

# Reducción basada en gramiano cruzado de un modelo electroquímico de celdas de iones de litio

Fernando A. Ortiz-Ricardez, Aldo Romero-Becerril y  
Luis A. Álvarez-Icaza \*

\* Instituto de Ingeniería, Universidad Nacional Autónoma de México  
04510, CDMX, México. e-mail: FOrtizR@iingen.unam.mx;  
aldo.romerob@gmail.com; alvar@pumas.unam.mx

**Resumen:** Se presenta una reducción basada en valores singulares de Hankel para un sistema lineal e invariante en el tiempo, el cual representa la discretización de un modelo electroquímico de partícula única de celdas de iones de litio. La reducción presentada consiste en calcular el gramiano cruzado, el cual es menos costoso computacionalmente que los gramianos de controlabilidad y observabilidad requeridos para el balanceo tradicional. Con este método es posible reducir la dimensión del modelo discretizado en un 80%. En el peor caso se tiene 0.2% de error relativo para la fracción molar de iones de litio en fase sólida promedio, íntimamente relacionada con el estado de carga promedio de la celda.

*Palabras Clave:* Modelado e identificación de sistemas, control de sistemas lineales, sistemas de parámetros distribuidos, reducción de orden, celdas de iones de litio.

## 1. INTRODUCCIÓN

Por su gran capacidad de almacenamiento en comparación con otras tecnologías, existe un creciente interés por estudiar y generalizar el uso de celdas de iones de litio ( $\text{Li}^+$ ) en aplicaciones automotrices (Chaturvedi et al., 2010), (Dey et al., 2015), especialmente en los vehículos eléctricos híbridos. Una familia de modelos electroquímicos simplificados, denominados Modelos de Partícula Única (**MPU**), describen con mayor detalle los fenómenos asociados a los principales mecanismos de carga y descarga que los modelos de circuito equivalente (Dey et al., 2015). Los **MPU** representan la difusión de  $\text{Li}^+$  en fase sólida en promedio para cada electrodo, considerando una partícula esférica representativa del material activo de cada uno y suponiendo que las propiedades constantes a lo largo de los mismos.

La difusión en fase sólida para cualquier electrodo se representa por la Ecuación Diferencial Parcial (**EDP**)

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

con condiciones inicial  $c_s(0, r) = c_{s0}(r)$  y de frontera

$$\frac{\partial c_s(t, r)}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0; \quad \frac{\partial c_s(t, r)}{\partial r} \Big|_{r=R_s} = \frac{\pm 1}{FSD_s a^\pm l^\pm} i_d, \quad (2)$$

donde  $D_s$  es el coeficiente de difusión de  $\text{Li}^+$  en estado sólido y  $R_s$  el radio de la partícula representativa;  $F$  es la constante de Faraday,  $S$  es la sección transversal de la celda,  $a^\pm$  el área de superficie activa por unidad volumétrica de electrodo y  $l^\pm$  es el espesor del electrodo; los signos  $\pm$  indican de qué electrodo se trata. Por facilidad de manejo, se normalizan  $\zeta = c_s(t, r)/c_{sm}$  para la concentración de  $\text{Li}^+$  en estado sólido  $c_s(t, r)$  respecto a la concentración máxima  $c_{sm}$ , y  $\xi = r/R_s$  para la

coordenada radial  $0 \leq r \leq R_s$ , de modo que  $0 \leq \zeta, \xi \leq 1$ , y la condición inicial es  $\zeta(0, \xi) = \zeta_0(\xi)$ . Por otro lado, el factor  $D_s$  de (1) se normaliza junto con  $t$  mediante  $\tau = (D_s/R_p^2)t$ ,  $\tau \geq 0$  (Subramanian et al., 2005). Así, (1) se reescribe

$$\frac{\partial \zeta}{\partial \tau} = \frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left( \xi^2 \frac{\partial \zeta}{\partial \xi} \right), \quad (3)$$

con condiciones inicial  $\zeta_s(0, \xi) = \zeta_{s0}(\xi)$  y de frontera

$$\frac{\partial \zeta}{\partial \xi} \Big|_{\xi=0} = 0; \quad \frac{\partial \zeta}{\partial \xi} \Big|_{\xi=1} = \frac{\pm R_s}{FSD_s a^\pm c_{sm} l^\pm} i_d, \quad (4)$$

tal que el coeficiente de difusión es 1 y las variables independientes  $(\tau, \xi)$  son adimensionales. La fracción molar de  $\text{Li}^+$  en la superficie de la partícula representativa es  $\zeta_s(\tau) = \zeta(\tau, \xi = 1)$  y la corriente eléctrica aplicada (entrada)  $i_d \triangleq i_d(\tau)$ . Con esta normalización de variables, las condiciones de frontera (2) sólo implican una dilatación temporal de  $i_d \triangleq i_d(t)$  en (4). El potencial total de la celda es

$$V = -U^-(\zeta_s^-) + U^+(\zeta_s^+) - (\varrho^-(\zeta_s^-) + \varrho^+(\zeta_s^+) + R_{cel})i_d, \quad (5)$$

donde  $U^\pm(\zeta^\pm)$  son los potenciales de equilibrio de los electrodos. Además,  $R_{cel}$  es la resistencia óhmica total de la celda y las funciones auxiliares  $\varrho^\pm$  representan pequeñas caídas de potencial inducidas por la no linealidad de la cinética de las reacciones de intercalación de  $\text{Li}^+$  en los electrodos.

