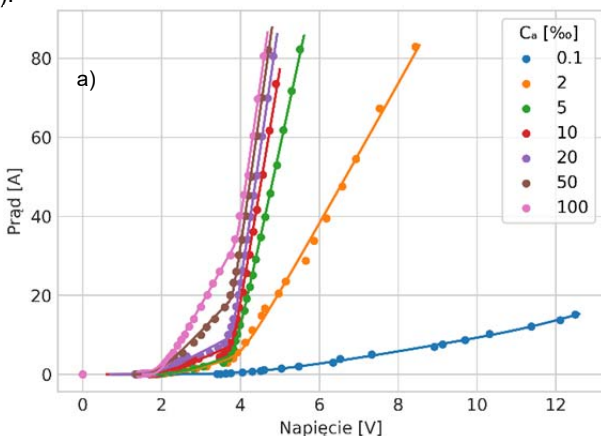
Rys. 3. Dopasowanie wyników obliczeń i pomiarów przy użyciu funkcji f_b (6): w skali liniowej (a) oraz liniowo-logarytmicznej (b)

Model ogólny

Wykorzystując wyniki przedstawione w poprzednim rozdziale wybrano funkcję f_c do opisu charakterystyk elektrolizera. Jednak współczynniki tej funkcji zostały wyznaczone osobno dla każdej krzywej odpowiadającej poszczególnym wartościom stężenia C_a . W funkcji f_c występuje suma dwóch funkcji f_{LW} opisanej przy wykorzystaniu dwóch parametrów. A zatem model opisujący funkcje zawierające cztery parametry a, b z funkcji f_{LW1} oraz c, d z f_{LW2} . Wartości parametrów modelu zostały umieszczone w tab. 2. Aby zaobserwować korelację między tymi parametrami ich wartości uzyskane dla poszczególnych wartości stężenia zostały znormalizowane poprzez standaryzację za pomocą wzoru:

$$(8) \quad x_{norm} = \frac{x - \bar{x}}{\sigma}$$

w którym x_{norm} oznacza wartość znormalizowaną; \bar{x} - wartość średnią; x - wartość oryginalną; σ - odchylenie standardowe. Wyniki pokazano na wspólnym wykresie (rys. 4).



Rys. 4. Dopasowanie wyników obliczeń i pomiarów przy użyciu funkcji f_c (7): w skali liniowej (a) oraz liniowo-logarytmicznej (b)

Tabela 2. Wartości parametrów a, b, c, d dla poszczególnych modeli

C_a [%]	Parametr a	Parametr b	Parametr c	Parametr d
0,1	1,777	-20,562	1,933	-7,874
2,0	4,336	-10,708	13,974	-55,187
5,0	4,560	10,858	42,975	-163,36
10,0	5,064	-9,866	56,233	-212,73
20,0	6,011	10,779	63,907	-240,81
50,0	11,128	-20,021	60,645	-229,33
100,0	18,454	-34,943	53,290	-207,50

Do powiązania parametrów zostało wykorzystane złożenie wielomianu z funkcją wykładniczą (9).

$$(9) \quad f_{abcd}(C_a) = M^{N C_a} + M^{(N-1) C_a} + \dots + M^{C_a} + 1$$

Dla parametrów a, b, c, d zostały dobrane empirycznie wartości M i N , które zostały umieszczone w Tabeli 3.

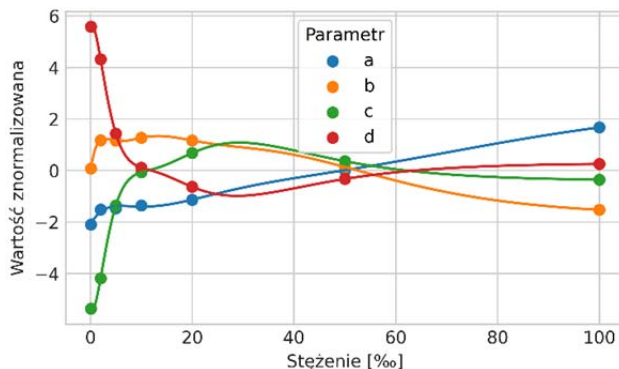
Tabela 3. Wartości M oraz N dla parametrów a, b, c, d

	Parametr a	Parametr b	Parametr c	Parametr d
M	0,97	0,97	0,94	0,94
N	5	6	6	6

Dopasowanie zostało zrealizowane przy pomocy metody **polyfit** oraz **poly1d**.

