



Casa abierta al tiempo

**Universidad Autónoma Metropolitana**

---

Departamento de Matemáticas

División de Ciencias Básicas e Ingeniería

Unidad Iztapalapa

---

# **Un método inverso para la determinación de perfiles de temperatura en una celda de combustible**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO ACADEMICO DE:

Maestro en Ciencias Matemáticas

Aplicadas e Industriales

P R E S E N T A:

Lic. Gerardo del Muro González

Director de Tesis: Dr. Joaquín Delgado Fernández

Iztapalapa, D. F., a 17 de septiembre de 2009

Jurado dictaminador:

D. R. © Lic. Gerardo del Muro González, 2009

Todos los derechos reservados. Ni la totalidad ni parte de esta publicación pueden reproducirse, registrarse o transmitirse, por un sistema de recuperación de información, en ninguna forma ni por ningún medio, sea electrónico, mecánico, fotoquímico, magnético o electroóptico, por fotocopia, grabación o cualquier otro, sin permiso previo por escrito del autor.

Printed in Mexico / Impreso en México

「人は何かの犠牲無しに、何も獲ることは出来ない。  
何かを獲るためには、同等の代価が必要になる。」

*“Humans cannot gain anything without first giving something in return. To obtain, something of equal value must be lost.”*

—Equivalent Exchange Principle



# Prefacio

---

La energía se ha convertido en una necesidad básica de las sociedades modernas en todas las dimensiones imaginables. Es difícil concebir a la industria, al transporte o a las comunicaciones sin su uso. Cada una de éstas depende de algún tipo de energía para poder funcionar, ya sea por combustión de algún hidrocarburo, por fusión nuclear o simplemente por la acción de dispositivos que transforman energía mecánica en eléctrica.

Actualmente, combustibles fósiles como el carbón, el petróleo y el gas natural son las fuentes principales de energía y su sobreexplotación les acerca dramáticamente al agotamiento. Como consecuencia, la mayoría de las principales reservas mundiales han entrado en declive y sólo las de oriente medio mantienen un crecimiento sostenido. Se vaticina incluso que esos yacimientos entren en crisis hacia el 2010 (World Energy Outlook 2006).

Los planificadores más optimistas sugieren que las reservas se agotarán en unos 40 o 50 años (World Energy Outlook 2006). Además, otras proyecciones muestran un incremento sustancial en su consumo por regiones, dejando a los países en vías en desarrollo como los que más energía necesitarán, aún si su ritmo de consumo es lento, Barnet *et al.* [3]. Esto provocaría que toda la producción mundial disminuya irremediabilmente conduciendo a la mayor crisis energética que haya sufrido el mundo industrializado — del consumo mundial de energía, cerca del 80.5% es de hidrocarburos —, a menos que antes se encuentre un sustituto adecuado a estas fuentes de energía.

Ante este panorama, las fuentes renovables de energía surgen como una respuesta alternativa. Durante las tres últimas décadas se han producido enormes avances, no solamente en lo tecnológico sino también en generar las condiciones adecuadas para su diseminación. Es en los países desarrollados especialmente donde se están haciendo grandes esfuerzos para introducirlas con el fin de reducir su precio y hacerlas competitivas vía incentivos. De este modo, las fuentes energéticas renovables de mayor crecimiento y

auge durante la última década han sido, precisamente, la energía solar y la eólica, con un crecimiento superior a 20 % al año.

En años recientes se ha tenido mayor interés en el estudio y la promoción de las llamadas celdas de combustible. Su atractivo es la manera eficiente de aprovechar la energía sin gran emisión de contaminantes al medio ambiente, pues los desechos pueden llegar a ser simplemente agua. Además pueden ser compactas, ligeras y no poseer piezas móviles importantes, por lo que son muy útiles en vehículos eléctricos, sistemas de apoyo a la red eléctrica o sistemas auxiliares de energía.

Otro punto importante a destacar relacionado con las celdas de combustible es que el hidrógeno, fuente de energía para su uso, se encuentra en forma abundante en el planeta aunque no en forma aislada. Se puede extraer de la naturaleza y si se cuenta con la tecnología adecuada para su separación de los productos primarios, puede convertirse en una fuente inagotable de energía. Estas características han convertido a las celdas de combustible en una alternativa que más trascendencia está adquiriendo en los países desarrollados. La investigación que se ha realizado en torno a ellas ha derivado en ingeniosas innovaciones que, por decirlo de algún modo, han logrado reducir costos dando lugar a una diseminación de la tecnología para su aplicación en distintas industrias, principalmente en la de transporte.

A pesar de las grandes innovaciones a la tecnología de celdas de combustible, la dificultad y el costo de su producción recae precisamente en la obtención de hidrógeno. En la actualidad se conocen dos formas de producción de hidrógeno: por reformación, en la cual éste es obtenido de los hidrocarburos separando el carbono de hidrógeno (uno de los más utilizados es el gas natural); y la otra forma es por electrólisis de agua. Esta última opción es más costosa que la primera.

En perspectiva, el futuro de las celdas de combustible dependerá de los costos comparativos con otras fuentes de energía. Se da por hecho que cuando el petróleo esté en una etapa de franco agotamiento, el hidrógeno será la alternativa más económica para el transporte y para otros usos y con ello, el despegue de nuevas tecnologías para su generación y aprovechamiento energético.

# Contenido

---

<b>1. Descripción de la tecnología</b> .....	1
1.1. Introducción .....	1
1.2. Celdas de Combustible .....	1
1.3. Módulos de las celdas de combustible .....	2
1.3.1. Módulo bipolar plano .....	3
1.4. Clasificación de las celdas de combustible .....	4
1.4.1. Clasificación por el electrolito usado .....	4
1.5. Ventajas e inconvenientes .....	5
1.6. Aplicaciones y perspectivas .....	6
<b>2. Modelado de una celda de combustible</b> .....	7
2.1. Introducción .....	7
2.2. Un modelo básico de celda de combustible .....	8
2.2.1. Planteamiento del modelo .....	8
2.2.2. Rendimiento de las celdas de combustible .....	11
2.3. Modelo 1-D de celdas de combustible .....	15
2.3.1. Simplificación del modelo .....	17
2.3.2. Las ecuaciones gobernantes .....	18
2.4. Modelos D. C. F. de celdas de combustible .....	21
<b>3. Conducción de calor en una celda de combustible</b> .....	25
3.1. Introducción .....	25
3.2. Transferencia de calor .....	26
3.2.1. Conducción del calor en un cuerpo .....	26
3.2.2. El problema de la conducción del calor bien condicionado .....	28
3.3. Problema de estado estacionario .....	29
3.3.1. Modelo de transferencia de calor en una celda de combustible .....	30

3.3.2. Problema homogéneo de transferencia de calor .....	32
3.3.3. Solución numérica al problema homogéneo de transferencia de calor	33
3.3.4. Simulación computacional .....	42
<b>4. Determinación de perfiles de temperatura en una celda de combustible .....</b>	<b>45</b>
4.1. Introducción .....	45
4.2. Problema de determinación de perfiles de temperatura .....	47
4.2.1. Espacios funcionales .....	48
4.2.2. Formulación del problema directo .....	49
4.2.3. Formulación del problema directo y del problema inverso .....	56
4.2.4. Regularización del problema inverso .....	57
4.2.5. Construcción de los gradientes conjugados .....	58
4.2.6. Algoritmo del método de regularización .....	61
4.2.7. Experimentos numéricos .....	62
<b>5. Conclusiones y Perspectivas .....</b>	<b>69</b>
<b>Referencias .....</b>	<b>73</b>



# Descripción de la tecnología

---

## 1.1. Introducción

El modelo energético mundial está tomando un nuevo rumbo debido fundamentalmente a la crisis existente en el mercado del petróleo. Los combustibles fósiles suponen una fuente no renovable de recursos, además de generar un alto grado de contaminación atmosférica.

Dentro de este último punto, el hidrógeno se presenta como un candidato ideal para su sustitución. En consecuencia, ha surgido un importante interés por la promoción de las llamadas celdas de combustible. Éstas se han convertido en objeto de mucha investigación y desarrollo a lo largo de todo el mundo, con motivo de tener al hidrógeno como fuente de energía limpia, sustentable y económicamente viable.

El presente capítulo ofrece una visión general de las celdas de combustible y proporciona al mismo tiempo conceptos fundamentales que explican el principio de su funcionamiento.

## 1.2. Celdas de Combustible

Una celda (o célula) de combustible es un dispositivo electroquímico de conversión directa de energía eléctrica a partir de reactivos químicos, R. O'Hayre *et al.* [27]. Su estructura física básica, o unidad de la celda de combustible, consiste en dos electrodos (un ánodo y un cátodo), en contacto con un electrolito.

En una típica celda de combustible, su combustible se alimenta continuamente del ánodo (electrodo negativo); mientras se suministra un oxidante (a menudo oxígeno del aire) al cátodo (electrodo positivo). En consecuencia, las reacciones electroquímicas ocurrirán

en ambos electrodos para producir una corriente eléctrica a través del electrolito usado. Su representación esquemática, tomando como combustible al hidrógeno, se muestra en la figura 1.1.

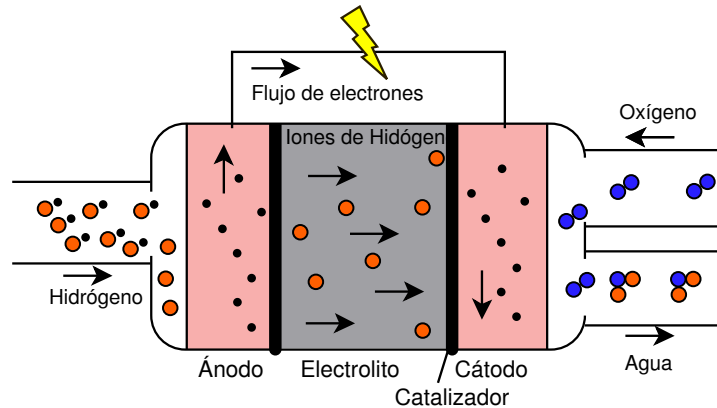


Fig. 1.1. Esquema de una celda de combustible típica con electrolito ácido

Aunque las celdas de combustible son similares a las baterías típicas, difieren en varios aspectos fundamentales. Principalmente, una batería es un dispositivo de almacenamiento de energía en el cual todos los elementos disponibles para la generación de la misma están contenidos dentro de ella. Ésta dejará de producir energía eléctrica cuando se consumen los reactivos químicos (es decir, se haya descargado). No ocurre lo mismo en una celda de combustible, ya que su tiempo de operación, en teoría, es virtualmente ilimitado, toda vez que se continúe suministrando combustible y oxidante.

Otra característica que destaca en las celdas de combustible es su funcionamiento isoterma (dada una temperatura, ésta se mantiene constante en el sistema), J. Larminie *et al.* [22]. La misma temperatura debe mantenerse en toda la celda con el fin de evitar la destrucción de la celda a través de la carga térmica. Esto es particularmente desafiante en reacciones muy exotérmicas: una gran cantidad de calor se genera dentro de la celda de combustible y por consiguiente, un problema habitualmente abordado cuando se elabora algún diseño.

### 1.3. Módulos de las celdas de combustible

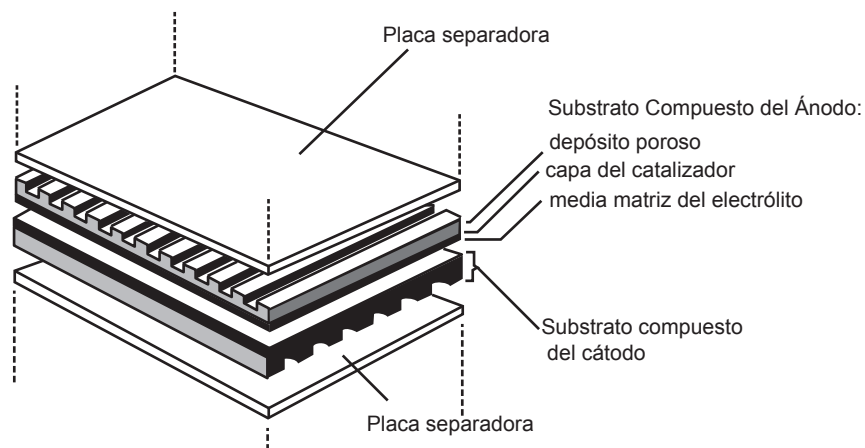
Para la mayoría de las implementaciones prácticas de una unidad de celda de combustible, ésta se debe combinar en una manera modular, en un apilado (o *stacking*), para

alcanzar el nivel para el uso de voltaje requerido de salida, así como de energía. Generalmente, el módulo implica el conectar eléctricamente varias unidades en serie. Se han desarrollado diversos arreglos que amplían dichos requerimientos de voltaje y de energía, de los más usados se encuentra el módulo bipolar plano. A continuación se describen sus características principales

### 1.3.1. Módulo bipolar plano

El diseño más común de módulo para una celda de combustible es el llamado arreglo bipolar plano, figura 1.2. Debido a la configuración plana, su interconexión se convierte en una placa separadora con dos funciones:

- 1) proporcionar una conexión eléctrica en serie entre unidades adyacentes y,
- 2) proporcionar una barrera que separe el combustible del oxidante de las unidades adyacentes.



**Fig. 1.2.** Vista expandida de una unidad de celda en un módulo de celda de combustible.

En muchos de los diseños bipolares planos, la interconexión también incluye canales que distribuyen el flujo del gas a través de las unidades, W. Vielstich *et al.* [33]. Este diseño es eléctricamente simple y conlleva pequeñas trayectorias para la corriente electrónica (la cual ayuda a minimizar la resistencia de la celda).

## 1.4. Clasificación de las celdas de combustible

Las celdas de combustible pueden ser clasificadas en una gran variedad de maneras distintas, dependiendo del criterio usado, son las características típicas relacionadas a su operación o construcción, F. Barbir [2], X. Li [23]. Por tanto, los sistemas de celdas de combustible involucran un vasto número de variables, tales como: tipo de electrolito usado, tipo de ion transferido a través del electrolito, tipo de reactivos (*e.g.* combustibles primarios y oxidantes), temperaturas de operación y presión, uso directo o indirecto del combustible primario, y sistemas primarios o regenerativos.

Atendiendo a este hecho, es común elegir un electrolito para definir las propiedades de la celda de combustible, incluido su principio de operación, diseño y construcción, así como los materiales a utilizar para la celda. Por ello, se acostumbra una clasificación acusando a la naturaleza del electrolito usado.

### 1.4.1. Clasificación por el electrolito usado

Por esta convención, uno puede agrupar las celdas en cinco tipos distintos, éstos son:

1. Celda de combustible con ácido fosfórico (PAFC, Phosphoric-Acid Fuel Cell)
2. Celda de combustible con una membrana de intercambio de protones (PEMFC, Proton Exchange Membrane Fuel Cell)
3. Celda de combustible alcalina (AFC, Alkaline Fuel Cell)
4. Celda de combustible de carbonato fundido (MCFC, Molten Carbonate Fuel Cell)
5. Celda de combustible de óxido sólido (SOFC, Solid Oxide Fuel Cell)

A pesar que todas estas celdas están basadas en el mismo principio electroquímico, todas operan a diferentes regímenes de temperatura, incorporan distintos materiales o difieren en su rendimiento. En la Tabla 1.1, se reúnen todas sus características distintivas.

En conjunto con la clasificación por electrolito, algunas celdas de combustible son clasificadas por el tipo de combustible que usan:

- Celdas de conversión directa de alcohol (DAFC, Direct Alcohol Fuel Cells). DAFC (o, más común, conversión directa de metanol, DMFC) funcionan con metanol puro mezclado con vapor de agua y se suministra directamente al ánodo de la celda.
- Celdas de conversión directa de carbón (DCFC, Direct Carbon Fuel Cells). En las DCFC, el carbón sólido (probablemente un combustible derivado del carbón o biomasa) se utiliza directamente en el ánodo, sin un paso intermedio de gasificación.

**Tabla 1.1.** Descripción de los distintos tipos de celdas de combustible

	PEMFC	PAFC	AFC	MCFC	SOFC
Electrolito	Membrana de polímero	$\text{H}_3\text{PO}_4$ (inmovilizado)	$\text{KOH}$ (inmovilizado)	Carbonato fundido	Cerámico
Portador de carga	$\text{H}^+$	$\text{H}^+$	$\text{OH}^-$	$\text{CO}_3^{2-}$	$\text{O}^{2-}$
Temperatura de operación	80 °C	200 °C	60 – 220 °C	650 °C	600–1000 °C
Catalizador	Platino	Platino	Platino	Níquel	Perovskitas (cerámico)
Componentes de la celda	Base de carbón	Base de carbón	Base de carbón	Base de acero	Base cerámica
Combustible	$\text{H}_2$ , metanol	$\text{H}_2$	$\text{H}_2$	$\text{H}_2$ , $\text{CH}_4$	$\text{H}_2$ , $\text{CH}_4$ , $\text{CO}$
Potencia ( $mW/cm^2$ )	350	200	100–200	100	240
Eficiencia eléctrica (%)	45–60	55	40–60	60–65	55–65
Tiempo de vida (horas)	>40,000	>40,000	>10,000	>40,000	>40,000
Costo estimado ( $U.S.D/kW$ )	>200	3000	>200	1000	1500

En la Tabla 1.1, se puede notar cómo al cambiar el portador de la carga, se cambia dramáticamente la reacción química de las celdas de combustible. Es decir, en una PEMFC, las reacciones parciales son promovidas por el movimiento de los protones ( $\text{H}^+$ ) y el agua se produce en el cátodo; mientras que en una SOFC, es el movimiento de los iones de oxígeno ( $\text{O}^{2-}$ ) los que las promueven para obtener agua en el ánodo. Así, si las celdas de combustibles utilizan otro tipo de movimiento iónico (*e. g.*  $\text{OH}^-$ ,  $\text{CO}_3^{2-}$ ), éstas expondrán también diferentes reacciones químicas, dando lugar a singulares ventajas y desventajas.

## 1.5. Ventajas e inconvenientes

Los tipos de celdas de combustible tratados anteriormente poseen regímenes de operación perceptiblemente distintos. Como resultado, sus materiales de construcción, así como sus técnicas de fabricación, darán lugar a ventajas e inconvenientes individuales que determinan su potencial para diversas utilidades. Sin embargo, su uso conlleva, por sí sola, ciertos beneficios:

- Beneficios medioambientales
  - a) Alta eficiencia en la utilización del combustible
  - b) Emisión cero de contaminantes
  - c) Reducción del peligro medioambiental inherente de las industrias extractivas.

- Beneficios en su ingeniería
  - a) Admisión de diversos combustibles
  - b) Flexibilidad de emplazamiento
  - c) Capacidad de cogeneración calorífica
  - d) Carácter modular
  - e) Simplicidad del dispositivo

Su mayor inconveniente es la producción de algunos de sus componentes, que al no efectuarse a gran escala, implica un costo elevado. En efecto, al tratarse de una tecnología en desarrollo y contar todavía con una baja demanda de unidades, su precio no puede, hoy en día, competir con el de las tecnologías convencionales. Es de esperar que, conforme la demanda se incremente, los precios se vayan equiparando

## 1.6. Aplicaciones y perspectivas

Las aplicaciones de las celdas de combustible pueden abarcar una amplia variedad de productos: desde dispositivos portátiles (teléfonos móviles, computadoras o pequeños electrodomésticos), donde las celdas empleadas son de un tamaño reducido, pasando por aplicaciones móviles como vehículos de todo tipo (coches, autobuses y barcos), hasta generadores de calor y energía en aplicaciones estacionarias para empresas, hospitales, zonas residenciales, por mencionar algunos.