Dada la complejidad matemática de las **EDP** al tratarlas en el contexto clásico del control de sistemas dinámicos, se recurre a versiones discretizadas de éstas, es decir, aproximaciones mediante un conjunto de  $n$  Ecuaciones Diferenciales Ordinarias (**EDO**) lineales. Cada **EDO** modela un punto sobre la coordenada radial, cuya ubicación depende de la distribución del mallado empleado, y el conjunto

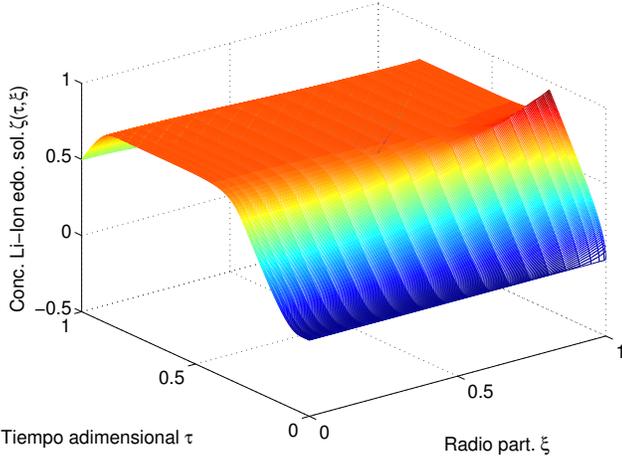


Figura 1. Concentración  $\text{Li}^+$  en fase sólida

de dichos puntos construye un perfil para  $\zeta(\tau, \xi)$  (Figura 1). Los sistemas discretizados obtenidos mediante métodos en Diferencias Finitas (**DF**), Cuadratura Diferencial Polinómica (**CDP**) y Cuadratura Diferencial de Fourier (**CDF**), con el mallado adecuado, ofrecen aproximaciones manejables analítica y numéricamente, con soluciones que pueden hacerse arbitrariamente cercanas a la respuesta de la **EDP** (Romero-Becerril y Alvarez-Icaza, 2011).

Puesto que las discretizaciones más fieles a los perfiles exactos de la PDE suelen ser de órdenes altos, existe un compromiso con la complejidad de su uso, por ejemplo, al implementar observadores basados en filtros de Kalman, que pueden ser muy demandantes computacionalmente. Por ello es desable reducir dichos modelos discretizados antes de construir un esquema de observación de estado o estimación paramétrica.

Aunque diagonalizar la dinámica del modelo discretizado empleando una transformación de similitud para discriminar valores propios de dinámica rápida es un método común de reducción de orden, en este artículo se utiliza una técnica sustancialmente mejor denominada Balanceo (Moore, 1981). Dicha técnica consiste en hallar una transformación de similitud para un sistema Lineal Invariante en el Tiempo (**LIT**) tal que sus Gramianos de controlabilidad y observabilidad se diagonalicen simultáneamente y posteriormente se reduce el orden del sistema **LIT** balanceado. Existen, entre otros, dos métodos basados en valores singulares para sistemas **LIT**: la Realización Balanceada Residualizada (**RBR**) y la Realización Balanceada Truncada (**RBT**) (Aizad et al., 2014). Dichos métodos se sustentan en la descomposición del modelo mediante los gramianos de controlabilidad y observabilidad basada en valores singulares de Hankel. El gramiano cruzado, definido primero en (Fernando y Nicholson, 1982), ha mostrado proporcionar un balanceo ventajoso computacionalmente (Himpe y Ohlberger, 2014) respecto al balanceo interno tradicional de Moore (1981).

El objetivo de este artículo es mostrar que, utilizando el balanceo basado en gramiano cruzado, es posible mantener el desempeño entrada-salida de un modelo originalmente de orden 20 a uno de orden 4 sin pérdida significativa de precisión para la fracción molar promedio y la fracción molar en superficie de la partícula representativa

de un electrodo. El artículo está organizado como sigue: la Sección 2 explica el proceso de reducción de orden del modelo discretizado de orden pleno  $n$ , de modo que se finalice con un modelo equivalente entrada-salida de orden inferior. La Sección 3 expone cómo computar el Estado de Carga (**EDC**) promedio a partir de las variables de estado del modelo discretizado y de la fracción molar en superficie. La Sección 4 muestra simulaciones y sus interpretaciones, y finalmente, la Sección 5 presenta conclusiones y un esbozo del potencial de los resultados obtenidos.

## 2. REDUCCIÓN DE ORDEN

### 2.1 Generalidades sobre balanceo y reducción

Sea el sistema **LIT** mínimo, es decir observable y controlable, conformado por  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ,  $B \in \mathbb{R}^{n \times m}$ ,  $C \in \mathbb{R}^{r \times n}$  y  $D \in \mathbb{R}^{r \times m}$

$$\dot{x} = Ax + Bu ; y = Cx + Du, \quad (6)$$

con  $u \equiv u(t) \in \mathbb{R}^{m \times 1}$ ,  $\forall t \geq 0$ .  $A$  puede tener valores propios inestables, aunque restringida a que toda combinación con repetición<sup>1</sup>  $\mathbf{C}_n^s$  de dos valores propios  $(\mu, \lambda)$  cualesquiera de  $A$  entre sus  $n$  valores propios  $\sigma(A)$  satisfaga (Poznyak, 2008, p.137)

$$\lambda + \mu \neq 0, \forall \mathbf{C}_n^2(\lambda, \mu) | \lambda, \mu \in \sigma(A). \quad (7)$$

La condición (7) equivale a que no existan valores propios en común entre  $\sigma(A)$  y  $\sigma(-A)$  (Laub, 2005, p.145). Esta restricción es necesaria y suficiente para asegurar existencia y unicidad de los gramianos de controlabilidad  $W_c$  y de observabilidad  $W_o$ , definidos por la resolución de las ecuaciones algebraicas de Lyapunov

$$AW_c + W_cA^T = -BB^T, \quad (8)$$

$$A^TW_o + W_oA = -C^TC. \quad (9)$$

El balanceo consiste en calcular una matriz no singular  $W$  tal que la transformación  $x = W\tilde{x}$  para (6) provoque que, en las nuevas coordenadas  $\tilde{x}$ ,  $W_c$  y  $W_o$  sean ambos diagonales y, si es posible, iguales. Así, se tienen las matrices transformadas

$$\tilde{A} = W^{-1}AW; \tilde{B} = W^{-1}B; \tilde{C} = CW; \tilde{D} = D. \quad (10)$$