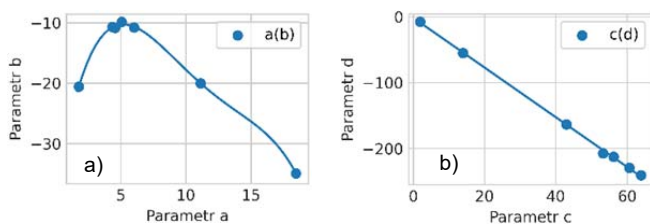
$$f = \text{np.poly1d}(\text{np.polyfit}(\text{np.power}(M, X), Y, N))$$

Znormalizowane wartości parametrów wraz z obliczoną funkcją dopasowującą pokazuje rys. 5. Widać, że parametry zachowują widoczny trend w funkcji stężenia.



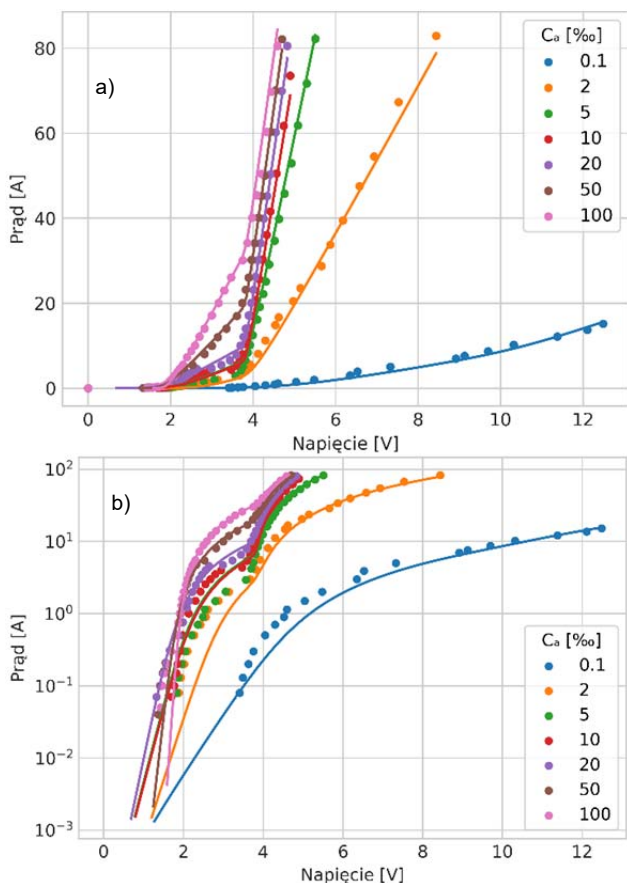
Rys. 5. Wartości parametrów a, b, c, d w funkcji stężenia roztworu

Dodatkowo można zaobserwować zależność liniową między współczynnikami **c** i **d** (rys. 6b) oraz korelację między współczynnikami **a** i **b**, którą można opisać za pomocą wielomianu czwartego rzędu (rys. 6a)



Rys. 6. Korelacja między parametrami a, b (a) i c, d (b)

W końcowej postaci modelu można opisać parametr **d** za pomocą **c** oraz **b** za pomocą **a**. Zatem, znając stężenie masowe C_a , za pomocą dwóch funkcji o wzorze ogólnym (9) należy obliczyć parametry **a** i **c**. Znając je, oblicza się wartości parametrów **b** i **d**. Obliczone parametry wystarczy podstawić do funkcji f_c . Efekt modelowania za pomocą tego modelu pokazano na rys. 7.



Rys. 7. Charakterystyki elektrolizera z pomiarów oraz końcowej postaci modelu w skali liniowej (a) oraz liniowo-logarytmicznej (b)

Wartości błędów zestawiono w Tabeli 4. Uśredniony błąd średniokwadratowy w modelu ogólnym (err_2) wzrósł względem błędów dla poszczególnych przebiegów (err_1).