En resumen, las celdas de combustible podrían reducir dramáticamente la contaminación del aire, siempre y cuando se tenga una población significativa de vehículos con esta tecnología. Además se podría hablar de un aumento en la eficiencia con la que se utilizan los energéticos así como de un nuevo mercado que seguramente demandará nuevos empleos así como especialistas en la materia.

# Modelado de una celda de combustible

---

## 2.1. Introducción

La motivación del análisis e investigación de las celdas de combustible es el desarrollo de tecnologías lo suficientemente maduras para conseguir sistemas confiables de larga duración a un costo reducido. En consecuencia, su modelación, así como su simulación computacional proveen hechos fundamentales para conocer, determinar y evaluar el impacto de variables (como: temperatura, presión o componentes) con el fin de predecir su rendimiento, F. Standaert *et al.* [32].

En efecto, el modelado de las celdas de combustible, como una herramienta exitosa, requiere de un modelo robusto y preciso, así como proveer respuestas lo suficientemente rápidas para su utilización, Sivertsen, B. R. *et al.* [30]. En términos de robustez, éste debe predecir el desempeño de la celda dentro de un rango amplio de condiciones de operación, además de predecirlo con suficiente precisión para calcular sus valores relativos (o algunas de sus tendencias).

En ocasiones, la precisión del modelo puede ser mejorada con la consideración correcta de supuestos — cualquier modelo es tan bueno como las bases en las que se sustenta—. No obstante, es importante entenderlos para comprender sus limitaciones para poder interpretar verazmente sus resultados, Barbir, F. [2].

Por otro lado, la mejora de la robustez y de la precisión del modelo conlleva cierta precaución, debido principalmente a su posible decremento en eficiencia computacional. Para sobrellevar dicho problema, lo recomendable es seleccionar uno que medie entre robustez, precisión y complejidad computacional, Berning, T. *et al.* [5]

## 2.2. Un modelo básico de celda de combustible

El planteamiento de un modelo que describa el funcionamiento de las celdas de combustible resulta en un problema demasiado complejo. Por tal motivo, un primer intento es caracterizar su rendimiento a partir del planteamiento de ciertas reglas de operación, D. Cheddie *et al.* [7]. En efecto, un primer paso lógico para entender su operación es definir su funcionamiento ideal. Una vez que se determine, las pérdidas que se presentan de comportamiento no-ideal se pueden calcular para describir la operación real.

Así, un modelo simple de las celdas de combustible puede ser desarrollado a partir de su voltaje ideal (o potencial termodinámico) considerando a su vez, ciertas pérdidas en él. Como resultado, se obtendrán modelos que solamente podrán ser usados para dar tendencias a la operación básica de las celdas de combustible. En efecto, conocer las tendencias provee de elementos para predecir, con cierto grado de incertidumbre, el desempeño de una celda de combustible.

Es importante mencionar que, los textos que presentan un análisis detallado sobre la complejidad de los fenómenos termodinámicos que tienen lugar en las celdas de combustible, son numerosos. Por tal razón, en el presente trabajo sólo se mostrará un enfoque simple y conciso con el único fin de introducir los elementos necesarios para desarrollar un modelo de celdas de combustible.

### 2.2.1. Planteamiento del modelo

Una celda de combustible convierte la energía almacenada dentro de su combustible en una forma más útil. Así, la energía total intrínseca que puede aportar un combustible (o de cualquier otra sustancia) es cuantificada por la propiedad de *energía interna*.

De la primera y segunda ley de la termodinámica, podemos establecer reglas (o potenciales termodinámicos) para especificar como la energía de un sistema es transferida de un estado a otro. Así, la variación de energía interna  $U$  estará dada por:

$$\Delta U = T \Delta S - \Delta W,$$

donde  $\Delta S$  es la variación de la entropía y  $\Delta W$  la variación del trabajo.

Considerando la variación de trabajo  $\Delta W$  como:

$$\Delta W = p \Delta V + \Delta W_{elec},$$

tenemos



$$\Delta U = T \Delta S - (p \Delta V + \Delta W_{elec}).$$

donde  $T$  y  $p$  denotan la temperatura y la presión, respectivamente. A su vez,  $\Delta V$  define la variación de volumen y  $\Delta W_{elec}$ , la variación de trabajo eléctrico, R. O'Hayre *et al.* [27].

Por lo tanto, definiendo la energía libre de Gibbs como:

$$G(T, p) = U - T S + p V,$$

obtenemos,

$$\Delta G = V \Delta p - S \Delta T - \Delta W_{elec}. \quad (2.1)$$

Suponiendo una temperatura y presión constantes  $\Delta T = \Delta p = 0$ , la ecuación (2.1) se reduce a

$$\Delta G = -\Delta W_{elec}.$$

A su vez, considerando que el trabajo eléctrico hecho al mover una carga  $Q$  con una diferencia de potencial eléctrico  $E$ , se obtiene

$$\Delta W_{elec} = E Q.$$

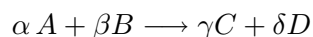
Por lo que, si la carga es transportada por electrones, es decir,

$$Q = n F,$$

donde  $n$  es el número de moles de electrones transportados y  $F$  denota la constante de Faraday, se obtiene la expresión para el cambio de la energía libre de Gibbs  $G$  en cantidades molares:

$$\Delta \bar{g} = -n F E. \quad (2.2)$$

Por otra parte, la energía libre de Gibbs de una reacción



está dada por la diferencia en el potencial químico  $\mu$  de las especies:

$$\Delta \bar{g} = \gamma \mu_C + \delta \mu_D - \alpha \mu_A - \beta \mu_B \quad (2.3)$$

donde el potencial químico se define como:

$$\mu_i = \left( \frac{\partial \bar{g}}{\partial n_i} \right)_{T, p, n_j} \quad \text{con } j \neq i$$

donde  $\mu_i$  es el potencial químico de las especies  $i$  en alguna fase (*e. g.* ánodo, cátodo o electrolito). La expresión  $(\partial \bar{g} / \partial n_i)_{T, p, n_j}$  expresa cuánto de la energía libre de Gibbs

del sistema cambia al incrementar infinitesimalmente la cantidad de especies; mientras la temperatura, presión, y las cantidades de todas las demás especies involucradas en el sistema se mantienen constantes, O'Hayre *et al.* [27].

A su vez, el potencial químico de cualquier sustancia se expresa como

$$\mu_i = \mu_i^0 + RT \ln a_i \quad (2.4)$$

donde  $\mu_i^0$  es el potencial químico de las especies  $i$  en las condiciones estándares de estado,  $a_i$  es la actividad de la especie  $i$  y  $R$  denota la constante universal de los gases ideales. La actividad de una especie depende de su naturaleza química, O'Hayre *et al.* [27]. Así, al sustituir los potenciales químicos estándares en (2.3) obtenemos una expresión para la energía libre estándar de la reacción. Es decir,

$$\Delta \bar{g}_0 = \gamma \mu_C^0 + \delta \mu_D^0 - \alpha \mu_A^0 - \beta \mu_B^0.$$

Sustituyendo el potencial químico para cada especie (2.4) en (2.3) y reformulando con cada uno de los reactantes y productos, obtenemos

$$\Delta \bar{g} = \Delta \bar{g}_0 + RT \ln \frac{a_C^\gamma a_D^\delta}{a_A^\alpha a_B^\beta}. \quad (2.5)$$

Para un proceso isotérmico con presión en equilibrio, la energía libre de Gibbs es cero. Por lo que,

$$\Delta \bar{g}_0 = -RT \ln \frac{a_C^\gamma a_D^\delta eq}{a_A^\alpha a_B^\beta eq} = -RT \ln K, \quad (2.6)$$

donde *eq* indica el valor de los términos de actividad en equilibrio, y  $K$  es la constante de equilibrio para la reacción.

Una vez que se determine  $\Delta \bar{g}_0$ , se puede calcular  $\Delta \bar{g}$  para cualquier composición de una mezcla de reacción. El valor de  $\Delta \bar{g}$  indica si ocurrirá una reacción o no. Si  $\Delta \bar{g}$  es positivo, una reacción no ocurrirá para la composición dada de reactivos y de productos. Si  $\Delta \bar{g}$  es negativo, una reacción ocurrirá.

Por lo tanto, al sustituir (2.2) en (2.5) obtenemos

$$E = E^0 - \frac{RT}{nF} \ln \frac{a_C^\gamma a_D^\delta}{a_A^\alpha a_B^\beta}, \quad (2.7)$$

la cual es la forma más común de la *ecuación de Nerst*. Su forma más general está dada por

$$E = E^0 - \frac{RT}{nF} \ln \frac{\prod a_{\text{productos}}^{v_i}}{\prod a_{\text{reactantes}}^{v_i}}, \quad (2.8)$$

donde  $E^0$  es el potencial en condiciones estándar (los potenciales se encuentran tabulados para diferentes reacciones químicas de reducción).

### 2.2.2. Rendimiento de las celdas de combustible

El rendimiento de una celda de combustible depende de la cantidad de potencial eléctrico que puede ser extraída de ella, O'Hayre *et al.* [27]. Producir más potencial, se traduce en más densidad de corriente y en un aumento en las pérdidas que se generan en la celda. Por lo que, entre más potencial eléctrico (o densidad corriente) sea extraído, más baja será su eficiencia.

Es importante tener en cuenta que el potencial de la celda de combustible predicho por la ecuación de Nernst corresponde a un estado de equilibrio (o circuito abierto). Su potencial real, bajo condiciones de funcionamiento, es siempre menor. En consecuencia, sus pérdidas irreversibles en el potencial ideal (o termodinámico) durante la operación de la celda se manifiestan como caídas de voltaje. Éstas son frecuentemente denominadas como sobrepotenciales o sobrevoltajes (overpotentials) y pueden resumirse en:

- **Pérdidas por activación:** Las pérdidas de activación son causadas por la lenta cinética del electrodo. En la práctica, las pérdidas de la activación son el resultado de los pasos electroquímicos superficiales complejos de una reacción, cada uno de los cuales tiene su propia velocidad de reacción y energía de activación. Generalmente, los parámetros de la velocidad de reacción y los de la energía de activación controlan la caída de voltaje causado por las pérdidas de activación en un electrodo particular bajo condiciones específicas. Sin embargo, en el caso de reacciones electroquímicas con  $\eta_{act}$  entre 50 – 100mV, es posible aproximar la caída de voltaje debido a la polarización de la activación por una ecuación semiempírica, llamada la ecuación de Tafel:

$$\eta_{act} = -\frac{RT}{\alpha n F} \ln j_0 + \frac{RT}{\alpha n F} \ln j, \quad (2.9)$$

donde  $\alpha$  representa el coeficiente de transferencia de electrones de la reacción en el electrodo que es tratado, y  $j_0$  denota la densidad de corriente de intercambio, W. Vielstich *et al.* [33]. En caso contrario, para  $\eta_{act} \gg 15$  mV (pérdidas por activación relativamente pequeñas), se puede aproximar con:

$$\eta_{act} = \frac{RT}{n F j_0} j. \quad (2.10)$$

Esta expresión corresponde a una simplificación de la ecuación de Butler-Volmer usando una expansión en series de Taylor, O'Hayre *et al.* [27].

- **Pérdidas óhmicas:** Las pérdidas óhmicas son causadas por resistencia iónica en el electrolito y en los electrodos (o en la resistencia electrónica en los electrodos) en los recolectores de corriente colectores y las resistencias del contacto. Las pérdidas óhmicas son proporcionales a la densidad corriente, dependen de la selección de los materiales y geometría del módulo (o stack). Es decir,

$$\eta_{ohm} = j (ASR_{ohm}) \quad (2.11)$$

donde  $ASR_{ohm}$  es la resistencia por área normalizada y está dada por:

$$ASR_{ohm} = \frac{L}{\sigma} \quad (2.12)$$

donde  $L$  es la longitud del electrodo y  $\sigma$  denota su conductividad eléctrica, O'Hayre *et al.* [27].

- **Pérdidas relacionadas al transporte de masa:** Las pérdidas debidas al transporte de masa se derivan del cambio en la concentración de los reactivos en la superficie de los electrodos mientras son consumidos por la reacción electroquímica. Mientras éstos son consumidos, a menudo disueltos por los productos producidos, se forma un gradiente de concentración que conduce el proceso total del transporte de masa. Por consiguiente, a densidades de corriente altas, la tasa de la consumo de la reacción llega a ser igual a la cantidad de reactivos que pueden ser provistos por difusión. A este proceso se le denomina *densidad de corriente limitadora*.

Para celdas de combustible con una fase gaseosa, se puede mostrar que la caída de voltaje por una densidad de corriente  $j$  debida a un sobrepotencial de concentración está dado por:

$$\eta_{conc} = \frac{RT}{nF} \left( 1 + \frac{1}{\alpha} \right) \ln \left( \frac{j_L}{j_L - j} \right) \quad (2.13)$$

donde  $j_L$  denota a la densidad de corriente limitadora,  $R$  y  $F$  son la constante universal de los gases ideales y la constante de Faraday, respectivamente, J. Larminie *et al.* [22].

### Efecto acumulativo de las pérdidas

El efecto combinado de las pérdidas para una celda de combustible dada, así como sus condiciones de funcionamiento, se puede expresar como polarizaciones, O'Hayre *et al.* [27]. Por lo tanto, bajo las condiciones en donde existen todas estas formas de pérdidas, el potencial eléctrico real  $V_{celda}$  de la celda está dado por

$$V_{celda} = E - \eta_{act_a} - \eta_{act_c} - \eta_{ohm} - \eta_{conca} - \eta_{concc} \quad (2.14)$$

donde  $\eta_{act_a}$  y  $\eta_{conca}$  representan las pérdidas debidas a activación y concentración, respectivamente, para ánodo. Análogamente,  $\eta_{act_c}$  y  $\eta_{concc}$  denotan el mismo tipo de pérdidas para el cátodo. La pérdida debida a la resistencia del electrolito y electrodos es  $\eta_{ohm}$ .

### Curva de polarización

El funcionamiento de una celda de combustible se resume lo mejor posible por su respuesta de corriente-voltaje (curva  $j - V$ , o curva de polarización). Ésta muestra la salida de voltaje que la celda puede proveer en una carga de densidad de corriente. Por lo que, al reducir las pérdidas (de activación, óhmicas y de transporte) se obtendrá un gran voltaje de salida para una carga de corriente.

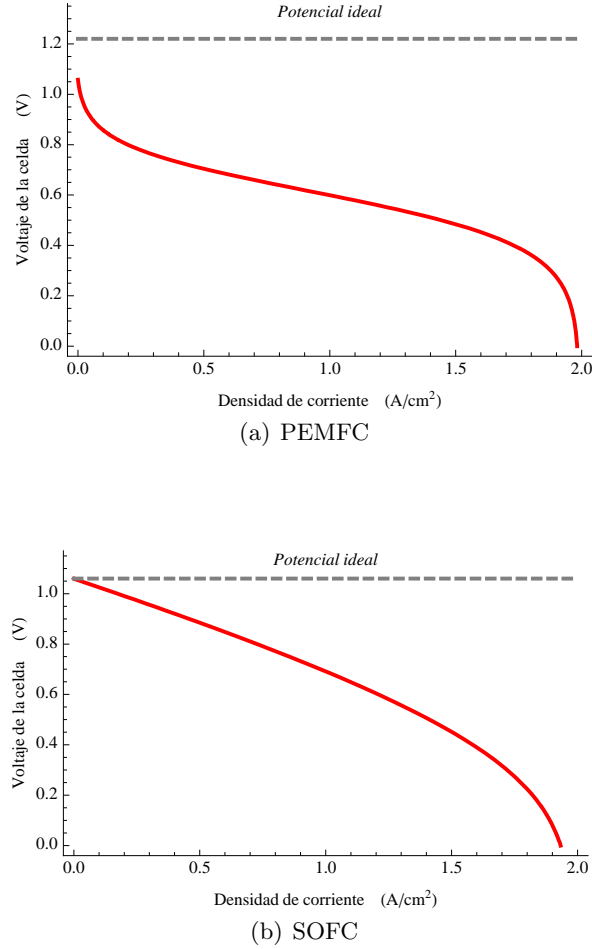
En efecto, la curva de polarización es la característica más importante de una celda de combustible. Su medición adquiere relevancia para el diagnóstico de un funcionamiento apropiado, así como para controlar su desempeño total. La figura (2.1) muestra las curvas de polarización típicas (o curvas  $j - V$ ) usando los valores de la tabla 2.1 para una celda de combustible con una membrana de intercambio de protones (PEMFC) y para una celda de combustible con núcleo sólido (SOFC).

**Tabla 2.1.** Resumen de los parámetros típicos para PEMFC de baja temperatura contra SOFC de alta temperatura.

	Valores típicos para una PEMFC	Valores típicos para una SOFC
Temperatura	350 °K	1000 °K
E	1.22 V	1.06
$j_0$ (H <sub>2</sub> )	0.10 A/cm <sup>2</sup>	10 A/cm <sup>2</sup>
$j_0$ (O <sub>2</sub> )	0.00010 A/cm <sup>2</sup>	0.10 A/cm <sup>2</sup>
$\alpha$ (H <sub>2</sub> )	0.50	0.50
$\alpha$ (O <sub>2</sub> )	0.30	0.30
ARS <sub>ohm</sub>	0.01 Ω	0.04 Ω
$j_L$	2 A/cm <sup>2</sup>	2 A/cm <sup>2</sup>

### Curva de Potencia

Como se ha mencionado anteriormente, la curva de polarización es la herramienta más eficaz para el diagnóstico del funcionamiento de una celda de combustible. Sin embargo, otro tipo de información sobre ella también puede estar disponible con solo reajustar los datos de corriente y voltaje. Por ejemplo:

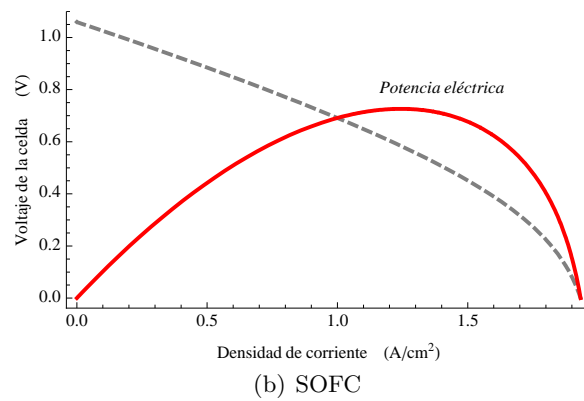
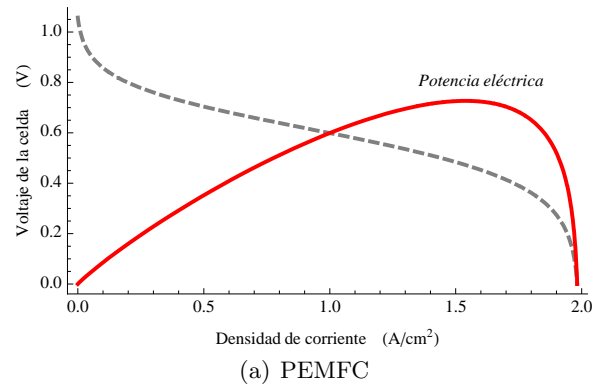


**Fig. 2.1.** Comparativa de los modelos simples para una PEMFC típica contra una SOFC típica. Como se observa de la forma de la curva, una PEMFC sufre de grandes pérdidas por activación  $\eta_{act}$ ; mientras el rendimiento de una SOFC está dominado por pérdidas ohmicas y de concentración,  $\eta_{ohm}$   $\eta_{conc}$ . Los parámetros para generar estos resultado se resumen en la Tabla 2.1.