Además, con la diagonalización simultánea de matrices simétricas por una transformación congruente (Uhlig, 1973), se tiene

$$D_1 = W^{-1}W_cW^{-T}; D_2 = W^TW_oW. \quad (11)$$

Si  $D_1$  y  $D_2$  son diagonales, se dice que (6) está balanceado por  $W$ . Si, adicionalmente,  $D_1 \equiv D_2$ , se dice que (6) está internamente balanceado por  $W$ . Para el balanceo de (6) es condición suficiente que  $A$  sea estable (Hurwitz) y  $(A, B, C, D)$  observable y controlable. En este caso, un algoritmo para balancear internamente (Laub et al., 1987) y reducir (6) es:

1. Resolver  $AW_c + W_cA^T + BB^T = 0$  para  $W_c$ .
2. Resolver  $A^TW_o + W_oA + C^TC = 0$  para  $W_o$ .
3. Calcular los factores de Cholesky,  $W_c = L_cL_c^T$  y  $W_o = L_oL_o^T$ .
4. Calcular la descomposición en valores singulares del producto de los factores de Cholesky  $USV^T = L_o^TL_c$

<sup>1</sup>  $\mathbf{C}_n^s \triangleq (n+s-1)!/(s!(n-1)!)$ : Combinación con repetición de  $n$  elementos tomados de  $s$  en  $s$ , donde  $n \geq s$ .

donde  $\Sigma$  es una matriz diagonal positiva y  $U, V$  son ortonormales por columna.

5. Computar las matrices de transformación balanceante  $W = L_c V \Sigma^{-1/2}$ ,  $W^{-1} = \Sigma^{-1/2} U^T L_o^T$ .
6. Formar la realización balanceada como  $\tilde{A} = W^{-1} A W$ ,  $\tilde{B} = W^{-1} B$ ,  $\tilde{C} = C W$ ,  $\tilde{D} = D$ .
7. Seleccionar el orden del modelo reducido previsto proveniente de la realización balanceada.
8. Truncar o residualizar  $\tilde{A}$ ,  $\tilde{B}$ ,  $\tilde{C}$ ,  $\tilde{D}$ .

Los valores singulares de Hankel  $\rho$  se definen como las raíces cuadradas de los valores propios  $\sigma$  del producto  $W_c W_o$ , es decir,  $\rho \triangleq \sqrt{\sigma(W_c W_o)}$ . Para obtener el **RBT**, se hacen idénticamente cero las variables del estado  $\tilde{x} = [\tilde{x}_1, \tilde{x}_2]^T$  asociadas a valores singulares de Hankel pequeños a criterio del diseñador, es decir  $\tilde{x}_2 = 0$ . Así, el modelo (6) resulta

$$\dot{\tilde{x}}_1 = \tilde{A}_{11} \tilde{x}_1 + \tilde{B}_1 u ; y = \tilde{C}_1 \tilde{x}_1 + D u.$$

Para la **RBR**, el modelo reducido surge fijando las derivadas de las variables de estado asociadas a valores singulares de Hankel pequeños, igualmente a criterio del diseñador, es decir  $\dot{\tilde{x}}_2 = 0$ . Con ello, de (6) resulta

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{x}}_1 &= \left( \tilde{A}_{11} - \tilde{A}_{12} \tilde{A}_{22}^{-1} \tilde{A}_{21} \right) \tilde{x}_1 + \left( \tilde{B}_1 - \tilde{A}_{12} \tilde{A}_{22}^{-1} \tilde{B}_2 \right) u, \\ y &= \left( \tilde{C}_1 - \tilde{C}_2 \tilde{A}_{22}^{-1} \tilde{A}_{21} \right) \tilde{x}_1 + \left( D - \tilde{C}_2 \tilde{A}_{22}^{-1} \tilde{B}_2 \right) u. \end{aligned}$$

En ambos casos, la función de transferencia de orden reducido  $G_{n-r}(s)$  obtenida por los métodos de truncamiento y residualización satisface  $\|G_n(s) - G_{n-r}(s)\|_\infty \leq 2(\rho_{n-r+1} + \rho_{n-r+2} + \dots + \rho_n)$  (Gajic y Lelic, 2000), donde  $G_n$  es la función de transferencia de orden pleno, es decir, los valores singulares de Hankel definen una cota para el error de truncamiento/residualización.

## 2.2 Generalidades del gramiano cruzado

Una realización de espacio de estados  $(A, B, C, D)$  con  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ,  $B \in \mathbb{R}^{n \times m}$ ,  $C \in \mathbb{R}^{m \times n}$  y  $D \in \mathbb{R}^{m \times m}$  es simétrica si la matriz de transferencia  $G(s) \triangleq C(sI - A)^{-1}B + D$  es simétrica para todo  $s$  complejo que no corresponda a los valores propios de  $A$ , esto es  $G(s) = G^T(s)$ ,  $\forall s \in \mathbb{C} | s \neq \sigma_i \in \sigma(A)$ ,  $i = 1, \dots, n$ . Nótese que es necesario que el número de entradas sea igual al de salidas para que una realización sea simétrica y que todo sistema de una entrada-una salida (**SISO** por sus siglas en inglés) es trivialmente simétrico. Para esta clase de sistemas, el gramiano cruzado se define como la solución a la ecuación de Sylvester

$$A W_{co} + W_{co} A = -BC, \quad (12)$$

donde se asume, al igual que para (8) y (9), que se cumple (7). Al principio, la no singularidad de  $W_{co}$  se empleaba como criterio necesario y suficiente para caracterizar la minimalidad de  $(A, B, C, D)$  (Fernando y Nicholson, 1982) y (Fernando y Nicholson, 1985). Aunque es común asumir necesaria y suficiente la estabilidad asintótica de  $A$  para la resolución de (8) y (9) (Tan y He, 2007, p.42), es posible también balancear ciertos sistemas inestables, cumpliendo el criterio (7), mediante la solución de (12) (Kenney y Hewer, 1987). El Teorema 2.1 muestra la relación entre el gramiano cruzado y los gramianos de controlabilidad y observabilidad para sistemas simétricos.