Tabela 4. Wartości błędów średniokwadratowych

C_a [%]	0,1	2	5	10	20	50	100
err_1	0,03	1,36	0,33	0,74	0,53	0,52	0,39
err_2	0,36	3,02	2,07	2,67	1,33	0,80	3,83
err_2/err_1	10,4	2,23	6,32	3,60	2,52	1,53	9,73

Podsumowanie

W pracy przedstawiono sposób formułowania modelu matematycznego opisującego charakterystyki prądowo-napięciowe elektrolizera alkalicznego zawierającego roztwór KOH o zmieniającym się stężeniu. Wykazano, testując różne funkcje, że najlepsze dopasowanie wyników obliczeń i pomiarów można uzyskać, wykorzystując złożenie funkcji W-Lamberta.

Zaproponowany opis funkcyjny zapewnia bardzo dobre dopasowanie wyników obliczeń i pomiarów w szerokim zakresie zmian prądu zasilania elektrolizera oraz stężenia elektrolitu.

Przedstawione wyniki badań mogą być wykorzystane przy formułowaniu dynamicznego modelu elektrolizera, a także przy poszukiwaniu postaci funkcji aproksymującej wyniki wybranych pomiarów elektrycznych.

Autorzy: mgr inż. Emilia Świtalski, prof. dr hab. inż. Krzysztof Górecki, Uniwersytet Morski w Gdyni, Wydział Elektryczny, Katedra Elektroniki Morskiej, ul. Morska 83, 81-225 Gdynia, E-mail: e.switalski@we.umg.edu.pl, k.gorecki@we.umg.edu.pl

LITERATURA

- [1] J. Mizeraczyk, K. Urashima, M. Jasinski, M. Dors "Hydrogen Production from Gaseous Fuels by Plasmas - A Review", International Journal of Plasma Environmental Science & Technology, Vol. 8, No. 2, (2014), pp. 89-97.
- [2] K. Randolph, "Hydrogen production - Session introduction", 2013 Annual Merit Review and Peer Evaluation Meeting, U.S. DOE, May 16, (2013).
- [3] K. Górecki, M. Górecka, P. Górecki: Modelling properties of an alkaline electrolyser. Energies, Vol. 13, No. 12, (2020), 3073.
- [4] A.S. Tijani, N.A.B. Yusup, A.H.A. Rahim, "Mathematical modelling and simulation analysis of advanced alkaline electrolyzer system for hydrogen production", Procedia Technology, Vol. 15, (2014), pp. 798-806.
- [5] NumPy community, "NumPy User Guide", (2022). <https://numpy.org/doc/stable/numpy-user.pdf>
- [6] Wes McKinney and the Pandas Development Team, "pandas: powerful Python data analysis toolkit", (2022). <https://pandas.pydata.org/docs/pandas.pdf>
- [7] E. Świtalski, K. Górecki: System wbudowany do badania właściwości elektrolizera. Przegląd Elektrotechniczny, R. 98, nr 1, (2022), s. 151-154.
- [8] SciPy User Guide. <https://docs.scipy.org/doc/scipy/tutorial/index.html>
- [9] P. Górecki, K. Górecki, "The influence of a mounting manner of power MOS transistors on characteristics of the Totem-Pole circuit with RLC load", Microelectronics International, Vol. 33, No. 3, (2016), pp. 176-180.
- [10] A. Jain, A. Kapoor, "Exact analytical solutions of the parameters of real solar cells using Lambert W-function", Solar Energy Materials and Solar Cells, 81, (2004), pp 269-277.
- [11] A. Jain, A. Kapoor, "A new method to determine the diode ideality factor of real solar cell using Lambert W-function", Solar Energy Materials and Solar Cells, 85, (2005), 391-396.
- [12] C. W. Hansen, "Parameter Estimation for Single Diode Models of Photovoltaic Modules", Sandia Report SAND2015-2065, (2015).
- [13] JW Bishop, "Computer simulation of the effects of electrical mismatches in photovoltaic cell interconnection circuits" Solar Cell, (1988).