- **Densidad de potencia eléctrica.** La densidad de potencia eléctrica se define como la cantidad de trabajo realizado por una corriente eléctrica. Es decir,

$$P = V j,$$

donde  $P$ ,  $V$  y  $j$  denotan la potencia eléctrica, la diferencia de potencial y la densidad de corriente, respectivamente. La figura (2.2) muestra las curvas de polarización junto con las curvas de densidad de potencia eléctrica para los datos de la tabla (2.1).



**Fig. 2.2.** Comparativa de las curvas de potencia eléctrica contra las curvas de polarización una PEMFC y una SOFC típicas.

### 2.3. Modelo 1-D de celdas de combustible

Habiendo discutido el modelo más simple de celdas de combustible, ahora introducimos modelos más sofisticados. Éstos están basados en el concepto de *balance de flujos*.

Un balance de flujos nos permite mantener un registro de todas las especies que fluyen dentro, a través, o fuera de una celda de combustible y con ello, plantear un modelo exacto. La Figura 2.3 ilustra los flujos de especies químicas involucradas en una celda de combustible SOFC para desarrollar el modelo 1-D.

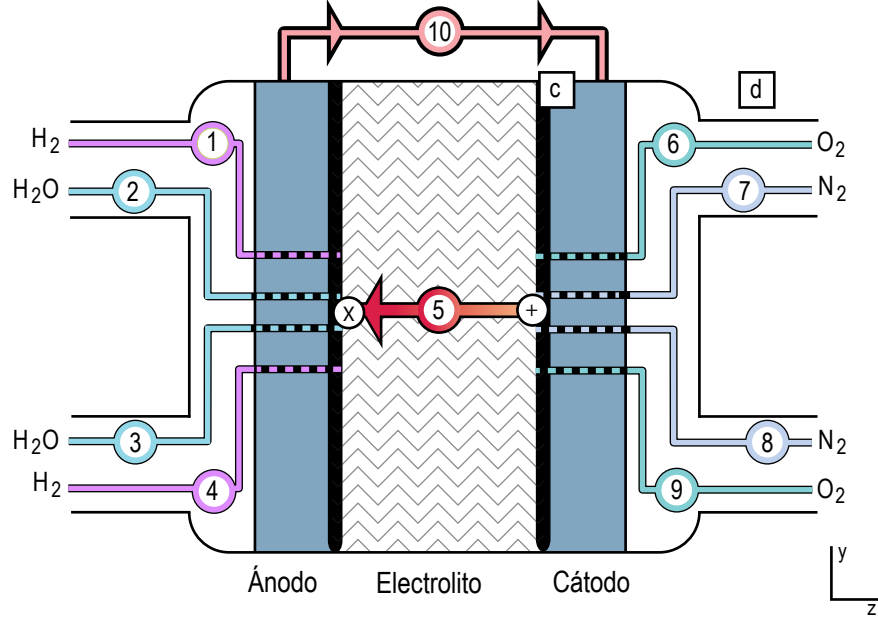


Fig. 2.3. Detalle de los flujos dentro de una celda de combustible SOFC.

En las celdas de combustible, todos los flujos pueden ser relacionados en un sólo flujo característico, la densidad de corriente, o el flujo de carga<sup>1</sup>. Así, examinando cada uno de los flujos mostrados en la figura 2.3, podemos inferir que:

$$\text{Flujo } 10 = \text{Flujo } 5 = \text{Flujo } 1 - \text{Flujo } 4 = \text{Flujo } 6 - \text{Flujo } 9,$$

o bien,

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{La densidad} \\ \text{de} \\ \text{corriente} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \text{El flujo molar} \\ \text{de aniones } \text{O}^{2-} \\ \text{en el electrolito} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \text{El flujo molar} \\ \text{de moléculas} \\ \text{de } \text{H}_2 \text{ en la} \\ \text{capa difusora} \\ \text{del ánodo} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \text{El flujo molar} \\ \text{de moléculas} \\ \text{de } \text{O}_2 \text{ en la} \\ \text{capa difusora} \\ \text{del cátodo} \end{array} \right\}.$$

En otras palabras, la densidad de corriente producida por la celda debe ser igual al flujo de aniones  $\text{O}^{2-}$  a través del electrolito, los cuales deben ser igual al flujo de hidrogeno dentro de la capa catalizadora del ánodo, quien debe ser igual al flujo de oxígeno

<sup>1</sup> Éste mide la cantidad de carga que fluye a través de un material por unidad de tiempo.



dentro de la capa catalizadora del cátodo.

Suponiendo que el flujo molar para cierta especie química está dado por

$$J_{s_i} = \frac{j}{z_i F}, \quad (2.15)$$

donde  $j$  and  $J$  denotan respectivamente el flujo de carga y la densidad de corriente,  $z_i$  es el número de carga (*e. g.*  $z_i$  es  $+1$  para  $\text{Na}^+$ ,  $-2$  para  $\text{O}^{2-}$ , etc) y  $F$  representa la constante de Faraday, O'Hayre *et al.* [27], obtenemos:

$$J_{\text{O}^{2-}} = J_{\text{H}_2}^A = 2 J_{\text{O}_2}^C = \frac{j}{2F}.$$

Observamos que para un balance de flujo correcto se debe incluir la generación de agua en el ánodo (Flux 2 + Flux 3), electrolito y cátodo. Es decir,

$$J_{\text{H}_2\text{O}}^A + \frac{j}{2F} = J_{\text{H}_2\text{O}}^C = J_{\text{H}_2\text{O}}^M.$$

Ante ello, observamos que no existen Flujos de  $\text{H}_2\text{O}$  en la fase del electrolito y cátodo (ver figura 2.3). Por lo que,

$$J_{\text{H}_2\text{O}}^A + \frac{j}{2F} = 0.$$

Finalmente, podemos concluir que

$$\frac{j}{2F} = J_{\text{O}^{2-}} = J_{\text{H}_2}^A = 2 J_{\text{O}_2}^C = -J_{\text{H}_2\text{O}}^A \quad (2.16)$$

es la ecuación de balance de flujos para una celda de combustible SOFC.

Una vez obtenida la relación (2.16), podemos establecer la ecuaciones gobernantes (o ecuaciones que describen como las especies se mueven e interaccionan dentro de la celda) para el ánodo, la membrana y el cátodo de nuestros modelos de celda de combustible.

### 2.3.1. Simplificación del modelo

Para capturar toda la fenomenología del problema, es necesario plantear ecuaciones para describir la interacción de cada uno de los elementos listados en la tabla (2.2). Sin embargo, al modelar cada uno de los diversos fenómenos para todas las especies y en todos los dominios de la celda de combustible resulta en modelo extremadamente complicado de resolver de forma analítica. Por ello, habitualmente se recurre al planteamiento de ciertos supuestos para reducir su complejidad.

Al hacer las siguientes suposiciones,

**Tabla 2.2.** Descripción completa de las especies químicas interactuando en una celda de combustible SOFC

Dominio	Convección	Difusión	Conducción	Reacción electroquímica
<i>Ánodo</i>				
Canales de flujo	H <sub>2</sub> , H <sub>2</sub> O	H <sub>2</sub> , H <sub>2</sub> O	e <sup>-</sup>	—
Electrodo	H <sub>2</sub> , H <sub>2</sub> O	H <sub>2</sub> , H <sub>2</sub> O	e <sup>-</sup> , O <sup>2-</sup>	H <sub>2</sub> + O <sup>2-</sup> → H <sub>2</sub> O + 2e <sup>-</sup>
Catalizador	H <sub>2</sub> , H <sub>2</sub> O	H <sub>2</sub> , H <sub>2</sub> O	e <sup>-</sup> , O <sup>2-</sup>	H <sub>2</sub> + O <sup>2-</sup> → H <sub>2</sub> O + 2e <sup>-</sup>
<i>Electrolito</i>				
	—	—	O <sup>2-</sup>	—
<i>Cátodo</i>				
Catalizador	N <sub>2</sub> , H <sub>2</sub>	N <sub>2</sub> , H <sub>2</sub>	e <sup>-</sup> , O <sup>2-</sup>	$\frac{1}{2}$ O <sub>2</sub> + 2e <sup>-</sup> → O <sup>2-</sup>
Electrodo	N <sub>2</sub> , H <sub>2</sub>	N <sub>2</sub> , H <sub>2</sub>	e <sup>-</sup> , O <sup>2-</sup>	$\frac{1}{2}$ O <sub>2</sub> + 2e <sup>-</sup> → O <sup>2-</sup>
Canales de flujo	N <sub>2</sub> , H <sub>2</sub>	N <sub>2</sub> , H <sub>2</sub>	e <sup>-</sup>	—

- ignorar el transporte por convección (debido a que el modelo es unidimensional, se puede ignorar el transporte por convección ya que éste se da mayormente a lo largo del eje Y),
  - no considerar la difusión en los canales de flujo (en éstos, la difusión es menos dominante que la convección y dado que se ignora convección, no se considerará la difusión en todos las fases, salvo en los electrodos),
  - las pérdidas por resistencia óhmica provienen de la membrana del electrolito,
  - ignorar la cinética de las reacciones químicas en el ánodo (las pérdidas de activación en el ánodo son despreciables en comparación con las del cátodo),
  - considerar que la capas del catalizador son extremadamente delgadas (con ello ignoramos todos los procesos de convección, difusión y conducción en ellas y nos enfocamos sólo en la cinética de la reacción),
  - y considerar que el agua existe sólo en estado gaseoso,
- delimitamos el problema a solamente los elementos de tabla (2.3).

### 2.3.2. Las ecuaciones gobernantes

#### Electrodo

Como se ha establecido en la sección anterior, el transporte de las especies H<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, N<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>O está dado por un proceso difusivo. De la primera ley de Fick para una difusión binaria, tenemos que la tasa de difusión está relacionada proporcionalmente a un gradiente de su respectivas concentraciones; es decir:

**Tabla 2.3.** Descripción simplificada de las especies químicas interactuando en una celda de combustible SOFC

Dominio	Convección	Difusión	Conducción	Reacción electroquímica
<i>Ánodo</i>				
Canales de flujo	—	—	—	—
Electrodo	—	H <sub>2</sub> , H <sub>2</sub> O	—	—
Catalizador	—	—	—	H <sub>2</sub> + O <sup>2-</sup> → H <sub>2</sub> O + 2e <sup>-</sup>
<i>Electrolito</i>				
	—	—	O <sup>2-</sup>	—
<i>Cátodo</i>				
Catalizador	—	—	—	$\frac{1}{2}$ O <sub>2</sub> + 2e <sup>-</sup> → O <sup>2-</sup>
Electrodo	—	N <sub>2</sub> , H <sub>2</sub>	—	—
Canales de flujo	—	—	—	—

$$J_i = -D_{ij}^{eff} \frac{\partial c_i}{\partial z}. \quad (2.17)$$

Por otro lado, podemos relacionar una fracción de mol de una especie  $i$  en estado gaseoso y su presión total, haciendo:

$$p_i = p x_i,$$

donde  $x_i$  denota la fracción de moles de la especie  $i$  y  $p$  representa la presión total del gas en el electrodo, O'Hayre *et al.* [27].

Por tanto, aplicando la ley de los gases ideales ( $p_i = c_i RT$ ), obtenemos la siguiente expresión:

$$\frac{p}{RT} \frac{\partial x_i}{\partial z} = \frac{\partial c_i}{\partial z}.$$

Así, haciendo las sustituciones pertinentes, tenemos:

$$J_i = \frac{-p D_{ij}^{eff}}{RT} \frac{\partial x_i}{\partial z}. \quad (2.18)$$

### Electrolito

De la figura (2.3), el único flujo a través del electrolito es el de aniones de O<sub>2</sub>. Por lo tanto, directamente de 2.11 y 2.12 obtenemos:

$$\eta_{ohm} = j (ASR_{ohm}) = j \left( \frac{L}{\sigma} \right) \quad \text{con} \quad \sigma = \frac{A e^{-\frac{\Delta G_{act}}{RT}}}{T}, \quad (2.19)$$

donde  $A$  denota la constante electrolítica y  $\Delta G_{act}$  es la energía de activación. Ambas obtenidas experimentalmente.

### Catalizador

Como se ha establecido anteriormente, hemos considerado solamente la cinética de la reacción en el cátodo de la celda de combustible. En consecuencia, el factor dominante está determinado por el “sobrevoltaje” catódico. Por consiguiente, éste puede ser descrito directamente por la expresión simplificada de la ecuación de Butler-Volmer, O’Hayre *et al.* [27]. Es decir,

$$\eta_{actc} = \frac{R T}{n \alpha F} \ln \frac{j C_R^{0*}}{j_0^0 C_R^*},$$

donde  $C_R^{0*}$  y  $C_R^*$  denotan la concentración de referencia (o estándar) del reactante en la superficie de la reacción y concentración del reactante, respectivamente.  $j_0^0$  es la densidad de corriente de intercambio con base en una concentración de referencia. El coeficiente de transferencia de carga se representa con  $\alpha$ .

Por lo que suponiendo para un gas ideal ( $p = c R T$ ), tenemos que la cinética de la reacción en el cátodo está descrita por

$$\eta_{actc} = \frac{R T}{4 \alpha F} \ln \frac{j}{j_0 P^c X_{O_2}}, \quad (2.20)$$

donde  $P^c$  es la presión total del cátodo y  $X_{O_2}$  es la fracción de moles de oxígeno en la capa del catalizador del cátodo.

### Solución del modelo 1D de celda de combustible SOFC

Habiendo establecido las ecuaciones gobernantes para el modelo unidimensional de una celda de combustible SOFC, podemos obtener la curva de polarización ( $j - V$ ). Para ello, de la ecuación (2.18) podemos describir el transporte de  $O_2$  en el cátodo como:

$$J_{O_2}^C = \frac{-p^c D_{O_2 N_2}^{eff}}{R T} \frac{\partial X_{O_2}}{\partial z} \quad \text{con} \quad X_{O_2}(0) = X_{O_2}|_d, \quad (2.21)$$

donde  $X_{O_2}|_d$  denota la fracción de moles de oxígeno en la capa del catalizador (ver figura 2.3). Por tanto, el perfil de concentración de  $O_2$  en el cátodo es:

$$X_{O_2}|_c = X_{O_2}|_d - L^c \frac{j R T}{4 F P^c D_{O_2 N_2}^{eff}}, \quad (2.22)$$

donde  $L^c$  representa el grosor del cátodo. En consecuencia, el “sobrevoltaje” catódico (ecuación 2.20) queda determinado por:

$$\eta_{actc} = \frac{RT}{4\alpha F} \ln \frac{j}{j_0 P^c \left( X_{O_2}|_d - L^c \frac{jRT}{4FP^c D_{O_2N_2}^{eff}} \right)} \quad (2.23)$$

Finalmente, podemos obtener el voltaje de la celda de combustible como:

$$\begin{aligned} V &= E - \eta_{ohm} - \eta_{actc} \\ &= E - j \left( \frac{L^M T}{A e^{-\frac{\Delta G_{act}}{RT}}} \right) - \frac{RT}{4\alpha F} \ln \frac{j}{j_0 P^c \left( X_{O_2}|_d - L^c \frac{jRT}{4FP^c D_{O_2N_2}^{eff}} \right)}, \end{aligned}$$

donde  $E$  es el voltaje precalculado teóricamente para la celda. Usando valores para cada parámetro de la tabla 2.4, obtenemos la curva de polarización (curva  $(j - V)$ ) que determina el modelo propuesto, Figura (2.4).

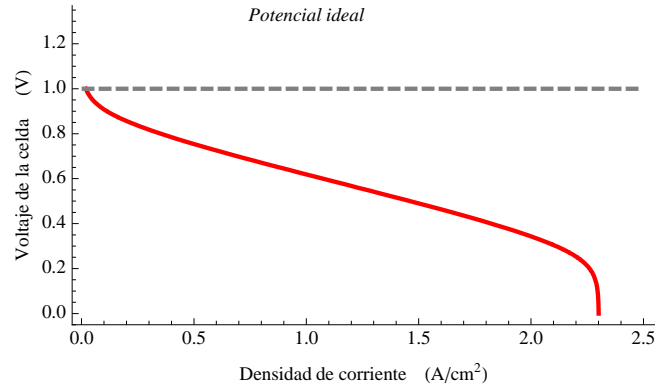
**Tabla 2.4.** Resumen de los parámetros para SOFC de alta temperatura.

<i>Propiedades Físicas</i>		Valores para una SOFC
Temperatura,	$T$	1073 °K
Voltaje termodinámico,	$E$	1 V
Fracción de moles de oxígeno de entrada,	$X_{O_2} _d$	0.21
Presión en el cátodo,	$P^C$	1 atm
Difusividad efectiva del oxígeno,	$D_{O_2N_2}^{eff}$	$2 \times 10^{-5} m^2/s$
Coefficiente de transferencia,	$\alpha$	0.5
Densidad de corriente de intercambio,	$j_0$	$0.1 A/cm^2$
Constante electrolítica,	$A$	$9 \times 10^7 K/\Omega \cdot m$
Energía de activación electrolítica,	$\Delta G_{act}$	100 kJ/mol
Grosor del electrolito,	$L^M$	20 $\mu m$
Grosor del cátodo,	$L^c$	800 $\mu m$

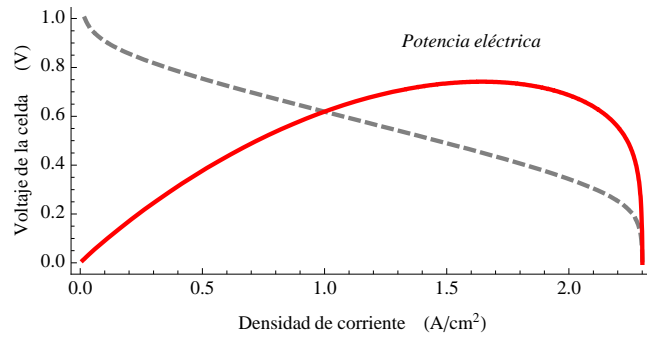
## 2.4. Modelos D. C. F. de celdas de combustible

Debido a su extensa flexibilidad de cómputo, los métodos de Dinámica Computacional de Fluidos (D. C. F.) son altamente usados. Éstos se basan en un sistema extenso de ecuaciones que gobiernan los fenómenos dentro de las celdas de combustible lo que les proporciona un mayor realismo a la hora de comparar sus resultados contra de los obtenidos por otros métodos.

Al igual que los modelos 1D, los modelos que utilizan métodos D. C. F. (o modelos D. C. F.) se basan en leyes de conservación representadas por las ecuaciones:



(a) Curva de polarización



(b) Curva de potencia

**Fig. 2.4.** Curvas características del modelo 1D para los valores de la tabla 2.4.

1. *Conservación de Masa.* Las ecuaciones de conservación de masa (o ecuaciones de continuidad) requieren simplemente que el cambio de la masa en una unidad del volumen sea igual a la suma de toda las especies que entran (salen) de un volumen de control en un período dado.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\epsilon \rho) + \nabla \cdot (\epsilon \rho \mathbf{U}) = 0$$

tasa de cambio de masa por unidad de volumen      +      tasa neta de cambio de masa por unidad de volumen por convección

donde  $\rho$  y  $\mathbf{U}$  denotan respectivamente la densidad y el vector velocidad del fluido. Cabe notar que en esta ecuación se considera la porosidad  $\epsilon$  de los dominios tales como los electrodos y catalizador.