*Teorema 2.1.* (Kenney y Hewer, 1987). Supóngase que la realización  $(A, B, C, D)$  es simétrica y que se satisface (7). Entonces  $W_{co}^2 = W_c W_o$ .

El Teorema 2.1, probado para sistemas **SISO** en (Fernando y Nicholson, 1982) y de múltiples entradas-múltiples salidas (**MIMO** por sus siglas en inglés) en (Fernando y Nicholson, 1985), implica que  $|\lambda(W_{co})| = \sqrt{|\lambda(W_c W_o)|}$  (Himpe y Ohlberger, 2014). Esto es evidente de las diagonalizaciones simultáneas (11). La diagonalización real del gramiano cruzado es un criterio necesario y suficiente (Kenney y Hewer, 1987) para el balanceo interno de (6). Las restricciones de similitud real para  $W_{co}$  y para el producto  $W_c W_o$  han incitado a investigar el balanceo de sistemas que no satisfagan dichas restricciones para  $W_c W_o$  (Zhou et al., 1999) mediante redefiniciones de los gramianos clásicos, o para  $W_{co}$  introduciendo un concepto llamado gramiano cruzado generalizado (Shaker, 2012).

Además del procedimiento de Laub et al. (1987), otro modo de balancear internamente empleando el gramiano cruzado, es usar la transformación  $\hat{W} \triangleq W(D_1 D_2)^{1/4} |D_2|^{1/2}$  y reemplazar  $W$  por  $\hat{W}$  en (11), para así inducir que  $D_1 \equiv D_2$  (Kenney y Hewer, 1987). El balanceo interno obtenido con  $\hat{W}$ , y también el de (Laub et al., 1987), presentan el mismo fenómeno descrito en (Moore, 1981) como simetría de valor absoluto de la matriz de la dinámica de la realización balanceada. La diferencia crucial entre ambos, es la menor exigencia computacional de  $\hat{W}$ , pues prescinde de factorizaciones de Cholesky.

## 2.3 Diagonalización del modelo discretizado

Se define ahora la transformación diagonalizante  $x \triangleq T \hat{x}$  donde  $T$  es una matriz no singular. Así, (6) puede escribirse

$$\dot{\hat{x}} = \hat{A} \hat{x} + \hat{B} u ; y = \hat{C} \hat{x} + \hat{D} u, \quad (13)$$

donde  $\hat{A} = T^{-1} A T$ ,  $\hat{B} = T^{-1} B$ ,  $\hat{C} = C T$  y  $\hat{D} = D$ . El operador  $T$  está formado por los vectores propios asociados a cada valor propio  $\lambda_i$ , con  $i = 1, \dots, n$  de  $A$ , ordenados de menor a mayor valor absoluto  $|\lambda|$  según su dominancia respecto a la velocidad de convergencia de las soluciones de (13). La dinámica correspondiente a los valores propios más cercanos al valor cero de dicho sistema puede evidenciarse si se desglosa el estado como  $\hat{x} = [\hat{x}_{nr}, \hat{x}_r]^T$ , donde  $\hat{x}_{nr} \in \mathbb{R}^{(n-r) \times 1}$  y  $\hat{x}_r \in \mathbb{R}^{r \times 1}$ . Con ello, (6) queda transformado como

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \dot{\hat{x}}_{nr} \\ \dot{\hat{x}}_r \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \hat{A}_{11} & \hat{A}_{12} \\ \hat{A}_{21} & \hat{A}_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{x}_{nr} \\ \hat{x}_r \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \hat{B}_{nr} \\ \hat{B}_r \end{bmatrix} u, \\ y &= [\hat{C}_{nr} \quad \hat{C}_r] \begin{bmatrix} \hat{x}_{nr} \\ \hat{x}_r \end{bmatrix} + D u. \end{aligned} \quad (14)$$

Para el sistema diagonalizado (14), es posible calcular el gramiano cruzado resolviendo (12) y revisando que todos los valores propios sean reales. No obstante, los sistemas (14) y (6) contienen un valor propio cero, con lo cual el criterio (7) no se satisface. Para mitigar este problema, primero se desglosa la transformación diagonalizante  $T$  como

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_{2nr} \\ x_r \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} \\ T_{21} & T_{22} & T_{23} \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{x}_1 \\ \hat{x}_{2nr} \\ \hat{x}_r \end{bmatrix}, \quad (15)$$

lo cual permite reexpresar (14) de la forma

$$\begin{bmatrix} \dot{\hat{x}}_1 \\ \dot{\hat{x}}_{2nr} \\ \dot{\hat{x}}_r \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{A}_{11} & \hat{A}_{12} & \hat{A}_{13} \\ \hat{A}_{21} & \hat{A}_{22} & \hat{A}_{23} \\ \hat{A}_{31} & \hat{A}_{32} & \hat{A}_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{x}_1 \\ \hat{x}_{2nr} \\ \hat{x}_r \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \hat{B}_1 \\ \hat{B}_{2nr} \\ \hat{B}_r \end{bmatrix} u, \\ y = [\hat{C}_1 \ \hat{C}_{2nr} \ \hat{C}_r] \begin{bmatrix} \hat{x}_1 \\ \hat{x}_{2nr} \\ \hat{x}_r \end{bmatrix} + \hat{D}u. \quad (16)$$

La idea es balancear la porción de (16) no asociada al valor propio cero, es decir,  $[\hat{x}_{2nr}, \hat{x}_r]^T$ .