2. *Conservación de Momemtum.* Similar a la conservación de masa, la ecuación para la conservación de *Momemtum* se escribe como:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\epsilon \rho \mathbf{U}) + \nabla \cdot (\epsilon \rho \mathbf{U}\mathbf{U}) = -\epsilon \nabla p + \nabla \cdot (\epsilon \zeta) + \frac{\epsilon^2 \mu \mathbf{U}}{\kappa}$$

tasa de cambio de momento por unidad de volumen      convección      presión      tasa neta de cambio de momento por unidad de volumen por:      viscosidad de fricción      estructura poroso

donde  $\zeta$  y  $\mu$  denotan respectivamente el tensor tensión y la viscosidad del fluido. El término del lado derecho de la ecuación se le conoce en la literatura como la *Ley de Darcy*, la cual cuantifica la pérdida de viscosidad del fluido en un medio poroso. Del segundo término al último del lado derecho de la ecuación representa sólo la interacción del fluido con él mismo (fluido-fluido). La permeabilidad  $\kappa$  mide la fuerza de esta interacción dependiendo de la configuración de la estructura porosa.

3. *Conservación de Especies.*

$$\frac{\partial}{\partial t} (\epsilon \rho X_i) + \nabla \cdot (\epsilon \rho \mathbf{U} X_i) = \nabla \cdot \mathbf{J}_i + S_i$$

tasa de cambio de la masa de las especies por unidad de volumen      convección      difusión      tasa neta de cambio de la masa de las especies por unidad de volumen por:      reacción

Donde la fracción de masa de la especie  $i$  se denota por  $X_i$  y  $J_i$  representa el flujo de masa de la especie  $i$  por difusión. Éste flujo puede ser representado por cualquier ecuación de difusión, *Ley de Fick* o la *ecuación de Maxwell—Stefan*. La fuente (o sumidero) de la especie es  $S_i$ . En las celdas de combustible, la reacción electroquímica actúa como fuentes o sumideros de especies químicas (*e. g.* consumo de hidrógeno y oxígeno o producción de agua):

$$S_i = M_i \frac{j}{n_j F}$$

$n_i$  es el número de valencia de electrones asociados a la especie  $i$ .  $M_i$  es el peso molecular de la especie  $i$ , éste es usado para convertir la tasa del flujo molecular a una tasa del flujo de masa.

4. *Conservación de Carga.* De la continuidad de corriente en un material conductor,

$$\nabla \cdot \mathbf{i} = 0$$

donde  $i$  denota el flujo de corriente como vector. En las celdas de combustible existen dos tipos de cargas: electrones e iones. Dado que ambos tipos son generados de especies eléctricamente neutras, la totalidad de la neutralidad de la carga debe ser conservada:

$$\nabla \cdot \mathbf{i}_{elec} + \nabla \cdot \mathbf{i}_{ion} = 0$$

donde  $\mathbf{i}_{ion}$  es la corriente de iones a través de una fase conductora de iones (*e.g.* capa catalizadora o la membrana – PEM) y  $\mathbf{i}_{elec}$  es la corriente electrónica en una fase de intercambio de electrones. Reordenando términos, tenemos:

$$-\nabla \cdot \mathbf{i}_{ion} = \nabla \cdot \mathbf{i}_{elec} = j.$$

Considerando la *Ley de Ohm*, obtenemos

$$\nabla \cdot (\sigma_{ion} \nabla \Phi_{ion}) = -\nabla \cdot (\sigma_{elec} \nabla \Phi_{elec}) = j$$

donde los potenciales electrónicos y eléctricos se denotan por  $\Phi_{ion}$  y  $\Phi_{elec}$ , respectivamente.  $\sigma$  es la conductividad.

Para cerrar las ecuaciones básicas, expuestas en los puntos anteriores (1 – 4), es necesario imponer condiciones de frontera, así como condiciones iniciales. Ambas dependerán del problema y de una geometría particular.



# Conducción de calor en una celda de combustible

---

## 3.1. Introducción

La temperatura en las celdas de combustible no siempre es uniforme. Aún con un flujo contante de masa a través de los canales, ésta se ve afectada como resultado de la convección del aire, por el agua que llega a condensarse o por el mismo calor generado en la capa de catálisis. Con el fin de predecir con precisión los parámetros dependientes de la temperatura y las tasas de velocidad de la reacción, así como la del transporte de especies químicas, se debe considerar la distribución del calor a través de toda la celda.

En efecto, un balance energético total alrededor de la celda de combustible se basa en la energía producida y por la pérdida de calor que ocurre en ella misma, Barbir, F. [2]. Por lo que, un primer modelo deberá incorporar la *transferencia de calor por convección* entre el material sólido y un flujo gaseoso y *transferencia de calor por conducción* en las estructuras sólidas al igual que las porosas. Así mismo, se debe considerar también la producción de calor por la electricidad generada en la reacción química, Spiegel, C. [31].

Es pertinente mencionar que en este trabajo se abordará el problema de transferencia de calor que se origina por la necesidad de un manejo adecuado del calor generado en las celdas de combustible con una membrana de intercambio de protones (PEMFC, Proton Exchange Membrane Fuel Cell). Por tal razón, el presente capítulo contendrá primeramente el planteamiento de la fenomenología propia de la conducción del calor en un cuerpo para luego dar paso al planteamiento del problema de determinación de perfiles interiores de temperatura en una celda de combustible.

### 3.2. Transferencia de calor

La transferencia de calor se define como el paso de energía térmica desde un cuerpo de mayor temperatura a otro de menor temperatura. Cuando un cuerpo, por ejemplo, un objeto sólido o un fluido, está a una temperatura diferente de la de su entorno u otro cuerpo, la transferencia de energía térmica, también conocida como transferencia de calor o intercambio de calor, ocurre de tal manera que el cuerpo y su entorno alcancen equilibrio térmico. La transferencia de calor siempre ocurre desde un cuerpo más caliente a uno más frío, como resultado de la *ley cero de la termodinámica*. Cuando existe una diferencia de temperatura entre dos objetos en proximidad uno del otro, la transferencia de calor no puede ser detenida; solo puede hacerse más lenta.

La transferencia de calor clásica ocurre solamente a través de los procesos de *conducción*, *convección*, *radiación* o cualquier combinación de ellos.

#### 3.2.1. Conducción del calor en un cuerpo

El proceso de conducción térmica se define como la transferencia de energía de las partículas con mayor energía hacia la de menor a partir de la interacción entre ellas. Éste se basa en la siguiente ley física:

##### Teorema 3.1 (Ley de Fourier).

Sea  $S$  una superficie suave en el interior de un cuerpo  $\Omega$  y sea  $\mathbf{n}$  el vector normal en  $S$ . La cantidad de calor (energía térmica)  $q$  que cruza  $S$  en dirección de la normal  $\mathbf{n}$  en el intervalo de tiempo de  $t_1$  a  $t_2$  está dada por:

$$q = - \int_{t_1}^{t_2} \iint_S k(x, y, z) \frac{\partial u}{\partial n} d\sigma dt,$$

donde  $k(x, y, z)$  denota la conductividad calorífica de un cuerpo en el punto  $(x, y, z)$  y  $d\sigma$  es el elemento de superficie.

#### Ecuación de la conducción térmica

Consideremos una subregión  $\Omega \subseteq A$  acotada por una superficie  $S$  suave cerrada sin frontera con vector normal  $\mathbf{n}$ , ver figura (3.2.1). El cambio en la cantidad de calor en la subregión  $A$  de  $t = t_1$  a  $t = t_2$  está dado por:

$$\iiint_A c(x, y, z) \rho(x, y, z) \left( u(x, y, z, t_2) - u(x, y, z, t_1) \right) dx dy dz \quad (3.1)$$

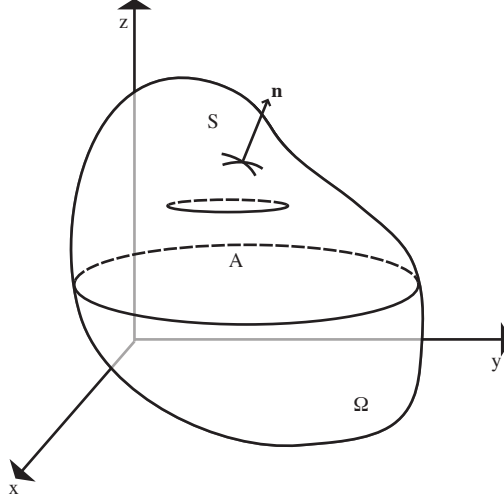


Fig. 3.1.

donde  $c(x, y, z)$  es el calor específico y  $\rho(x, y, z)$  denota la densidad del cuerpo. Por la ley de la conservación de la energía térmica, el cambio de calor en  $A$  debe ser igual a la cantidad de calor entrante a  $A$  a través de la frontera  $S$  en un intervalo de tiempo de  $t_1$  a  $t_2$ . Es decir,

$$\int_{t_1}^{t_2} \iint_S k(x, y, z) \frac{\partial u}{\partial n} d\sigma dt. \quad (3.2)$$

Igualando 3.1 y 3.2, obtenemos

$$\iiint_A c(x, y, z) \rho(x, y, z) (u(x, y, z, t_2) - u(x, y, z, t_1)) dx dy dz = \int_{t_1}^{t_2} \iint_S k(x, y, z) \frac{\partial u}{\partial n} d\sigma dt. \quad (3.3)$$

Ahora,

$$u(x, y, z, t_2) - u(x, y, z, t_1) = \int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial u}{\partial t}(x, y, z) dt.$$

Notamos que  $\partial u / \partial n = \nabla u \cdot \mathbf{n}$ . Por lo que aplicando el *teorema de la divergencia* al campo vectorial  $\mathbf{V} = k \nabla u$ , obtenemos

$$\iint_S k(x, y, z) \frac{\partial u}{\partial n} d\sigma = \iiint_A \nabla \cdot (k \nabla u) dx dy dz.$$

Por tanto, reescribiendo 3.3 tenemos

$$\int_{t_1}^{t_2} \iiint_A c\rho \frac{\partial u}{\partial t} dx dy dz dt = \int_{t_1}^{t_2} \iiint_A \nabla \cdot (k\nabla u) dx dy dz dt$$

o bien,

$$\int_{t_1}^{t_2} \iiint_A c\rho \frac{\partial u}{\partial t} - \nabla \cdot (k\nabla u) dx dy dz dt = 0. \quad (3.4)$$

Dado que el integrando de 3.4 es continuo y es válido para cualquier subregión  $A$  e intervalos  $(t_1, t_2)$ , se tiene

$$c\rho \frac{\partial u}{\partial t} - \nabla \cdot (k\nabla u) = 0. \quad (3.5)$$

A la ecuación 3.5 se le conoce como la *ecuación de la conducción térmica, ecuación del calor o ecuación de difusión* en un cuerpo isotrópico. Si este cuerpo también se considera homogéneo entonces la conductividad térmica  $k$ , la densidad del cuerpo  $\rho$  y el calor específico  $c$ , son constantes y la ecuación anterior se reduce a

$$c\rho \frac{\partial u}{\partial t} - k\nabla^2 u = 0. \quad (3.6)$$

### 3.2.2. El problema de la conducción del calor bien condicionado

Un problema de la conducción del calor bien condicionado es aquel en el que se tiene toda la información necesaria para obtener una solución única, Hadamard, J. [16].

**Definición 3.1.** *En el sentido de Hadamard, un problema es bien condicionado si cumple las siguientes condiciones:*

1. *Existencia:* Para cualquier conjunto de datos, existe una solución del problema
2. *Unicidad:* Para cualquier conjunto de datos, la solución es única.
3. *Estabilidad:* La solución depende continuamente de los datos en una topología razonable.

Así, un problema de conducción de calor bien condicionado (en el sentido de Hadamard) y por tanto soluble, se entenderá siempre como:

Encontrar  $u(x, y, z, t)$  tal que:

1.

$$c\rho \frac{\partial u}{\partial t} - \nabla \cdot (k\nabla u) = 0$$

para  $0 < t < \tau$  (donde  $\tau \rightarrow \infty$ ) y  $(x, y, z)$  pertenece a alguna región  $\Omega \subseteq \mathbb{R}^3$ .

2.  $u = u_i(x, y, z)$  en  $t = 0$ .

Esta condición se el conoce como *condición inicial*. Sin embargo, ésta no es necesaria si se estudia el caso estacionario:

$$\nabla \cdot (k\nabla u) = 0.$$

3.  $u$  debe satisfacer *condiciones de frontera*, las cuales a menudo son de tres tipos.

a) *Condiciones de frontera tipo Dirichlet* o condiciones de frontera de *primer tipo*:

$$u = f(\mathbf{r}, t) \quad \text{para } \mathbf{r} \in \partial\Omega.$$

b) *Condiciones de frontera tipo Neumann* o condiciones de frontera de *segundo tipo*:

$$\frac{\partial u}{\partial n} = \hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla u = f(\mathbf{r}, t) \quad \text{para } \mathbf{r} \in \partial\Omega.$$

c) *Condiciones de frontera tipo Robin* o condiciones de frontera de *tercer tipo*:

$$au + b\frac{\partial u}{\partial n} = g \quad \text{en } g \in \partial\Omega$$

### 3.3. Problema de estado estacionario

La ecuación de Laplace se relaciona con el estudio de una clase grande de fenómenos físicos conocidos como *fenómenos de estado estacionario*. Éstos se caracterizan por el hecho de no variar su dinámica al transcurrir un cierto periodo de tiempo.

Consideremos el problema de estado estacionario de distribución de temperatura  $u$  en un cuerpo homogéneo e isotrópico. Es decir,

$$\nabla^2 u = 0, \quad \text{en } \Omega. \quad (3.7)$$

Si  $\Omega$  denota el interior del cuerpo, la temperatura en estado estacionario  $u(x, y, z)$  debe satisfacer la ecuación anterior en cada punto  $(x, y, z)$  en  $\Omega$ . No obstante, la ecuación 3.7 posee una infinidad de posibles soluciones. Con el fin de seleccionar una en particular, la cual describa la distribución de temperatura actual del cuerpo, se deben especificar condiciones suplementarias para delimitarla. Al contrario de los fenómenos dependientes del tiempo, ninguna condición inicial necesita ser especificada para la ecuación 3.7. Por consiguiente, las condiciones de frontera típicas para el problema de estado estacionario son:

$$u(x, y, z) = f(x, y, z), \quad (x, y, z) \in \partial\Omega, \quad (3.8)$$

$$\frac{\partial u}{\partial n}(x, y, z) = g(x, y, z), \quad (x, y, z) \in \partial\Omega, \quad (3.9)$$

$$\alpha(x, y, z) \frac{\partial u}{\partial n}(x, y, z) + \beta(x, y, z)u(x, y, z) = h(x, y, z), \quad (x, y, z) \in \partial\Omega. \quad (3.10)$$

El problema de encontrar la solución a la ecuación 3.7 satisfaciendo alguna condiciones anteriores, se conoce como *problema de valor en la frontera*. Siendo precisos, al problema que satisface las condiciones 3.8 se le conoce como *Problema de Dirichlet*, si satisface 3.9, se le conoce como *Problema de Neumann* y si satisface 3.10, recibe el nombre de *problema de frontera de tercera especie*.

### 3.3.1. Modelo de transferencia de calor en una celda de combustible

Con el objeto de ilustrar el efecto de las condiciones de frontera, consideremos el problema asociado al de transferencia de calor que se origina por la necesidad de un manejo adecuado del calor generado en las celdas de combustible con una membrana de intercambio de protones.

La determinación de la distribución de calor en una celda de combustible se lleva a cabo realizando balances energéticos del sistema. Éstos se basan en la energía producida, en sus reacciones químicas, así como el calor que ellas mismas producen. Por tanto, los componentes principales a considerar para modelar las transferencias de calor en una celda de combustible serán: los reactivos, los productos resultantes de la reacción y la electricidad producida.

Generalmente, la generación de calor en una celda de combustible se asocia a sus pérdidas de voltaje. La mayor parte de éste se genera en las capas del catalizador, predominante en el lado del cátodo para luego seguir en la membrana y en ciertas partes sólidas eléctricamente conductoras (ambas debidas a las pérdidas óhmicas).

Principalmente, el flujo de calor es llevado por conducción a través de las partes sólidas de la celda de combustible, a saber estructuras porosas del electrodo y la membrana de intercambio de protones, incluyendo la capa de la difusión del gas. Un cierta cantidad se transfiere a las especies reactantes (dependiendo de su temperatura), otra se transfiere al medio de enfriamiento con la convección, y la restante se conduce al borde del stack (o módulo) donde se transfiere al aire circundante por radiación y por convección natural, ver figura 3.2.

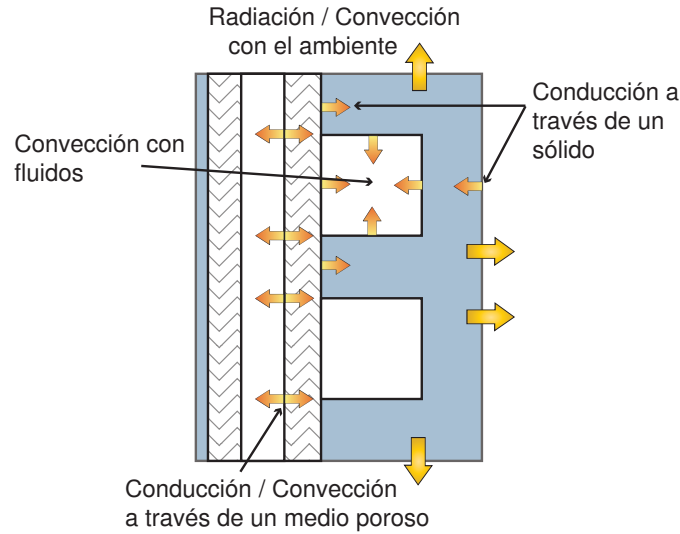


Fig. 3.2. Flujos de calor en una porción de una celda de combustible.

### Un modelo básico de transferencia de calor en una celda de combustible

Una primera aproximación a un flujo constante de calor estará representada por

$$\nabla^2 u + \frac{q_{int}}{k} = 0 \quad \text{en } \Omega$$

donde  $q_{int}$  denota la tasa de generación de calor por unidad de volumen, Barbir, F. [2]. En las celdas de combustible, la generación interna de calor está asociada a la resistencia eléctrica o iónica. Es decir,

$$q_{int} = i^2 \rho_m$$

para  $i$  y  $\rho_m$ , la corriente eléctrica (o iónica) y la densidad del material, respectivamente.

Las condiciones de frontera asociadas al problema involucran el comportamiento de la temperatura en las capas exterior y en el número de interfaces (capas interiores) que posea la celda de combustible. Cabe notar que el flujo del calor se conduce a través de dos materiales adyacentes con diferentes conductividades térmicas y es igual en las interfaces. Es decir,

$$u_i = u_{i+1},$$

$$k_i \frac{\partial u}{\partial n_i} = k_{i+1} \frac{\partial u}{\partial n_{i+1}}.$$

La importancia de un manejo apropiado de la generación de calor en una celda de combustible es crucial para elevar su rendimiento. Por consiguiente, el estado óptimo de

la membrana de intercambio de protones dependerá de la cantidad de calor. Con una elevada cantidad de calor, la membrana puede deshidratarse y con ello perder todas sus propiedades catalíticas. De igual manera, un sobre enfriamiento conlleva una sobre hidratación por condensación del agua como producto de la reacción química produciendo un decremento en sus propiedades.