#### 2.4 Balanceo y reducción del modelo discretizado

Al sistema diagonalizado definido a bloques en (16) se le aplica la transformación balanceante  $\hat{x} \triangleq \bar{W}\tilde{x}$  (17). Como la parte de (16) correspondiente a la variable de estado  $\hat{x}_1$  no es Hurwitz, la porción en (17) definida como  $W = [W_{11}W_{12}; W_{21}W_{22}]$  sólo actúa sobre la dinámica correspondiente a las variables  $[\hat{x}_{2nr}, \hat{x}_r]^T$  sin afectar la dinámica relacionada al valor propio cero, es decir

$$\begin{bmatrix} \hat{x}_1 \\ \hat{x}_{2nr} \\ \hat{x}_r \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{1}_{1 \times 1} & \mathbf{0}_{1 \times n-r-1} & \mathbf{0}_{1 \times r} \\ \mathbf{0}_{n-r-1 \times 1} & W_{11} & W_{12} \\ \mathbf{0}_{r \times 1} & W_{21} & W_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{x}_1 \\ \tilde{x}_{2nr} \\ \tilde{x}_r \end{bmatrix}. \quad (17)$$

Aplicando  $\bar{W}$  resulta

$$\begin{bmatrix} \dot{\tilde{x}}_1 \\ \dot{\tilde{x}}_{2nr} \\ \dot{\tilde{x}}_r \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{A}_{11} & \tilde{A}_{12} & \tilde{A}_{13} \\ \tilde{A}_{21} & \tilde{A}_{22} & \tilde{A}_{23} \\ \tilde{A}_{31} & \tilde{A}_{32} & \tilde{A}_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{x}_1 \\ \tilde{x}_{2nr} \\ \tilde{x}_r \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \tilde{B}_1 \\ \tilde{B}_{2nr} \\ \tilde{B}_r \end{bmatrix} u, \\ y = [\tilde{C}_1 \ \tilde{C}_{2nr} \ \tilde{C}_r] \begin{bmatrix} \tilde{x}_1 \\ \tilde{x}_{2nr} \\ \tilde{x}_r \end{bmatrix} + \tilde{D}u. \quad (18)$$

El truncamiento de (18) se efectúa forzando las variables de estado menos dominantes a equivaler 0, esto es  $\tilde{x}_r = (\tilde{x}_i)_{i=n-r+1}^n = 0$ . Con ello, (18) queda reducido a

$$\dot{\tilde{x}}_{nr} = \begin{bmatrix} \tilde{A}_{11} & \tilde{A}_{12} \\ \tilde{A}_{21} & \tilde{A}_{22} \end{bmatrix} \tilde{x}_{nr} + \begin{bmatrix} \tilde{B}_1 \\ \tilde{B}_{2nr} \end{bmatrix} u, \\ y = [\tilde{C}_1 \ \tilde{C}_{2nr}] \tilde{x}_{nr} + \tilde{D}u; \quad (19)$$

donde  $\tilde{x}_{nr} = [\tilde{x}_1, \tilde{x}_{2nr}]^T$ . La residualización se obtiene induciendo las derivadas de las variables de estado de (18) menos dominantes a equivaler 0, esto es  $\dot{\tilde{x}}_r = (\dot{\tilde{x}}_i)_{i=n-r+1}^n = 0$ . Así, al sustituir las restricciones algebraicas obtenidas de (18) en su dinámica remanente, (18) resulta

$$\dot{\tilde{x}}_{nr} = \left( \begin{bmatrix} \tilde{A}_{11} & \tilde{A}_{12} \\ \tilde{A}_{21} & \tilde{A}_{22} \end{bmatrix} - A_g \right) \tilde{x}_{nr} + \left( \begin{bmatrix} \tilde{B}_1 \\ \tilde{B}_{2nr} \end{bmatrix} - A_f \tilde{B}_r \right) u, \\ y = ([\tilde{C}_1 \ \tilde{C}_{2nr}] - \tilde{C}_g) \tilde{x}_{nr} + (\tilde{D} - C_f \tilde{B}_r) u, \quad (20)$$

donde  $A_f \triangleq [\tilde{A}_{13}, \tilde{A}_{23}]^T \tilde{A}_{33}^{-1}$ ,  $A_g \triangleq A_f [\tilde{A}_{31}, \tilde{A}_{32}]$ ;  $C_f \triangleq \tilde{C}_r \tilde{A}_{33}^{-1}$  y  $C_g \triangleq C_f [\tilde{A}_{31}, \tilde{A}_{32}]$ .

### 3. ESTADO DE CARGA PROMEDIO

Aunque las variables de estado de las realizaciones reducidas de orden  $n - r$  pueden no tener un significado físico en las nuevas coordenadas balanceadas reducidas  $\tilde{x}$ , es posible volver a las coordenadas originales  $x$  mediante las transformaciones inversas de (15) y (17). El Estado de Carga (**EDC**) promedio se calcula como  $EDC_p(t) = (\zeta_p(t) - \zeta_0) / (\zeta_{100} - \zeta_0)$  (Romero-Becerril y Alvarez-Icaza, 2011), donde  $\zeta_0^\pm$  y  $\zeta_{100}^\pm$  son los coeficientes

de estequiometrías de carga al 0% y 100% (Smith y Wang, 2006), y la fracción molar promedio  $\zeta_p(t)$  se calcula (Chaturvedi et al., 2010), para el **MPU** y en coordenadas normalizadas  $(\zeta, \xi)$ , de la forma

$$\zeta_p(t) = \int_0^1 3\zeta(t, \xi) \xi^2 d\xi. \quad (21)$$

Así, para calcular  $\zeta_p(t)$  se resuelve la integral (21) empleando la respuesta temporal de los  $n$  estados reconstruidos, mediante (15) y (17), de las  $n - r$  variables balanceadas y reducidas  $\tilde{x}_{n-r}$ . Si el proceso de reducción de orden ha sido exitoso, el resultado de esta integral coincide bastante con la integral (21) calculada previa a la reducción. Otra forma de computar la fracción molar promedio  $\zeta(t, \xi)$  es mediante la respuesta temporal de la variable de estado correspondiente al valor propio en cero de la dinámica reducida de orden  $n - r$  (Romero-Becerril y Alvarez-Icaza, 2011).

Cabe mencionar que en las discretizaciones del tipo **CDP**, **CDF** y **DF**, las variables correspondientes a los valores en las fronteras ( $\xi = 0$  y  $\xi = 1$ ) no pueden modelarse mediante **EDOs**. Por tanto, las variables de las discretizaciones de orden  $n$  utilizadas son puntos internos en el dominio de los radios en las esferas del **MPU** explicado en la Sección 1. La evolución temporal en las fronteras se recuperan con ayuda de expresiones algebraicas dependientes de los  $n - 2$  puntos internos, calculadas de distintas formas de acuerdo al tipo de mallado y técnica de discretización usados (Romero-Becerril y Alvarez-Icaza, 2011).

### 4. SIMULACIONES Y RESULTADOS

Por simplicidad, las soluciones de las aproximaciones se resuelven respecto al tiempo normalizado  $\tau$ , el cual induce una normalización frecuencial  $\omega_n = (R_s^2/D_s)\omega$ . La señal de entrada es un pulso de corriente de carga constante de 1A de duración de 25% del tiempo normalizado total de simulación. Después siguen una etapa del 67% del tiempo con 0A suministrados o recibidos, y finalmente una fase de 18% del tiempo de simulación con una descarga constante de 1A. El tiempo total normalizado es una constante de tiempo  $\tau$ , dividido en 500 muestras para simulación. El método numérico de **MATLAB** usado para resolver las **EDO** de las realizaciones es **ode15s** con condiciones iniciales nulas. Para todos los sistemas **LIT** (reducciones y original), la salida es la fracción molar en superficie  $\zeta_s(\tau)$ , la cual solamente toma valores entre 0 y 1, incluyendo los límites.

Empleando discretizaciones de tipo **CDP** con una distribución de malla basada en polinomios de Chebyshev-Gauss-Lobatto, la Figura 2 muestra los diagramas de Bode de magnitud y fase de las funciones de transferencia  $G_n(s)$  de un modelo discretizado de orden  $n = 20$  (a reducir), y los diagramas de Bode de las funciones de transferencia  $G_{n-r}(s)$  de los esquemas balanceados (**RBT** y **RBR**) y los balanceados internamente (**RIBT** y **RIBR**) de orden  $n - r = 4$  obtenidos. Además, se incluye la respuesta de un modelo discretizado de orden  $n' = 4$  sin reducir para resaltar las ventajas de las reducciones estudiadas. La asignación de  $\zeta_s(\tau)$  como salida de los sistemas se debe a su gran influencia en el potencial total de la celda (5). La Figura 2 ilustra los diagramas de Bode de la respuesta de la discretización de orden bajo

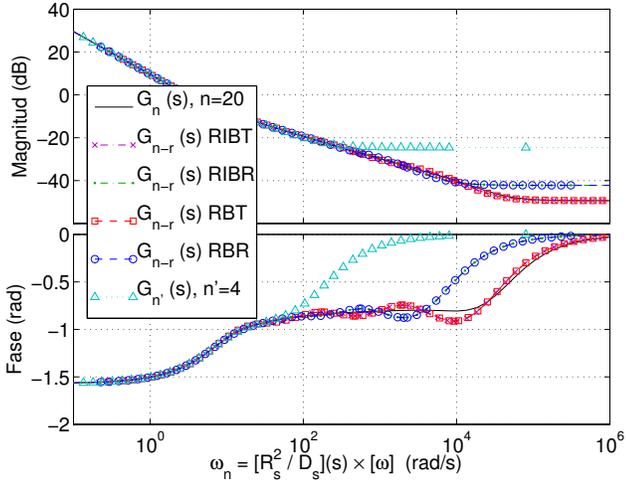


Figura 2. Diagramas de Bode de discretizaciones por CDP

sin reducir. Se observa que los diagramas de Bode de los esquemas **RBT** y **RBR** son idénticos a los de los esquemas **RIBT** y **RIBR** provistos tanto por el método de Kenney y Hewer (1987) como el de Laub et al. (1987). No obstante, al usar los métodos **RIBT** y **RIBR** de Laub et al. (1987), las factorizaciones de Cholesky resultan imposibles de calcular para MATLAB, especialmente al usar mallaado uniforme de puntos equidistantes, o basado en polinomios de Legendre (Romero-Becerril y Alvarez-Icaza, 2011). Por ello, se opta por el balanceo interno de Kenney y Hewer (1987). La Figura 3 exhibe la fracción molar **en superficie**  $\zeta_s(\tau)$ . En el acercamiento aparece  $\zeta_s(\tau)$  sobre el intervalo de tiempo donde cada reducción difiere más severamente respecto a la fracción molar **en superficie**  $\zeta_{sn}(\tau)$  del modelo discretizado de orden pleno  $n = 20$ . La Figura 4 exhibe el valor absoluto del error relativo en porcentaje de  $\zeta_s(\tau)$  respecto a  $\zeta_{sn}(\tau)$ , es decir,  $100 \times |(\zeta_s(\tau) - \zeta_{sn}(\tau)) / \zeta_{sn}(\tau)|$  para  $0 \leq \tau \leq 1$ . La Figura 4 expone lo siguiente:

- En la carga, la mejor descripción de  $\zeta_s(\tau)$  se obtiene con los esquemas **RBR** y **RIBR** indistintamente, seguidos de las reducciones **RBT** y **RIBT**. La fracción molar en superficie del modelo sin balancear  $\zeta_{snr}(\tau)$  de orden  $n' = 4$  es también precisa.
- Durante el reposo, en el cual el  $\zeta_s(\tau)$  finalmente tiende al valor de  $\zeta_p(\tau)$ , el mejor desempeño se consigue con los esquema **RBT** y **RIBT**, aunque también las reducciones **RBR** y **RIBR** proporcionan un error relativo menor al 1%. La dinámica discretizada sin balancear de orden  $n' = 4$  es deficiente a partir de aquí, exhibiendo errores del 10%.
- En la descarga, la mejor aproximación de  $\zeta_s(\tau)$  la proporcionan los esquemas **RBT** y **RIBT** en los cuales, a partir de  $\tau = 0.96$ , el error relativo supera el 1% hasta alcanzar un valor máximo de 17% debido a la sobreestimación de  $\zeta_s(\tau)$  (acercamiento de Figura 3), cuando  $\zeta_{sn}(\tau) = 0.02$ .