Para asegurar el manejo térmico apropiado para una celda combustible PEM, es esencial predecir la distribución de la temperatura dentro del dispositivo. En este trabajo se retoma un método no destructivo para reconstruir la distribución global de temperatura en una capa interna de la celda de combustible basándose en arreglos de mediciones sobre la superficie externa, Cheng, C.H. *et al.* [8]).

### 3.3.2. Problema homogéneo de transferencia de calor

Para fines de carácter ilustrativo, en esta sección se considera  $q_{int} \equiv 0$ . Por tanto, la distribución de temperatura  $u$  satisface:

$$\nabla^2 u = 0, \quad \text{en } \Omega \quad (3.11)$$

donde  $\Omega = \{(x, y, z) \in \mathbb{R}^3 : 0 < x \leq N, 0 < y \leq M, 0 < z \leq L\}$ , con las condiciones de frontera:

(a) En las caras exteriores:

$$\pm \frac{\partial u}{\partial n} = \alpha(u - u_a) \quad (3.11a)$$

donde  $n$  es la normal para cada cara exterior,  $u_a$  denota la temperatura ambiente y  $\alpha$  es el coeficiente de transferencia de calor, ver figura 3.3.

(b) En el interfaz entre dos capas sólidas:

$$u_i = u_{i+1}, \quad (3.11b)$$

$$k_i \frac{\partial u}{\partial n_i} = k_{i+1} \frac{\partial u}{\partial n_{i+1}} \quad \text{para } i = 1, 2, 3 \quad (3.11c)$$

donde  $i$  e  $i + 1$  denotan dos capas contiguas, ver figura 3.3.



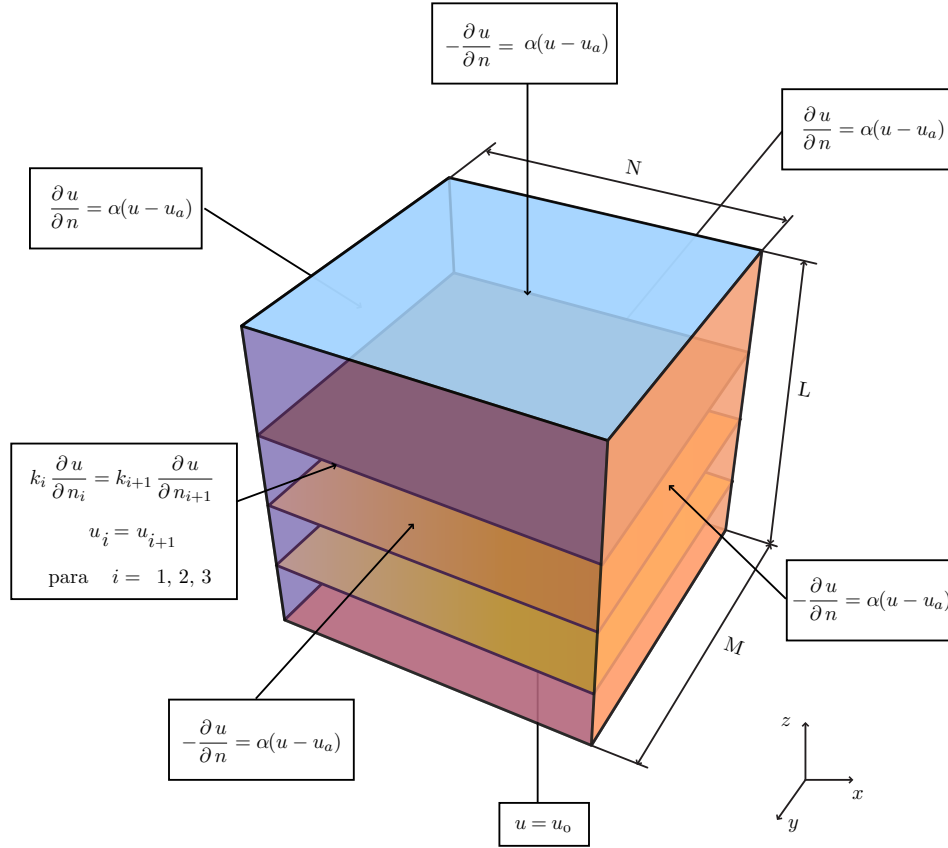


Fig. 3.3. Condiciones de frontera para el problema de estado estacionario propuesto.

### 3.3.3. Solución numérica al problema homogéneo de transferencia de calor

Las ecuaciones (3.11), (3.11a), (3.11b) y (3.11c) se pueden reducir a un conjunto de ecuaciones algebraicas para encontrar una aproximación a la solución del problema estacionario en todos los puntos de un mallado ( $NX \times NY \times NZ$ ) mediante el uso del *método de diferencias finitas*.

Básicamente, en una solución por diferencias finitas, las derivadas son reemplazadas por aproximaciones en diferencias finitas, convirtiendo entonces un problema de ecuaciones diferenciales en un problema algebraico relativamente sencillo de resolver por medios comunes (especialmente matriciales).

### Esquema de diferencias finitas para los puntos interiores

El primer paso consiste en obtener una versión discretizada del operador de Laplace (ecuación 3.7) para los *puntos interiores* que nos permita usarla numéricamente. Una fórmula para aproximar  $f''(x)$  es

$$f''(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} + \mathcal{O}(h^2).$$

Por lo que al aplicar esta fórmula a la función  $u(x, y, z)$  para discretizar  $u_{xx}(x, y, z)$ ,  $u_{yy}(x, y, z)$  y  $u_{zz}(x, y, z)$  con  $h_x = N/NX$ ,  $h_y = M/NY$  y  $h_z = L/NZ$  y sustituyendo en (3.7), obtenemos:

$$\begin{aligned} \nabla^2 u(x, y, z) &= \frac{u(x+h_x, y, z) - 2u(x, y, z) + u(x-h_x, y, z)}{h_x^2} \\ &+ \frac{u(x, y+h_y, z) - 2u(x, y, z) + u(x, y-h_y, z)}{h_y^2} \\ &+ \frac{u(x, y, z+h_z) - 2u(x, y, z) + u(x, y, z-h_z)}{h_z^2} + \mathcal{O}(h_x^2, h_y^2, h_z^2). \end{aligned}$$

Para resolver numéricamente la ecuación de Laplace, imponemos la aproximación a la ecuación anterior:

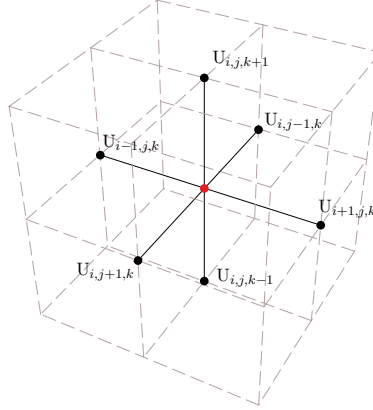
$$\begin{aligned} &h_x^2 h_y^2 u(x, y, z-h_z) + h_x^2 h_y^2 u(x, y, z+h_z) + h_x^2 h_z^2 u(x, y-h_y, z) \\ &+ h_x^2 h_z^2 u(x, y+h_y, z) + h_y^2 h_z^2 u(x-h_x, y, z) + h_y^2 h_z^2 u(x+h_x, y, z) \\ &- 2(h_x^2 h_y^2 + h_x^2 h_z^2 + h_y^2 h_z^2) u(x, y, z) = 0 \end{aligned}$$

que tiene una precisión de orden  $\mathcal{O}(h_x^2, h_y^2, h_z^2)$  en los puntos interiores de la malla  $(x, y, z) = (ih_x, jh_y, kh_z)$  para  $i = 2, \dots, NX-1$ ,  $j = 2, \dots, NY-1$  y  $k = 2, \dots, NZ-1$ .

Por tanto, haciendo  $u(ih_x, jh_y, kh_z) = U_{i,j,k}$ , obtenemos:

$$\begin{aligned} \nabla^2 U_{i,j,k} \approx & \frac{1}{2(h_x^2 h_y^2 + h_x^2 h_z^2 + h_y^2 h_z^2)} \left( h_x^2 h_y^2 (U_{i,j,k-1} + U_{i,j,k+1}) + \right. \\ & \left. h_x^2 h_z^2 (U_{i,j-1,k} + U_{i,j+1,k}) + h_y^2 h_z^2 (U_{i-1,j,k} + U_{i+1,j,k}) \right) \quad (3.12) \end{aligned}$$

la cual llamaremos *fórmula en diferencias de los siete puntos* para la ecuación de Laplace. Esta fórmula relaciona el valor  $U_{i,j,k}$  con sus 6 valores cercanos:  $U_{i,j,k-1}$ ,  $U_{i,j,k+1}$ ,  $U_{i,j-1,k}$ ,  $U_{i,j+1,k}$ ,  $U_{i-1,j,k}$  y  $U_{i+1,j,k}$ , como se muestra en la figura 3.4.



**Fig. 3.4.** Esquema en diferencias finitas para los puntos interiores de la malla ( $NX \times NY \times NZ$ ).

### Esquema de diferencias finitas para los puntos en el interfaz entre dos capas

Para este caso, se busca obtener una relación para los puntos en el interfaz entre dos capas. Para ello, se usan versiones discretizadas para aproximar 3.11c, ver figura 3.5. Por tanto, para aproximar  $f'(x)$  usando puntos por arriba de la interfaz  $C_\gamma$  con  $\gamma = 1, 2, 3$ , se emplea la siguiente expresión:

$$f'(x) = \frac{3f(x) - 4f(x-h) + f(x-2h)}{2h} + \mathcal{O}(h^2);$$

mientras que usando puntos por debajo de ésta, se tiene

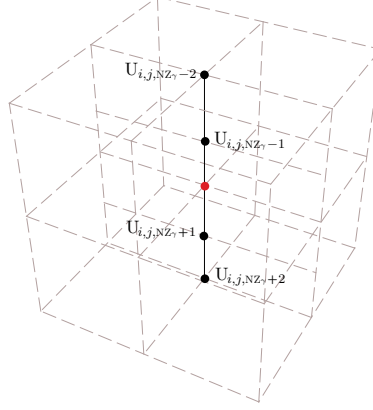
$$f'(x) = \frac{-3f(x) + 4f(x+h) - f(x+2h)}{2h} + \mathcal{O}(h^2).$$

Por consiguiente, al aplicar estas expresiones a 3.11c para discretizar  $u_n(x, y, z)$  con  $h_z = L/NZ$ , tenemos

$$\begin{aligned} K_\gamma \frac{\partial u}{\partial n_\gamma} - K_{\gamma+1} \frac{\partial u}{\partial n_{\gamma+1}} &= K_\gamma \frac{3u(x, y, z) - 4u(x, y, z - h_z) + u(x, y, z - 2h_z)}{2h_z} \\ &\quad - K_{\gamma+1} \frac{-3u(x, y, z) + 4u(x, y, z + h_z) - u(x, y, z + 2h_z)}{2h_z} + \mathcal{O}(h_z^2) \end{aligned}$$

Por lo que al imponer la aproximación

$$\begin{aligned} K_\gamma \frac{\partial u}{\partial n_\gamma} - K_{\gamma+1} \frac{\partial u}{\partial n_{\gamma+1}} &\approx 3(K_\gamma + K_{\gamma+1}) u(x, y, z) - 4K_{\gamma+1} u(x, y, z + h_z) \\ &\quad - 4K_\gamma u(x, y, z - h_z) + K_{\gamma+1} u(x, y, z + 2h_z) + K_\gamma u(x, y, z - 2h_z) = 0, \end{aligned}$$



**Fig. 3.5.** Esquema en diferencias finitas para los puntos en el interfaz entre dos capas.

con una precisión de orden  $\mathcal{O}(h^2)$  en los puntos de la malla  $(x, y, C_\gamma) = (i h_x, j h_y, NZ_\gamma)$  para  $i = 2, \dots, NX-1$  y  $j = 2, \dots, NY-1$ , donde  $NZ_\gamma = \lfloor (NZ \cdot C_\gamma) / L \rfloor$  con  $\gamma \in \{1, 2, 3\}$ , se obtiene

$$U_{i,j,NZ_\gamma} = \frac{4 K_{\gamma+1} U_{i,j,NZ_\gamma+1} + 4 K_\gamma U_{i,j,NZ_\gamma-1} - K_{\gamma+1} U_{i,j,NZ_\gamma+2} - K_\gamma U_{i,j,NZ_\gamma-2}}{3(K_\gamma + K_{\gamma+1})}. \quad (3.13)$$

donde  $U_{i,j,NZ_\gamma} = u(i h_x, j h_y, C_\gamma)$ .

### Esquema de diferencias finitas para los puntos en la frontera

La condición de frontera (3.11a) es del tipo Neumann; ésta especifica la derivada direccional de  $u(x, y)$  normal a una cara exterior de  $\Omega$ .

Supongamos  $z = L$ , entonces la condición de frontera usada en toda cara exterior, descrita por  $(x, y, z) \in \mathbb{R}^3$  tal que  $0 < x < N$ ,  $0 < y < M$ ,  $z = L$ , es:

$$-K \frac{\partial u}{\partial n}(x, y, z) = \alpha (u(x, y, z) - u_a).$$

Diferenciando numéricamente la expresión anterior en el punto  $(i, j, NZ)$ , tenemos:

$$u_z(i, j, NZ) \approx \frac{U_{i,j,NZ+1} - U_{i,j,NZ-1}}{2h_z} = \frac{\alpha (U_{i,j,Nz} - U_a)}{-K}$$

$$\implies U_{i,j,NZ+1} = 2 \frac{\alpha}{K} h_z U_a - 2 \frac{\alpha}{K} h_z U_{i,j,Nz} + U_{x,y,Nz-1}. \quad (3.14)$$

Por otro lado, evaluando la ecuación (3.12) en el punto  $(i, j, \text{NZ})$ , se tiene

$$U_{i,j,\text{NZ}} = \frac{1}{2(h_x^2 h_y^2 + h_x^2 h_z^2 + h_y^2 h_z^2)} \left( h_x^2 h_y^2 U_{i,j,\text{NZ}-1} + h_x^2 h_y^2 U_{i,j,\text{NZ}+1} + h_x^2 h_z^2 U_{i,j-1,\text{NZ}} \right. \\ \left. + h_x^2 h_z^2 U_{i,j+1,\text{NZ}} + h_y^2 h_z^2 U_{i-1,j,\text{NZ}} + h_y^2 h_z^2 U_{i+1,j,\text{NZ}} \right). \quad (3.15)$$

Finalmente al sustituir (3.14) en (3.15), obtenemos

$$U_{i,j,\text{NZ}} = \left( h_y^2 h_z^2 U_{i+1,j,\text{NZ}} + h_x^2 h_z^2 U_{i,j+1,\text{NZ}} + h_y^2 h_z^2 U_{i-1,j,\text{NZ}} + h_x^2 h_z^2 U_{i,j-1,\text{NZ}} \right. \\ \left. + 2h_x^2 h_y^2 U_{i,j,\text{NZ}-1} + \frac{2\alpha h_x^2 h_y^2 h_z U_a}{K} \right) / 2 \left( h_x^2 h_y^2 + \frac{\alpha h_x^2 h_y^2 h_z}{K} + h_x^2 h_z^2 + h_y^2 h_z^2 \right),$$

la cual tiene una precisión de orden  $\mathcal{O}(h_x^2, h_y^2, h_z^2)$  en los puntos  $(x, y, z) \in \mathbb{R}^3$  tal que  $0 < x < N$ ,  $0 < y < M$ ,  $z = L$ .

Análogamente, las discretizaciones de las condiciones de frontera restantes del problema estacionario (3.11), con una precisión de orden  $\mathcal{O}(h_x^2, h_y^2, h_z^2)$ , quedan descritas para:

$(x, y, z) \in \mathbb{R}^3$  tal que  $x = 1$ ,  $0 < y < M$ ,  $0 < z < L$ , la condición de frontera discretizada correspondiente es:

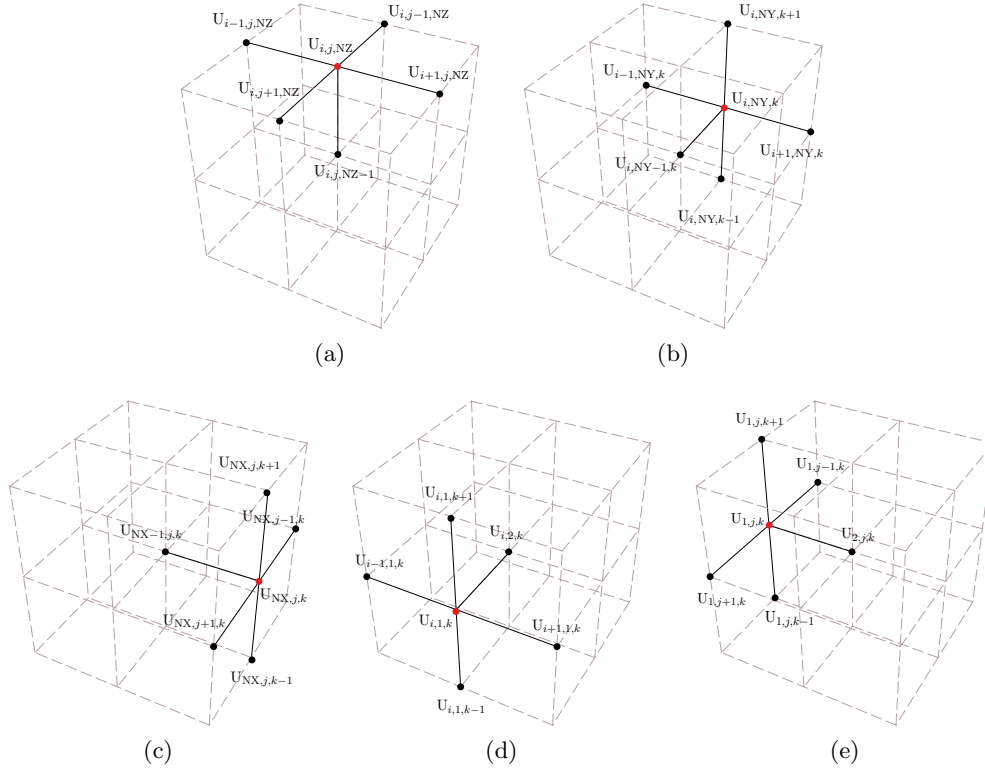
$$U_{1,j,k} = \left( h_x^2 h_z^2 U_{1,j+1,k} + h_x^2 h_z^2 U_{1,j-1,k} + h_x^2 h_y^2 U_{1,j,k-1} + h_x^2 h_y^2 U_{1,j,k+1} \right. \\ \left. + 2h_y^2 h_z^2 U_{2,j,k} + 2\frac{\alpha}{K} h_x h_y h_z^2 U_a \right) / 2 \left( h_x^2 h_y^2 + h_x^2 h_z^2 + h_y^2 h_z^2 + \frac{\alpha}{K} h_x h_y h_z^2 \right),$$

$(x, y, z) \in \mathbb{R}^3$  tal que  $x = N$ ,  $0 < y < M$ ,  $0 < z < L$ , la condición de frontera discretizada es:

$$U_{\text{NX},j,k} = \left( h_x^2 h_y^2 U_{\text{NX},j,k+1} + h_x^2 h_z^2 U_{\text{NX},j+1,k} + 2h_y^2 h_z^2 U_{\text{NX}-1,j,k} + h_x^2 h_z^2 U_{\text{NX},j-1,k} \right. \\ \left. + h_x^2 h_y^2 U_{\text{NX},j,k-1} + 2\frac{\alpha}{K} h_x h_y h_z^2 U_a \right) / 2 \left( h_x^2 h_y^2 + h_x^2 h_z^2 + h_y^2 h_z^2 + \frac{\alpha}{K} h_x h_y h_z^2 \right),$$

$(x, y, z) \in \mathbb{R}^3$  tal que  $0 < x < N$ ,  $y = 1$ ,  $0 < z < L$ , la condición de frontera discretizada es:

$$U_{i,1,k} = \left( h_y^2 h_z^2 U_{i+1,1,k} + h_x^2 h_y^2 U_{i,1,k+1} + h_y^2 h_z^2 U_{i-1,1,k} + h_x^2 h_y^2 U_{i,1,k-1} \right. \\ \left. + 2h_x^2 h_z^2 U_{i,2,k} + 2\frac{\alpha}{K} h_x^2 h_y h_z^2 U_a \right) / 2 \left( h_x^2 h_y^2 + h_x^2 h_z^2 + \frac{\alpha}{K} h_x^2 h_y h_z^2 + h_y^2 h_z^2 \right),$$



**Fig. 3.6.** Esquema en diferencias finitas para los puntos en la frontera de la malla ( $NX \times NY \times NZ$ ).

$(x, y, z) \in \mathbb{R}^3$  tal que  $0 < x < N$ ,  $y = M$ ,  $0 < z < L$ , la condición de frontera discretizada es:

$$U_{i,NY,k} = \left( h_y^2 h_z^2 U_{i+1,NY,k} + h_x^2 h_y^2 U_{i,NY,k+1} + h_y^2 h_z^2 U_{i-1,NY,k} + 2h_x^2 h_z^2 U_{i,NY-1,k} \right. \\ \left. + h_x^2 h_y^2 U_{i,NY,k-1} + 2 \frac{\alpha}{K} h_x^2 h_y h_z^2 U_a \right) / 2 \left( h_x^2 h_y^2 + \frac{\alpha h_x^2 h_y^2 h_z}{K} + h_x^2 h_z^2 + h_y^2 h_z^2 \right).$$

Cada una de estas fórmulas relaciona el valor  $U_{i,j,k}$  con 5 valores cercanos en el mallado ( $NX \times NY \times NZ$ ), ver figura (3.6).