Para cada reducción, la Figura 5 (inferior) ilustra el valor absoluto del error relativo de  $\zeta_p(\tau)$  respecto a la fracción molar **promedio** del modelo discretizado de orden pleno  $\zeta_{pn}(\tau)$  sin reducir con  $n = 20$  dada por (21), es decir,  $100 \times |(\zeta_p(\tau) - \zeta_{pn}(\tau)) / \zeta_{pn}(\tau)|$ . Todas las reducciones exhiben

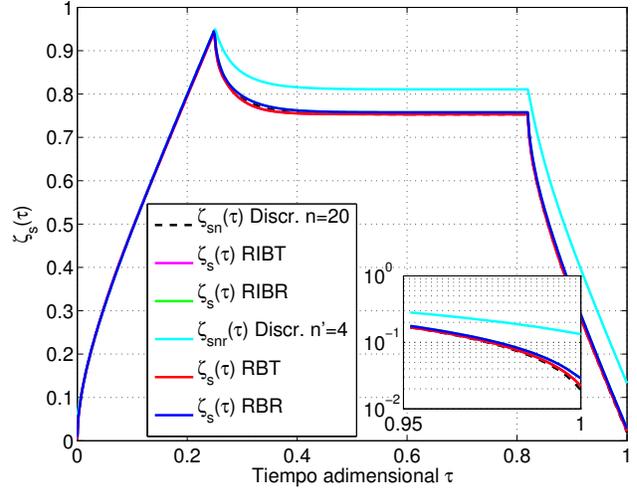


Figura 3. Fracción molar superficial

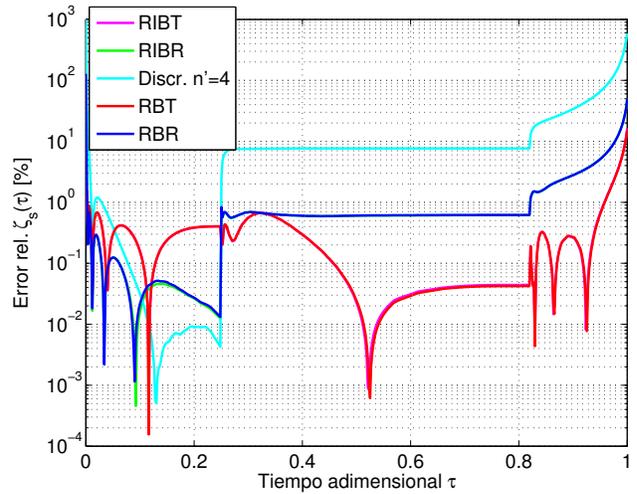


Figura 4. Error relativo de fracción molar superficial [%]

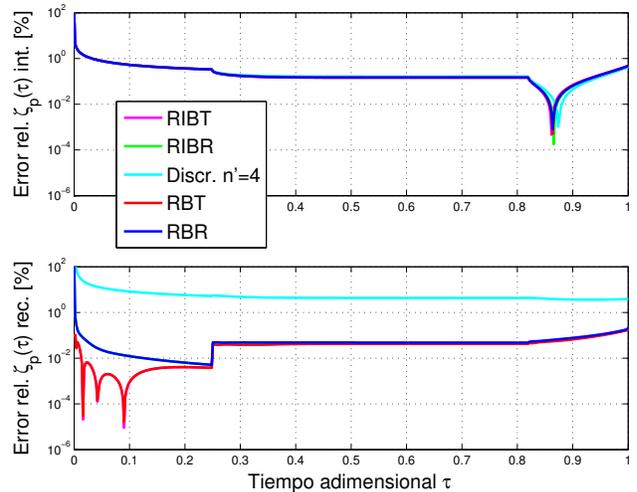


Figura 5. Errores relativos porcentuales de fracción molar promedio de integrador (superior) y reconstruida (inferior)

una precisión muy similar. Asimismo, en la Figura 5 (inferior) se nota que es más precisa la reconstrucción desde coordenadas reducidas  $\tilde{x}_{n-r}$ ; que la obtenida por la respuesta temporal de la coordenada  $\tilde{x}_1$ , correspondiente a la variable de estado asociada al valor propio cero de cada reducción (Figura 5, superior). Observar en la Figura 5 (inferior) que el cálculo de  $\zeta_p(\tau)$  es menos preciso en el modelo discretizado de orden 4 sin reducir que en las reconstrucciones  $\tilde{x}_{n-r} \rightarrow x$  y de ahí calcular (21). Esto se debe a que, para discretizaciones **CDP** y **DF** (Romero-Becerril y Alvarez-Icaza, 2011), a mayor orden de la discretización, la respuesta temporal de la aproximación tiende más a la solución de referencia calculada por el resolutor `pdepe` de **MATLAB**. Para las reducciones **RBT** y **RIBT**, se tiene como máximo 0.2% de error relativo al final de la descarga (Figura 5, inferior). Finalmente, como evaluación cuantitativa, la Tabla 1 muestra las normas  $\mathcal{L}_2(\cdot) \triangleq \sqrt{\int_0^1 |\cdot|^2 d\tau}$  de los errores relativos en porcentaje de las Figuras 4 y 5, calculados mediante integración numérica `trapz` de **MATLAB**.