### Forma matricial de las ecuaciones en diferencias finitas

Así como en los casos unidimensionales y bidimensionales, la ecuación en diferencias (3.12) puede ser escrita en forma de una ecuación vectorial (o matricial):

$$Au = b.$$

donde  $A$  es una matriz de  $P \times P$  con  $P = NX \cdot NY \cdot NZ$  y su estructura exacta dependerá en la forma en que se ordenan los términos a determinar. Sin embargo, la desventaja que presenta este método directo de resolución es el almacenaje de los datos; cada punto en el interior del mallado introduce una ecuación a resolver. Puesto que mejores aproximaciones requieren un mallado más fino, inevitablemente será necesario resolver un número mayor de ecuaciones.

En consecuencia, los métodos directos para resolver matrices con entradas casi todas nulas, aún con estrategias de reordenamiento, trabajan bien con sistemas modestos con aproximadamente  $10^3$  grados de libertad y permanecen competitivos para resolver problemas bidimensionales de EDP. Sin embargo, las soluciones de los problemas tridimensionales aún más sencillos requieren el uso de técnicas iterativas (Elman, H., *et al.* [11]).

### Métodos iterativos

En términos generales, los métodos iterativos proveen aproximaciones de las soluciones de un sistema dado. Cada uno toma una aproximación inicial  $x(0)$  de la solución  $x$  y genera aproximaciones subsecuentes que pueden asemejarse a la solución prevista con mayor exactitud en cada iteración sucesiva, Demmel, J. W., [10].

Para encontrar una solución numérica al problema de estado estacionario (3.7), proponemos la implementación de un método iterativo de sobre relajación sucesiva (S. O. R., Successive Over-Relaxation).

### Método de sobre relajación sucesiva SOR

La sobre-relajación sucesiva (SOR) es un método numérico usado para acelerar la convergencia del método del Gauss-Seidel para encontrar la solución a un sistema de lineal de ecuaciones, Mathews, J. H., *et al.* [24].

#### Teorema 3.2 (Método SOR).

*Dado el valor del parámetro  $\omega$  tal que  $0 < \omega < 2$ , la solución al sistema lineal  $Ax = b$  puede ser obtenida usando el esquema de iteración*

$$M_\omega x^{k+1} = N_\omega x^k + \omega b$$

*donde  $M_\omega = D + \omega L$  y  $N_\omega = (1 - \omega)D - \omega U$ , con  $D$ ,  $L$  y  $U$  denotando una matriz diagonal, una matriz triangular inferior y una matriz triangular superior de  $A$ , respectivamente.*

Haciendo los cálculos pertinentes, obtenemos los esquemas apropiados para la implementación computacional del método SOR para encontrar una aproximación numérica a la solución del problema estacionario. Éstos están dados por:

(a) Para los puntos interiores del mallado ( $NX \times NY \times NZ$ ):

$$U_{i,j,k} = U_{i,j,k} + \omega R_{i,j,k} \quad \text{donde} \quad R_{i,j,k} = U_{new} - U_{i,j,k}$$

$$U_{new} = \frac{h_x^2 h_y^2 (U_{i,j,k-1} + U_{i,j,k+1}) + h_x^2 h_z^2 (U_{i,j-1,k} + U_{i,j+1,k}) + h_y^2 h_z^2 (U_{i-1,j,k} + U_{i+1,j,k})}{2(h_x^2 h_y^2 + h_x^2 h_z^2 + h_y^2 h_z^2)}$$

para  $i = 2, \dots, NX - 1$ ,  $j = 2, \dots, NY - 1$  y  $k = 2, \dots, NZ - 1$ .

(b) Para los puntos en la frontera:

- en los puntos  $(x, y, z) \in \mathbb{R}^3$  tal que  $0 < x < N$ ,  $0 < y < M$ ,  $z = L$ .

$$U_{i,j,NZ} = U_{i,j,NZ} + \omega R_{i,j,NZ} \quad \text{donde} \quad R_{i,j,NZ} = U_{new} - U_{i,j,NZ}$$

$$U_{new} = \left( h_y^2 h_z^2 U_{i+1,j,NZ} + h_x^2 h_z^2 U_{i,j+1,NZ} + h_y^2 h_z^2 U_{i-1,j,NZ} + h_x^2 h_z^2 U_{i,j-1,NZ} \right. \\ \left. + 2h_x^2 h_y^2 U_{i,j,NZ-1} + 2\frac{\alpha}{K} h_x^2 h_y^2 h_z U_a \right) / 2 \left( h_x^2 h_y^2 + h_x^2 h_z^2 + h_y^2 h_z^2 + \frac{\alpha}{K} h_x^2 h_y^2 h_z \right)$$

para  $i = 1, \dots, NX$  y  $j = 1, \dots, NY$ .

- en los puntos  $(x, y, z) \in \mathbb{R}^3$  tal que  $x = 1$ ,  $0 < y < M$ ,  $0 < z < L$

$$U_{1,j,k} = U_{1,j,k} + \omega R_{1,j,k} \quad \text{donde} \quad R_{1,j,k} = U_{new} - U_{1,j,k}$$

$$U_{new} = \left( h_x^2 h_z^2 U_{1,j+1,k} + h_x^2 h_z^2 U_{1,j-1,k} + h_x^2 h_y^2 U_{1,j,k-1} + h_x^2 h_y^2 U_{1,j,k+1} \right. \\ \left. + 2h_y^2 h_z^2 U_{2,j,k} + 2\frac{\alpha}{K} h_x h_y^2 h_z^2 U_a \right) / 2 \left( h_x^2 h_y^2 + h_x^2 h_z^2 + h_y^2 h_z^2 + \frac{\alpha}{K} h_x h_y^2 h_z^2 \right)$$

para  $j = 1, \dots, NY$  y  $k = 1, \dots, NZ$ .

- en los puntos  $(x, y, z) \in \mathbb{R}^3$  tal que  $x = N$ ,  $0 < y < M$ ,  $0 < z < L$

$$U_{NX,j,k} = U_{NX,j,k} + \omega R_{NX,j,k} \quad \text{donde} \quad R_{NX,j,k} = U_{new} - U_{NX,j,k}$$



$$U_{new} = \left( h_x^2 h_y^2 U_{NX,j,k+1} + h_x^2 h_z^2 U_{NX,j+1,k} + 2h_y^2 h_z^2 U_{NX-1,j,k} + h_x^2 h_z^2 U_{NX,j-1,k} \right. \\ \left. + h_x^2 h_y^2 U_{NX,j,k-1} + 2\frac{\alpha}{K} h_x h_y^2 h_z^2 U_a \right) / 2 \left( h_x^2 h_y^2 + h_x^2 h_z^2 + h_y^2 h_z^2 + \frac{\alpha}{K} h_x h_y^2 h_z^2 \right)$$

para  $j = 1, \dots, NY$  y  $k = 1, \dots, NZ$ .

- en los puntos  $(x, y, z) \in \mathbb{R}^3$  tal que  $0 < x < N$ ,  $y = 1$ ,  $0 < z < L$

$$U_{i,1,k} = U_{i,1,k} + \omega R_{i,1,k} \quad \text{donde} \quad R_{i,1,k} = U_{new} - U_{i,1,k}$$

$$U_{new} = \left( h_y^2 h_z^2 U_{i+1,1,k} + h_x^2 h_y^2 U_{i,1,k+1} + h_y^2 h_z^2 U_{i-1,1,k} + h_x^2 h_y^2 U_{i,1,k-1} \right. \\ \left. + 2h_x^2 h_z^2 U_{i,2,k} + 2\frac{\alpha}{K} h_x^2 h_y h_z^2 U_a \right) / 2 \left( h_x^2 h_y^2 + h_x^2 h_z^2 + \frac{\alpha}{K} h_x^2 h_y h_z^2 + h_y^2 h_z^2 \right),$$

para  $i = 1, \dots, NX$  y  $k = 1, \dots, NZ$ .

- en los puntos  $(x, y, z) \in \mathbb{R}^3$  tal que  $0 < x < N$ ,  $y = M$ ,  $0 < z < L$

$$U_{i,NY,k} = U_{i,NY,k} + \omega R_{i,NY,k} \quad \text{donde} \quad R_{i,NY,k} = U_{new} - U_{i,NY,k}$$

$$U_{new} = \left( h_y^2 h_z^2 U_{i+1,NY,k} + h_x^2 h_y^2 U_{i,NY,k+1} + h_y^2 h_z^2 U_{i-1,NY,k} + 2h_x^2 h_z^2 U_{i,NY-1,k} \right. \\ \left. + h_x^2 h_y^2 U_{i,NY,k-1} + 2\frac{\alpha}{K} h_x^2 h_y h_z^2 U_a \right) / 2 \left( h_x^2 h_y^2 + \frac{\alpha}{K} h_x^2 h_y^2 h_z + h_x^2 h_z^2 + h_y^2 h_z^2 \right).$$

para  $i = 1, \dots, NX$  y  $k = 1, \dots, NZ$ .

- (c) Para los puntos en la interfaz entre dos capas  $(x, y, z) \in \mathbb{R}^3$  tal que  $0 < x < N$ ,  $0 < y < M$ ,  $z = C_\gamma$  con  $\gamma \in \{1, 2, 3\}$

$$U_{i,j,k} = U_{i,j,k} + \omega R_{i,j,k} \quad \text{donde} \quad R_{i,j,k} = U_{new} - U_{i,j,k}$$

$$U_{new} = \frac{4K_{\gamma+1} U_{i,j,k+1} + 4K_\gamma U_{i,j,k-1} - K_{\gamma+1} U_{i,j,k+2} - K_\gamma U_{i,j,k-2}}{3(K_\gamma + K_{\gamma+1})}.$$

para  $i = 2, \dots, NX - 1$ ,  $j = 2, \dots, NY - 1$  y  $k = NZ_\gamma$  con  $\gamma = 1, 2, 3$ .

### 3.3.4. Simulación computacional

#### Ejemplo 3.4

Para la aplicación del método numérico de resolución al problema, consideramos distintos mallados con una condición de paro del procedimiento iterativo de  $tol = 10^{-6}$ . El parámetro del método SOR usado fue  $\omega = 1.844646$ .

Tabla 3.1.

$NX \times NY \times NZ$	$40 \times 40 \times 20$	$80 \times 80 \times 40$	$180 \times 180 \times 80$
No. Interacciones	919	2672	7385
Tiempo Ejec.	30.3341 sec.	775.1519 sec.	$1.9164e + 04$ sec.
Error	$9.9221e - 06$	$9.9673e - 06$	$9.9969e - 06$

Tabla 3.2.

	Placa de carbón	Placa de cobre	Recolector	Empaque
$N$	0.21	0.21	0.21	0.21
$M$	0.21	0.21	0.21	0.21
$L$	0.003	0.003	0.0003	0.004
$K_\gamma$	10	5	30	20
$\alpha$	10	10	10	10
$U_a$	25	25	25	25

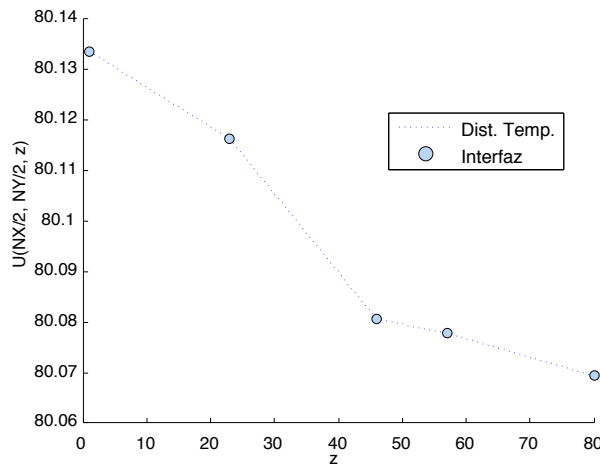
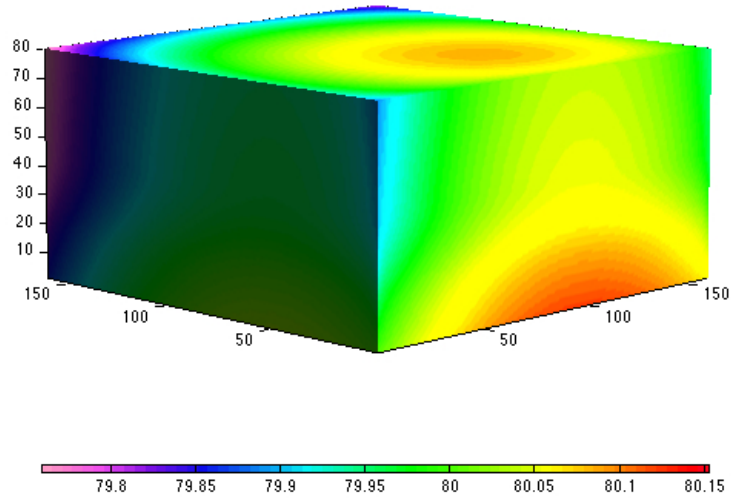
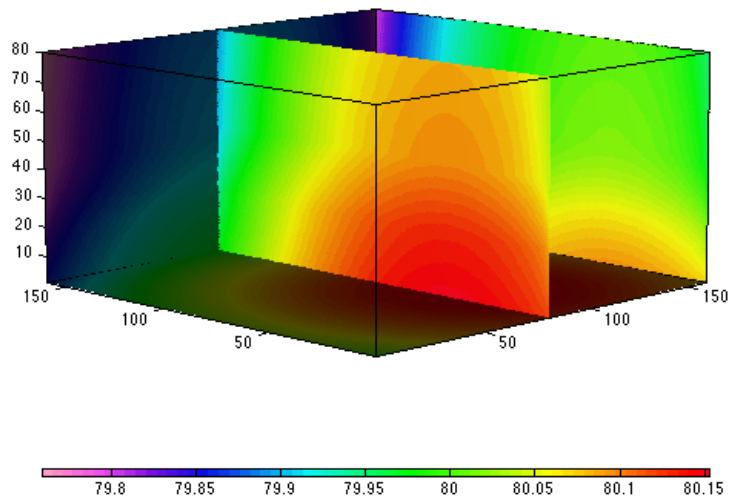


Fig. 3.7. Distribución de temperatura obtenido al aplicar el método de diferencias finitas propuesto utilizando las constantes térmicas  $K_\gamma$  (Tabla 3.2).

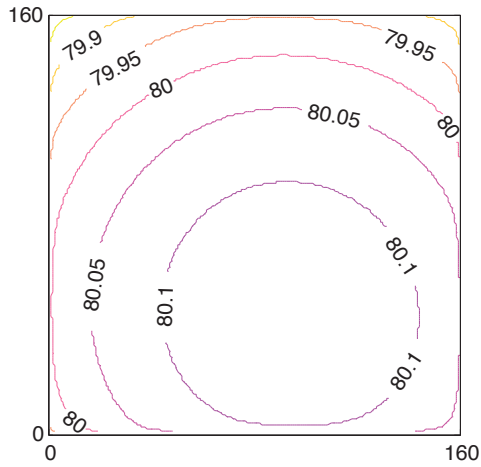


(a) Perfil de temperatura en  $\partial\Omega$

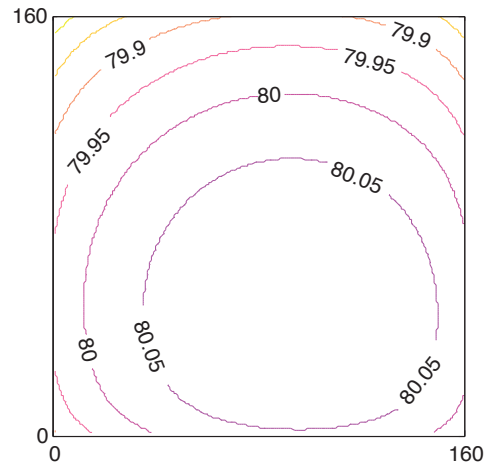


(b) Perfil de temperatura en  $\partial\Omega$

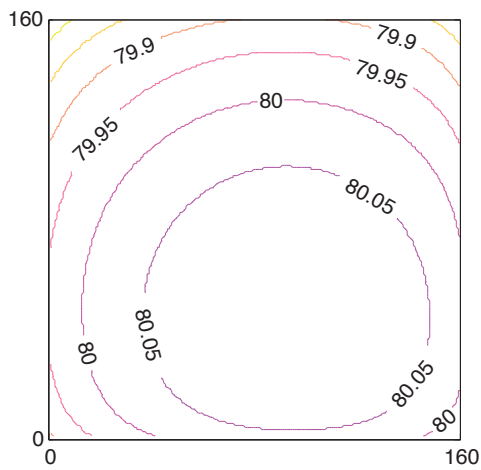
**Fig. 3.8.** Simulación computacional al problema de conducción de calor en una celda de combustible PEMFC utilizando los datos de la tabla 3.2 con un mallado de  $180 \times 180 \times 80$ .



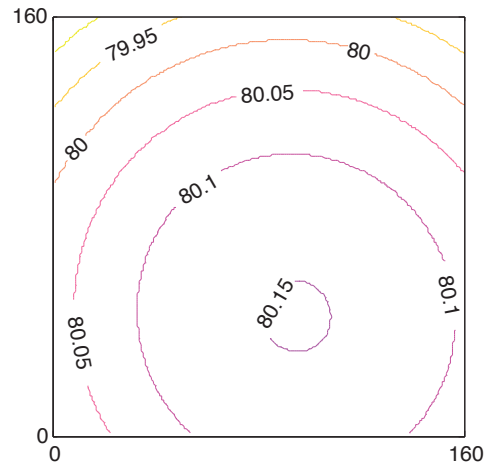
(a) Perfil de temperatura entre la placa de carbón y la placa de cobre



(b) Perfil de temperatura entre la placa de cobre y el recolector



(c) Perfil de temperatura entre el recolector y el empaque



(d) Perfil de temperatura en la capa exterior (base)

**Fig. 3.9.** Perfiles de temperatura en las distintas capas.

# Determinación de perfiles de temperatura en una celda de combustible

---

## 4.1. Introducción

Una gran variedad de problemas de la industria están asociados a procesos de transferencia de calor, masa y energía (electroquímica por ejemplo). Su modelación apela a principios básicos de balance, resultando modelos espacialmente distribuidos (EDPs) no estacionarios. Debido a su complejidad, aún en casos simplificados se hace necesario, además de un estudio teórico, simulaciones numéricas basadas en elementos finitos (FEM), métodos de integrales de frontera (BEM) o inclusive métodos libres de mallas (*meshless*) que permitan reducir la dimensión del problema. Entre tales problemas destacan los de la generación de energía de bajo costo; su resolución involucra desde el desarrollo de generadores de energía (*e.g.* un celda de combustible) hasta su mantenimiento, pasando por su evaluación de rendimiento.

En consecuencia, la necesidad de desarrollar implementaciones para la industria, así como en otras ramas de la ciencia, ha impulsado un tremendo crecimiento del campo de los problemas inversos en poco menos de dos décadas, Vogel, C. R. [34]. En efecto, con las amplias referencias en la literatura actual, Engl, H. W. *et al.* [13], Colton, D. *et al.* [9], Ramm, A. G. [29], Bertero, M. *et al.* [6], principalmente en los llamados métodos de regularización para la solución de problemas mal planteados no lineales, se ha logrado avances en su teoría. Conjuntamente con el desarrollo de las técnicas numéricas sofisticadas para tratar los problemas directos, se ha logrado abordar y resolver problemas inversos industriales con un nivel de alta complejidad.

Los problemas inversos se presentan siempre que uno busca las causas de efectos observados o deseados. Así dos problemas se llaman inversos el uno al otro si la formulación de un problema implica la del otro. Estos dos problemas entonces se separan en un *pro-*

*blema directo e inverso.* En primer instancia parecería arbitrario cual de estos problemas es nombrando directo y cual es el inverso. Usualmente, el problema directo es el problema que se plantea de manera clásica o habitual, el cual también es bien condicionado. En consecuencia, la formulación matemática de los problemas inversos resulta en modelos que son típicamente mal condicionados en el sentido de Hadamard, Hadamard, J. [16].

En general, los problemas inversos se pueden dividir en dos clases:

1. *Identificación o reconstrucción*, si se busca la causa dado un efecto observado.
2. *Control o diseño*, si se busca una posible causa dado un efecto deseado.

A continuación enunciamos algunos ejemplos importantes de problemas inversos.

- **Tomografía computarizada** (Natterer, F. [26]), la cual involucra la reconstrucción de una función, usualmente la distribución de densidad, de valores de su integral de línea. Es de gran importancia para implementaciones médicas y para técnicas de monitoreo no destructivas, Engl, H. W. [12].
- **Dispersión inversa** (Colton, D. *et al.* [9], Ramm, A. G. [29]) es el problema de determinar las características de un objeto (su forma, constitución interna, etc.) de datos de la medición de la radiación o de partículas dispersadas por el objeto. Este es un caso especial de la reconstrucción de la geometría del objeto y está relacionada con la optimización de la geometría de su forma, Haslinger, J. *et al.* [18]. Es decir, uno quiere construir la geometría de una forma de tal manera que el resultado es la mejor “aproximación”. En este tipo de problemas, la unicidad de la solución es la pregunta clave dado que uno requiere conocer si es posible determinar de manera única la forma (o un cualquier otra solución, *e. g.* perfiles de temperatura, de otro problema inverso) a partir de datos.
- **Problemas inversos de conducción del calor** (Engl, H. W. *et al.* [13], Beck, J. V. *et al.* [4]).
- **Problemas inversos geofísicos** (Engl, H. W. [12]) como los que determinan una distribución espacial variable de la densidad en la tierra a partir de medidas de la gravedad.
- **Problemas inversos en procesamiento de imágenes** (Bertero, M. *et al.* [6]) como los de borrado y reducción de ruido.

- **Identificación de parámetros** en ecuaciones diferenciales parciales usando mediciones de la solución en el interior o en la frontera (Banks, H.T. *et al.* [1], Isakov, V.[20])

Generalmente en implementaciones reales de los problemas inversos uno no posee datos exactos sino datos perturbados con ruido debido a los errores en las mediciones o también debido a las inexactitudes del propio modelo. Incluso si existe una pequeña desviación en los datos exactos, los algoritmos propuestos para resolver el problema bien planteado fallan. En consecuencia, los datos, así como los errores por redondeo, pueden ser “amplificados” por un factor arbitrariamente grande. Para superar estas dificultades, uno tiene que hacer uso de los métodos de regularización.

En términos generales, los métodos de regularización reemplazan un problema mal planteado por una familia de problemas bien planteados en cierta vecindad.

## 4.2. Problema de determinación de perfiles de temperatura

Como ya se ha mencionado anteriormente, la energía eléctrica producida por una celda de combustible va acompañada por una casi igual cantidad de energía térmica. Por lo que es necesario para mantener su temperatura operación en niveles seguros. En efecto, sin una adecuada gestión térmica, su rendimiento óptimo no puede ser mantenido.

Con el fin de garantizar el correcto funcionamiento de las celdas de combustible, es fundamental predecir la distribución de temperatura en su interior. No obstante, la solución a dicho problema resulta generalmente difícil de determinar. Una de las soluciones prácticas al problema consiste en usar métodos destructivos en lo que se colocan directamente una serie de sensores de temperatura dentro de la celda.

Lamentablemente, en la realidad, los métodos destructivos provocan daños a la estructura de la celda de combustible. Además, perturban la dinámica de las reacciones químicas en su interior. Ante estas circunstancias, un método no destructivo que puede ser aplicado de manera alternativa para determinar la temperatura interna de una celda de combustible sin producir alteraciones en su operación. En consecuencia, el problema se reduce en aproximar la temperatura interna a partir de mediciones en su exterior.

En las siguientes secciones se abordará este problema introduciendo los conceptos de *problema directo* y *problema inverso* asociado al problema de transferencia de calor introducido en el capítulo anterior con el objetivo de proponer un método no destructivo para encontrar una solución al problema de determinación del perfil de temperatura interior en una celda de combustible.

### 4.2.1. Espacios funcionales

En lo sucesivo  $Q$  denotará un dominio acotado de  $\mathbb{R}^n$ . Si  $Q, Q'$  son dos dominios del espacio  $\mathbb{R}^n$ , la notación  $Q' \Subset Q$  significa que  $\overline{Q'} \subset Q$ . Por  $L_2(Q)$  denotamos el espacio de funciones integrables en el sentido de Lebesgue tales que

$$\int_Q |f|^2 dV < \infty.$$

Por  $C^k(Q)$  denotamos a las funciones definidas en  $Q$  de clase  $C^k$  y por  $C_0^k(Q)$  al subconjunto de funciones en  $C^k(Q)$  cuyo soporte compacto está contenido en  $Q$ .

**Definición 4.1.** Sea  $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)$  un vector de entradas enteras no negativas. Denotemos por  $|\alpha| = \alpha_1 + \alpha_2 + \dots + \alpha_n$ . Una función  $f^\alpha \in L_2(Q)$  se llama la  $\alpha$ -ésima derivada generalizada de  $f \in L_2(Q)$ , si para cualquier función  $g(x) \in C_0^\alpha(\overline{Q})$  tiene lugar la desigualdad

$$\int_Q f(x) D^\alpha g(x) dx = (-1)^{|\alpha|} \int_Q f^\alpha(x) g(x) dx.$$

**Definición 4.2.** El espacio  $H^k(Q)$  es el conjunto de funciones en  $L_2(Q)$ , cuyas derivadas generalizadas hasta orden  $k$  inclusive pertenecen a  $L_2(Q)$ . Convenimos en denotar  $H^0(Q) = L_2(Q)$ .

Los espacios  $H^k(Q)$  son espacios de Hilbert con la norma definida por el producto escalar

$$\langle u, v \rangle = \sum_{|\alpha| \leq k} \int_Q u^\alpha(x) v^\alpha(x) dx.$$

En la formulación débil del problema de contorno, haremos uso de los siguientes resultados que se pueden consultar en la referencia [25].

**Teorema 4.1.** Supongamos que una superficie  $(n-1)$ -dimensional  $S$  es de clase  $C^1$  o pertenece a  $Q'$ ,  $Q' \Subset Q$ , o bien, en lugar de esto, sea  $S \subset \overline{Q}$  y, complementariamente,  $\partial Q \in C^1$ . Entonces toda función  $F(x) \in H^1(Q)$  tiene en esta superficie una traza  $F|_S$ , perteneciente a  $L_2(S)$ , y, además tiene lugar la desigualdad

$$\|F|_S\|_{L_2(S)} \leq C \|F\|_{H_1(Q)} \quad (4.1)$$

donde la constante  $C > 0$  no depende de  $f$ .

**Teorema 4.2.** Si para  $k \geq 1$  el contorno  $\partial Q \in C^k$ , entonces para toda función  $f \in C^k(\partial Q)$  existe la función  $F \in C^k(\overline{Q})$  que es una prolongación de la función  $f(x)$  en  $Q$ , teniendo lugar, en este caso, la desigualdad

$$\|F\|_{C^k(\overline{Q})} \leq C \|f\|_{C^k(\partial Q)} \quad (4.2)$$

donde la constante  $C > 0$  no depende de  $f$ .



**Corolario 4.1.** Si para  $k \geq 1$  el contorno  $\partial Q \in C^1$ , entonces para toda función  $f \in C^1(\partial Q)$  existe la función  $F \in H^1(Q)$  que es una prolongación de la función  $f(x)$  en  $Q$ , teniendo lugar, en este caso, la desigualdad

$$\|F\|_{H^1(Q)} \leq C\|f\|_{C^1(\partial Q)} \quad (4.3)$$

donde la constante  $C > 0$  no depende de  $f$ .

*Demostración.* Del teorema anterior, existe una extensión  $F \in C^1(\overline{Q})$  y con mayor razón  $F \in H^1(\Omega)$ . Por definición

$$\begin{aligned} \|F\|_{H^1(Q)} &= \int_{\Omega} (|\nabla F|^2 + |F|^2) dV \leq \max_{x \in \overline{\Omega}} (|\nabla F(x)|^2 + |F(x)|^2) \int_{\Omega} dV \\ &\leq C_1 \|F\|_{C^1(\overline{\Omega})} \leq C \|f\|_{C^1(\partial Q)} \end{aligned}$$

□

**Teorema 4.3.** Si un conjunto de funciones es acotado en  $H^1(Q)$ , el conjunto de sus trazas en la superficie  $(n-1)$ -dimensional  $\Gamma \subset \overline{Q}$  es compacto en  $L_2(\Gamma)$ .

#### 4.2.2. Formulación del problema directo

Con el fin de simplificar la presentación del análisis del problema directo y el problema inverso de determinación de perfiles de temperatura, en esta sección se estudiará el caso bidimensional.

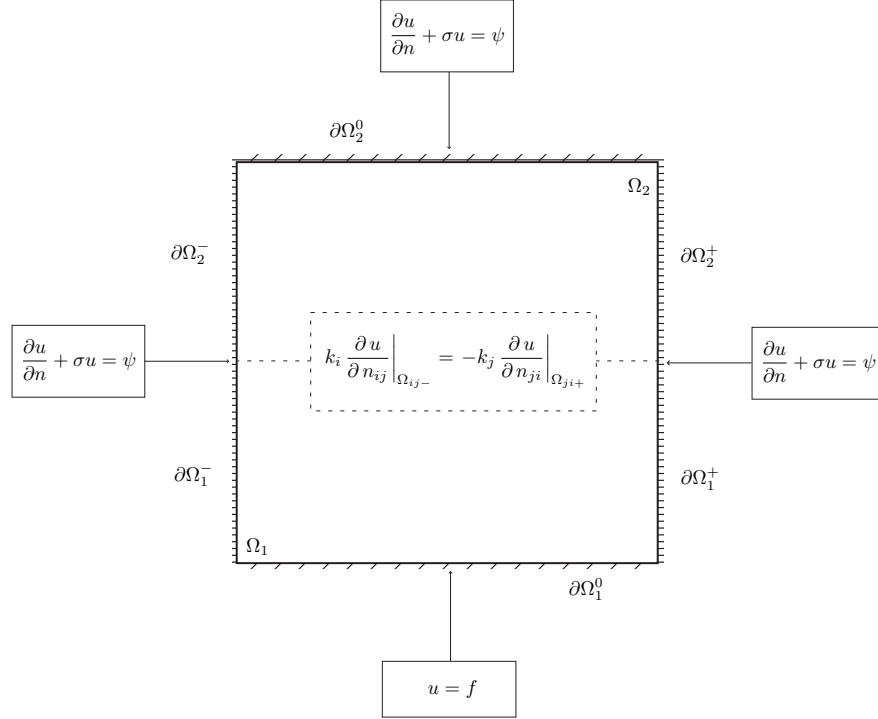
$$\nabla^2 u = 0 \quad \text{en } \Omega_i \quad \text{con } i = 1, 2 \quad (4.4)$$

donde  $\Omega_1$  y  $\Omega_2$  son conjuntos abiertos en  $\mathbb{R}^2$ . Las condiciones contorno definidas para este problema son:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial n} + \sigma u &= \psi \quad \text{en } \partial\Omega \\ u &= f \quad \text{en } \partial\Omega_1^0 \end{aligned} \quad (4.5)$$

donde  $f \in C^1(\partial\Omega_1^0)$ ,  $\psi \in L_2(\partial\Omega_2^0)$ . Se supondrá que  $\sigma$  es continua en  $\partial\Omega_1 \cup \partial\Omega_2^0 \cup \partial\Omega_2$ . En lo sucesivo, por simplicidad en la notación, se supondrá que  $\sigma$ ,  $\psi$ ,  $f$  se extienden a  $\partial\Omega$  con las mismas hipótesis (v. gr.,  $\sigma \in C(\partial\Omega)$ ,  $\psi \in L_2(\partial\Omega)$ ,  $f \in C^1(\partial\Omega)$ ). Ésto se logra modificando ligeramente las funciones  $\sigma$ ,  $\psi$  y  $f$  en las esquinas de  $\partial\Omega_1^0$  y extendiéndola como cero en el resto de  $\partial\Omega$ .

Asimismo, suponga que las regiones discretas  $\Omega_i$  determinan solo una interfaz  $\Omega_{ij}$  (*i. e.* la frontera común entre dos regiones  $\Omega_i$  y  $\Omega_j$ ) con condiciones de contorno descritas como:



**Fig. 4.1.** Condiciones de frontera para el problema 4.4.

$$\begin{aligned}
 u|_{\Omega_{ij-}} &= u|_{\Omega_{ji+}} \\
 k_i \frac{\partial u}{\partial n_{ij}} \Big|_{\Omega_{ij-}} &= -k_j \frac{\partial u}{\partial n_{ji}} \Big|_{\Omega_{ji+}}
 \end{aligned} \tag{4.6}$$

donde  $k_i$  denota los coeficiente de conductividad térmica de cada región  $\Omega_i$ ,  $n_{ij}$  es la normal exterior a  $\Omega_{ij}$  desde  $\Omega_i$ . Con  $\Omega_{ij-}$ ,  $\Omega_{ij+}$  se denotan los valores límite en  $\Omega_i$  y  $\Omega_j$ , respectivamente. Véase figura 4.1.

### Definición de la solución débil

Para motivar la definición de la formulación débil del problema de contorno (4.4), (4.5), comenzaremos por suponer  $u \in C^2(\Omega)$  y  $v \in C^1(\Omega)$  tal que  $v|_{\partial\Omega_1^0} = 0$  (la suposición análoga cuando relajemos la hipótesis de que  $v \in C^1(\Omega)$ , sería que  $v$  sea *terminal* en  $\partial\Omega_1^0$ , es decir  $\text{supp}(v) \cap \partial\Omega_1^0 = \emptyset$ ). Multiplicando (4.4) por  $v$  e integrando por partes en  $\Omega_1$ , obtenemos:

$$0 = \iiint_{\Omega_1} k_1 v \Delta u \, dV = \iint_{\partial\Omega_1} k_1 v \frac{\partial u}{\partial n} \, dS - \iiint_{\Omega_1} k_1 \nabla v \cdot \nabla u \, dV$$

Sustituyendo explícitamente las fronteras,

$$0 = \iint_{\partial\Omega_1^-} k_1 v \frac{\partial u}{\partial n} \, dS + \iint_{\partial\Omega_1^+} k_1 v \frac{\partial u}{\partial n} \, dS + \iint_{\partial\Omega_1^0} k_1 v \frac{\partial u}{\partial n} \, dS + \iint_{\partial\Omega_{12}} k_1 v \frac{\partial u}{\partial n} \, dS - \iiint_{\Omega_1} k_1 \nabla v \cdot \nabla u \, dV$$

Tomando la condición de frontera  $\frac{\partial u}{\partial n} + \sigma u = \psi$  y considerando  $n$  como la normal exterior a  $\Omega_1$ .

$$\begin{aligned} 0 = & \iint_{\partial\Omega_1^-} k_1 v (\psi - \sigma u) \, dS + \iint_{\partial\Omega_1^+} k_1 v (\psi - \sigma u) \, dS + \iint_{\partial\Omega_1^0} k_1 v \frac{\partial u}{\partial n} \, dS \\ & + \iint_{\partial\Omega_{12}} k_1 v \frac{\partial u}{\partial n} \, dS - \iiint_{\Omega_1} k_1 \nabla v \cdot \nabla u \, dV \end{aligned}$$

Análogamente para  $\Omega_2$  y tomando  $n$  como la normal exterior a  $\Omega_2$ , tenemos

$$\begin{aligned} 0 = & \iint_{\partial\Omega_2^-} k_2 v (\psi - \sigma u) \, dS + \iint_{\partial\Omega_2^+} k_2 v (\psi - \sigma u) \, dS + \iint_{\partial\Omega_2^0} k_2 v \frac{\partial u}{\partial n} \, dS \\ & + \iint_{\partial\Omega_{12}} k_2 v \frac{\partial u}{\partial n} \, dS - \iiint_{\Omega_2} k_2 \nabla v \cdot \nabla u \, dV \end{aligned}$$

Sumando éstas dos identidades, obtenemos:

$$\begin{aligned} 0 = & \sum_{i=1}^2 \left( - \iiint_{\Omega_i} k_i \nabla v \cdot \nabla u \, dV + \iint_{\partial\Omega_i^-} k_i v (\psi - \sigma u) \, dS + \iint_{\partial\Omega_i^+} k_i v (\psi - \sigma u) \, dS \right) \\ & + \iint_{\partial\Omega_1^0} k_1 v \frac{\partial u}{\partial n} \, dS + \iint_{\partial\Omega_2^0} k_2 v (\psi - \sigma u) \, dS + \iint_{\partial\Omega_{12}} v \left( k_1 \frac{\partial u}{\partial n} - k_2 \frac{\partial u}{\partial n} \right) \, dS \end{aligned}$$

donde  $n$  denota la normal exterior a  $\Omega_1$ , y el término  $k_1 \frac{\partial u}{\partial n} - k_2 \frac{\partial u}{\partial n}$  se cancela debido a las condiciones de frontera de (4.6).