Tabla 1. Normas  $\mathcal{L}_2$  de errores relativos [%]

| $\mathcal{L}_2(\%E.rel.)$ | RBT    | RBR    | RIBT   | RIBR   | Disc. $n' = 4$ |
|---------------------------|--------|--------|--------|--------|----------------|
| $\zeta_s(\tau)$           | 1.1018 | 5.4811 | 1.1269 | 5.4886 | 69.8809        |
| $\zeta_p(\tau)$ int.      | 3.1967 | 3.1968 | 3.1967 | 3.1968 | 3.1970         |
| $\zeta_p(\tau)$ rec.      | 0.0494 | 5.5673 | 0.0517 | 5.5673 | 93.7258        |

## 5. CONCLUSIONES

Debido a la simplicidad de cálculo y a la magnitud pequeña de los errores relativos presentados en la Sección 4, la reducción de orden más adecuada para la familia de sistemas dinámicos discretizados abordados en este trabajo es la **RBT** basada en gramiano cruzado. La ventaja de dicho gramiano respecto al balanceo interno dado por los gramianos de controlabilidad y observabilidad es su menor costo computacional, ya que sólo requiere resolver una ecuación matricial de Sylvester en lugar de dos ecuaciones matriciales de Lyapunov. Comparado con cualquier reducción aquí mostrada, y pese a que una discretización sin balancear de orden bajo representa razonablemente bien la fracción molar promedio de la concentración de  $\text{Li}^+$  en fase sólida, la representación de la fracción molar en superficie de la concentración de  $\text{Li}^+$  en fase sólida es deficiente, particularmente durante la descarga de la celda. Las reducciones simplifican el cómputo invertido al determinar parámetros de interés del **EDC** en celdas de  $\text{Li}^+$ , pues una reducción del 80% del orden de un sistema **LIT** simplifica la implementación de estimadores de **EDC** basados, por ejemplo, en filtros de Kalman.

## AGRADECIMIENTOS

Los dos primeros autores agradecen el apoyo financiero recibido a través del programa de becas del CONACyT (Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología).

## REFERENCIAS

Aizad, T., Sumislawska, M., Maganga, O., Agbaje, O., Phillip, N., and Burnham, K.J. (2014). Investigation of Model Order Reduction Techniques: A Supercapacitor Case Study. In *Adv. in Syst. Science, Adv. in Intell. Syst. and Computing*, 795–804. Springer. Vol. 240.

- Chaturvedi, N.A., Klein, R., Christensen, J., Ahmed, J., and Kojic, A. (2010). Algorithms for Advanced Battery Management Systems. *IEEE Control Syst. Mag.*, 49–68.
- Dey, S., Ayalew, B., and Pisu, P. (2015). Nonlinear Robust Observers for State-Of-Charge Estimation of Lithium-Ion Cells Based on a Reduced Electrochemical Model. *IEEE Trans. on Control Syst. Technol.*, 23(5), 1935–1942.
- Fernando, K. and Nicholson, H. (1982). Minimality of SISO Linear Systems. *Proc. of IEEE*, 70(10), 1241–1242.
- Fernando, K. and Nicholson, H. (1985). On The Cross-Gramian for Symmetric MIMO Systems. *IEEE Trans. on Circuits and Syst.*, CAS-32(5), 487–489.
- Gajic, Z. and Lelic, M. (2000). Singular Perturbation Analysis of System Order Reduction via System Balancing. *Proc. of the ACC, Chicago, IL*, 2420–2424.
- Himpe, C. and Ohlberger, M. (2014). Cross-Gramian-Based Combined State and Parameter Reduction for Large-Scale Control Systems. *Math. Probl. in Engin., Hindawi*, (843869), 1–13.
- Kenney, C. and Hower, G. (1987). Necessary and Sufficient Conditions for Balancing Unstable Systems. *IEEE Trans. on Automatic Control*, AC-32(2), 157–159.
- Laub, A.J. (2005). *Matrix Analysis for Scientists and Engineers*. SIAM.
- Laub, A.J., Heath, M.T., Paige, C.C., and Ward, R.C. (1987). Computation of System Balancing Transformations and Other Applications of Simultaneous Diagonalization Algorithms. *IEEE Trans. on Automatic Control*, AC-32(2), 115–122.
- Moore, B.C. (1981). Principal Component Analysis in Linear Systems: Controllability, Observability, and Model Reduction. *IEEE Trans. on Automatic Control*, AC-26(1), 17–32.
- Poznyak, A.S. (2008). *Adv. Math. Tools for Automatic Control Engineers. Deterministic Techniques*. Elsevier. 1st. Ed.
- Romero-Becerril, A. and Alvarez-Icaza, L. (2011). Comparison of discretization methods applied to the single-particle model of lithium-ion batteries. *Jrnl. of Power Sources*, (196), 10267–10279.
- Shaker, H.R. (2012). Generalized Cross-Gramian for Linear Systems. *7th IEEE Conf. on Industr. Electronics and Applic. (ICIEA)*, 749–751.
- Smith, K. and Wang, C.Y. (2006). Power and thermal characterization of a lithium-ion battery pack for hybrid electric vehicles. *Jrnl. of Power Sources*, (160), 662–673.
- Subramanian, V.R., Tikawar, V.D., and Tapriyal, D. (2005). Efficient Macro-Micro Scale Coupled Modeling of Batteries. *Jrnl. of The Electrochemical Soc.*, 152(10), A2002–A2008.
- Tan, S.X. and He, L. (2007). *Adv. Model Order Reduction Techniques in VLSI Design*. Cambr. Univ. 1st. Ed.
- Uhlig, F. (1973). Simultaneous Block Diagonalization of Two Real Symmetric Matrices. *Linear algebra and its applications*, 7, 281–289.
- Zhou, K., Salomon, G., and Wu, E. (1999). Balanced Realization and Model Reduction for Unstable Systems. *Int. Jrnl. of Robust and Nonlinear Control*, 9, 183–198.