Simplificando, obtenemos:

$$\begin{aligned}
& \sum_{i=1}^2 \left( \iiint_{\Omega_i} k_i \nabla v \cdot \nabla u dV + \iint_{\partial\Omega_i^-} k_i \sigma v u dS + \iint_{\partial\Omega_i^+} k_i \sigma v u dS \right) + \iint_{\partial\Omega_1^0} k_1 v \frac{\partial u}{\partial n} dS \\
& + \iint_{\partial\Omega_2^0} k_2 \sigma v u dS = \sum_{i=1}^2 \left( \iint_{\partial\Omega_i^-} k_i v \psi dS + \iint_{\partial\Omega_i^+} k_i v \psi dS \right) + \iint_{\partial\Omega_2^0} k_2 v \psi dS \quad (4.7)
\end{aligned}$$

Motivados por lo anterior, definimos:

**Definición 4.3.** La función  $u \in H^1(\Omega)$  es solución débil del problema de contorno (4.4) si la siguiente igualdad

$$\begin{aligned}
& \sum_{i=1}^2 \left( \iiint_{\Omega_i} k_i \nabla v \cdot \nabla u dV + \iint_{\partial\Omega_i^-} k_i \sigma v u dS + \iint_{\partial\Omega_i^+} k_i \sigma v u dS \right) + \iint_{\partial\Omega_1^0} k_1 v \frac{\partial u}{\partial n} dS \\
& + \iint_{\partial\Omega_2^0} k_2 \sigma v u dS = \sum_{i=1}^2 \left( \iint_{\partial\Omega_i^-} k_i v \psi dS + \iint_{\partial\Omega_i^+} k_i v \psi dS \right) + \iint_{\partial\Omega_2^0} k_2 v \psi dS \quad (4.8)
\end{aligned}$$

se cumple para todo  $v \in H^1(\Omega)$  terminal en  $\partial\Omega_1^0$ .

Pasemos ahora a demostrar la existencia de la solución débil del problema de contorno (4.4), (4.5), (4.6).

Con el fin de reducir la condición de contorno  $u|_{\partial\Omega_1^0} = f$  a una condición de contorno homogénea, es necesario suponer que  $f \in C^1(\partial\Omega)$ ; con esta suposición y de acuerdo al Corolario 4.1 existe una extensión  $F$  de clase  $H^1(\Omega)$ , que satisface la desigualdad (4.3).

Hagamos la sustitución  $\bar{u} = u + F$ , la ecuación (4.8) se transforma en

$$\begin{aligned}
& \sum_{i=1}^2 \left( \iiint_{\Omega_i} k_i \nabla v \cdot \nabla \bar{u} dV + \iint_{\partial\Omega_i^-} k_i \sigma v \bar{u} dS + \iint_{\partial\Omega_i^+} k_i \sigma v \bar{u} dS \right) + \iint_{\partial\Omega_1^0} k_1 v \frac{\partial \bar{u}}{\partial n} dS \\
& + \iint_{\partial\Omega_2^0} k_2 \sigma v \bar{u} dS = \sum_{i=1}^2 \left( \iint_{\partial\Omega_i^-} k_i v \psi dS + \iint_{\partial\Omega_i^+} k_i v \psi dS \right) + \iint_{\partial\Omega_2^0} k_2 v \psi dS - \iint_{\partial\Omega_2^0} k_2 \sigma v F dS
\end{aligned}$$

$$-\sum_{i=1}^2 \left( \iiint_{\Omega_i} k_i \nabla v \cdot \nabla F dV + \iint_{\partial\Omega_i^-} k_i \sigma v F dS + \iint_{\partial\Omega_i^+} k_i \sigma v F dS \right) - \iint_{\partial\Omega_1^0} k_1 v \frac{\partial F}{\partial n} dS$$

Aplicando la hipótesis de que  $v(x)$  es terminal en  $\partial\Omega_1^0$ , obtenemos:

$$\begin{aligned} & \sum_{i=1}^2 \left( \iiint_{\Omega_i} k_i \nabla v \cdot \nabla \bar{u} dV + \iint_{\partial\Omega_i^-} k_i \sigma v \bar{u} dS + \iint_{\partial\Omega_i^+} k_i \sigma v \bar{u} dS \right) + \iint_{\partial\Omega_2^0} k_2 \sigma v \bar{u} dS \\ &= \sum_{i=1}^2 \left( -\iiint_{\Omega_i} k_i \nabla v \cdot \nabla F dV + \iint_{\partial\Omega_i^-} k_i v (\psi - F) dS \right) + \iint_{\partial\Omega_2^0} k_2 \sigma v (\psi - F) dS. \end{aligned} \quad (4.9)$$

**Lema 4.1.** El producto escalar  $\langle v, w \rangle$  en  $H^1(\Omega)$ , definido como

$$\langle v, w \rangle = \sum_{i=1}^2 \left( \iiint_{\Omega_i} k_i \nabla v \cdot \nabla w dV + \iint_{\partial\Omega_i^-} k_i \sigma v w dS + \iint_{\partial\Omega_i^+} k_i \sigma v w dS \right) + \iint_{\partial\Omega_2^0} k_2 \sigma v w dS, \quad (4.10)$$

establece una norma equivalente a la asociada al producto usual:

$$(v, w) = \sum_{i=1}^2 \left( \iiint_{\Omega_i} \nabla v \cdot \nabla w dV + \iiint_{\Omega_i} v \cdot w dV \right).$$

*Demostración.* Sea el producto escalar  $\langle -, - \rangle$  definido como en (4.10). Considere  $w \in H^1(\Omega)$ , acotando superiormente la función continua  $\sigma$  y las constantes  $k_1, k_2$  entonces existe  $C_1 > 0$  tal que,

$$\begin{aligned} |w|_{\langle, \rangle}^2 &\leq C_1 \left\{ \sum_{i=1}^2 \left( \iiint_{\Omega_i} |\nabla w|^2 dV + \iint_{\partial\Omega_i^-} |w|^2 dS + \iint_{\partial\Omega_i^+} |w|^2 dS \right) + \iint_{\partial\Omega_2^0} |w|^2 dS \right\} \\ &\leq C_1 \left\{ \iiint_{\Omega_1} |\nabla w|^2 dV + \iiint_{\Omega_2} |\nabla w|^2 dV + \iint_{\partial\Omega} |w|^2 dS \right\} \\ &\leq C_1 \left\{ \iiint_{\Omega_1} |\nabla w|^2 dV + \iiint_{\Omega_2} |\nabla w|^2 dV + \|w|_{\partial\Omega}\|_{L_2(\partial\Omega)} \right\} \end{aligned} \quad (4.11)$$

pero de acuerdo al Teorema 4.2), si la frontera  $\partial\Omega$  es de clase  $C^1$  (a trozos) entonces se satisface que

$$\|w|_{\partial\Omega}\|_{L_2(\partial\Omega)} \leq C_2 \|w\|_{H^1(\Omega)}.$$

para cierta constante  $C_2 > 0$  que no depende de  $w$ . Sustuyendo esta última desigualdad en (4.11), se tiene

$$\begin{aligned} |w|_{<,>}^2 &\leq C_3 \left\{ \iiint_{\Omega_1} |\nabla w|^2 dV + \iiint_{\Omega_2} |\nabla w|^2 dV + \|w\|_{H^1(\Omega)} \right\} \\ &\leq C_3 \|w\|_{H^1(\Omega)} \end{aligned}$$

La desigualdad  $\|w\|_{H^1(\Omega)}^2 \leq C_4 |w|_{<,>}^2$  se muestra de manera similar (*i.e.* acotando inferiormente la función continua  $\sigma$  y las constantes  $k_1$  y  $k_2$ ).  $\square$

**Lema 4.2.** *La función  $l(v)$  definida como*

$$\begin{aligned} l(v) &= \sum_{i=1}^2 \left( - \iiint_{\Omega_i} k_i \nabla v \cdot \nabla F dV + \iint_{\partial\Omega_i^-} k_i v (\psi - F) dS + \iint_{\partial\Omega_i^+} k_i v (\psi - F) dS \right) \\ &\quad + \iint_{\partial\Omega_2^0} k_2 \sigma v (\psi - F) dS. \end{aligned}$$

*es continua como función en  $H^1(\Omega)$ .*

*Demostración.* Sea  $v \in H^1(\Omega)$ , entonces acotando superiormente la función continua  $\sigma$  y las constantes  $k_1, k_2$ , existe una constante  $C_1 > 0$  tal que

$$\begin{aligned} |l(v)| &\leq C_1 \left\{ \sum_{i=1}^2 \left( \iiint_{\Omega_i} |\nabla v| \cdot |\nabla F| dV + \iint_{\partial\Omega_i^-} |v| |\psi - F| dS + \iint_{\partial\Omega_i^+} |v| |\psi - F| dS \right) \right. \\ &\quad \left. + \iint_{\partial\Omega_2^0} |v| |\psi - F| dS \right\} \end{aligned}$$

y de la desigualdad del triángulo,

$$|l(v)| \leq C_1 \left\{ \sum_{i=1}^2 \left( \iiint_{\Omega_i} |\nabla v| |\nabla F| dV + \iint_{\partial\Omega_i^-} |v| |\psi| dS + \iint_{\partial\Omega_i^-} |v| |F| dS + \iint_{\partial\Omega_i^+} |v| |\psi| dS \right. \right. \\ \left. \left. + \iint_{\partial\Omega_i^+} |v| |F| dS \right) + \iint_{\partial\Omega_2^0} |v| |\psi| dS + \iint_{\partial\Omega_2^0} |v| |F| dS \right\}.$$

Por la desigualdad de Schwartz,

$$|l(v)| \leq C_1 \left\{ \left( \iiint_{\Omega} |\nabla v|^2 + |v|^2 dV \right)^{\frac{1}{2}} \left( \iiint_{\Omega} |\nabla F|^2 + |f|^2 dV \right)^{\frac{1}{2}} + \sum_{i=1}^2 \left[ \left( \iint_{\partial\Omega_i^-} |v|^2 dS \right)^{\frac{1}{2}} \right. \right. \\ \left. \left. \left( \left( \iint_{\partial\Omega_i^-} |\psi|^2 dS \right)^{\frac{1}{2}} + \left( \iint_{\partial\Omega_i^-} |f|^2 dS \right)^{\frac{1}{2}} \right) + \left( \iint_{\partial\Omega_i^+} |v|^2 dS \right)^{\frac{1}{2}} \left( \left( \iint_{\partial\Omega_i^+} |\psi|^2 dS \right)^{\frac{1}{2}} + \right. \right. \right. \\ \left. \left. \left. \left( \iint_{\partial\Omega_i^+} |f|^2 dS \right)^{\frac{1}{2}} \right) \right] + \left( \iint_{\partial\Omega_2^0} |v|^2 dS \right)^{\frac{1}{2}} \left( \left( \iint_{\partial\Omega_2^0} |\psi|^2 dS \right)^{\frac{1}{2}} + \left( \iint_{\partial\Omega_2^0} |f|^2 dS \right)^{\frac{1}{2}} \right) \right\}.$$

Pero de acuerdo a (4.1) del Teorema 4.1,

$$\iint_{\partial\Omega_i^-, \partial\Omega_i^+, \partial\Omega_2^0} |v|^2 dS \leq \iint_{\partial\Omega} |v|^2 dS = \|v\|_{L_2(\partial\Omega)} \leq C_3 \|v\|_{H^1(\Omega)}.$$

Por tanto,

$$|l(v)| \leq C_2 \{ \|F\|_{H^1(\Omega)} + \|\psi\|_{L_2(\partial\Omega)} + \|f\|_{L_2(\partial\Omega)} \} \|v\|_{H^1(\Omega)}, \quad (4.12)$$

□

En consecuencia, podemos establecer

**Teorema 4.4.** Sean  $f \in C^1(\partial\Omega_1^0)$  y  $\psi \in L_2(\partial\Omega_2^0)$  entonces la solución débil  $u \in H^1(\Omega)$  del problema (4.4)-(4.6) existe y es única.

*Demostración.* (Existencia) La ecuación (4.9) se puede reescribir como

$$\langle v, \bar{u} \rangle = l(v) \quad (4.13)$$

donde  $\langle v, w \rangle$  es un producto escalar en  $H^1(\Omega)$  que define una norma equivalente a la usual en  $H^1(\Omega)$ , de acuerdo al Lema 4.1. Asimismo, del lema 4.2,  $l(v)$  es un funcional lineal en  $H^1(\Omega)$ . Por tanto, del Teorema de Representación de Riesz, existe una única función  $\bar{u} \in H^1(\Omega)$  tal que la ecuación (4.13) se satisface para toda  $v \in H^1(\Omega)$  con la propiedad de ser terminal en  $\partial\Omega_1^0$ . De (4.13) y la desigualdad (4.12) se sigue

$$\|\bar{u}\|_{H^1(\Omega)} \leq C_2 \{ \|F\|_{H^1(\Omega)} + \|\psi\|_{L_2(\partial\Omega)} + \|f\|_{L_2(\partial\Omega)} \}$$

y como  $u = \bar{u} - F$ ,

$$\|u\|_{H^1(\Omega)} \leq C_3 \{ \|F\|_{H^1(\Omega)} + \|\psi\|_{L_2(\partial\Omega)} + \|f\|_{L_2(\partial\Omega)} \} \quad (4.14)$$

(Unicidad) Sean  $\bar{u}$  y  $\bar{w}$  soluciones de (4.13) con  $\bar{u} = u + F$ ,  $\bar{w} = w + F$  donde sin pérdida de generalidad hemos supuesto la misma extensión  $F \in H^1(\Omega)$  de  $f \in C^1(\partial\Omega_1^0)$ , luego

$$\langle v, \bar{u} \rangle = l(v), \quad \langle v, \bar{w} \rangle = l(v) \quad \text{para todo } v \in H_0^1(\Omega) \text{ terminal en } \partial\Omega_1^0,$$

luego

$$\langle v, \bar{u} - \bar{w} \rangle = 0.$$

Pero por ser  $\langle \cdot, \cdot \rangle$  un producto escalar se sigue que  $\bar{u} - \bar{w} = 0$  y por lo tanto  $u = w$ .  $\square$

### 4.2.3. Formulaci3n del problema directo y del problema inverso

Pasemos ahora a definir con precisi3n el problema directo y el problema inverso

**Definici3n 4.4 (Problema Directo).** Sean  $\psi \in L_2(\partial\Omega_2^0)$  y considere  $u \in H^1(\Omega)$  la soluci3n d3bil del problema de contorno (4.4)-(4.6), con  $f \in C^1(\partial\Omega_1^0)$ . Entonces el problema directo est3 definido por:

$$A: C^1(\partial\Omega_1^0) \rightarrow L_2(\partial\Omega_2^0), \quad f \in L_2(\partial\Omega_1^0) \mapsto u|_{\partial\Omega_2^0}.$$

**Proposici3n 4.1.** Sea  $A$  el operador que define el problema directo. Entonces  $A$  es un operador compacto

*Demostraci3n.* Veamos que el operador que define el problema directo es la composici3n de un operador continuo con un operador compacto.



Sean  $f \in C^1(\partial\Omega_1^0)$ . También considere  $u \in H^1(\Omega)$  la solución débil del problema de contorno (4.4). El operador  $A$  se puede escribir como la composición

$$A: f \in C^1(\Omega_1^0) \xrightarrow{G} u \in H^1(\Omega) \xrightarrow{Tr} u|_{\partial\Omega_2^0}.$$

donde  $u \in H^1(\Omega)$  es la única solución al problema de contorno (4.4)-(4.6). De la desigualdad (4.14), se tiene

$$\|u\| \leq C \{ \|F\|_{H^1(\Omega)} + \|\psi\|_{L_2(\partial\Omega)} + \|f\|_{L_2(\partial\Omega)} \}.$$

pero de acuerdo al Corolario 4.1, desigualdad (4.3) y la obvia desigualdad  $\|f\|_{L_2(\partial\Omega)} \leq \|f\|_{C^1(\partial\Omega_1^0)}$ , se sigue que

$$\|u\| \leq C_1 \{ \|\psi\|_{L_2(\partial\Omega)} + \|f\|_{C^1(\partial\Omega)} \}.$$

De esta última desigualdad se sigue que la aplicación  $G: C^1(\partial\Omega_1^0) \rightarrow H^1(\Omega)$  es continua. Por otro lado, de la desigualdad (4.1) se sigue que la aplicación

$$Tr: u \in H^1(\Omega) \mapsto u|_{\partial\Omega_2^0}$$

es continua y del Teorema 4.3 que es compacta. Por tanto, se concluye que el operador  $A$  es compacto.  $\square$

Ahora que hemos definido el problema directo, podemos definir:

**Definición 4.5 (Problema Inverso).** Sea  $\psi \in L_2(\partial\Omega_2^0)$ . El problema inverso consiste en: dado  $g \in L_2(\partial\Omega_2^0)$  encontrar  $f \in C^1(\partial\Omega_1^0)$  tal que

$$Af = g, \quad \text{con } g = u|_{\partial\Omega_2^0}.$$

**Corolario 4.2.** El problema inverso es un problema mal planteado.

*Demostración.* Se sigue de que el operador que define al problema directo es un operador compacto.  $\square$

#### 4.2.4. Regularización del problema inverso

El método de regularización propuesto consiste en suponer *a priori* cierto tipo de distribución de temperatura en la interface de montaje del electrodo y la placa de carbón. En este trabajo se asume que el perfil  $u(x, y, 0) = T(x, y)$  se aproxima con la expresión polinomial:

$$T(x, y) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 y + a_4 y^2 + a_5 xy. \quad (4.15)$$

donde  $a_0, a_1, \dots, a_5$  son los coeficientes a determinar.

Suponer que la solución tiene esta forma equivale a proyectar la solución sobre un espacio vectorial finito dimensional (*v. gr.* el espacio de polinomios en dos variables de grado  $gr \leq 2$ ). Véase Kirsch, A. [21].

Por lo que, los coeficientes indeterminados se optimizan iterativamente mediante la minimización de la función objetivo:

$$J = \sum_{i(=I)}^{\bar{m}} \sum_{j(=J)}^{\bar{n}} (T_{i,j,Nz} - \bar{T}_{I,J})^2. \quad (4.16)$$

donde  $\bar{T}_{I,J}$  son las mediciones en la cara exterior y  $T_{i,j,Nz}$  denota la solución numérica de la temperatura en el punto del mallado  $(i, j, Nz)$ , véase figura 4.2 .

La minimización de  $J$  se logra usando el método del gradiente conjugado. Puesto que las descripciones generales y otros detalles de este método están disponibles en la literatura relacionada al tema, Hanke, M. [17], Golub, G. *et. al* [15], se discutirá solamente brevemente la construcción de los gradientes conjugados para la regularización del problema inverso.

#### 4.2.5. Construcción de los gradientes conjugados

Basándose en el esquema genérico de gradiente conjugado, Golub, G. *et. al* [15], la actualización de las direcciones conjugadas quedan determinadas por

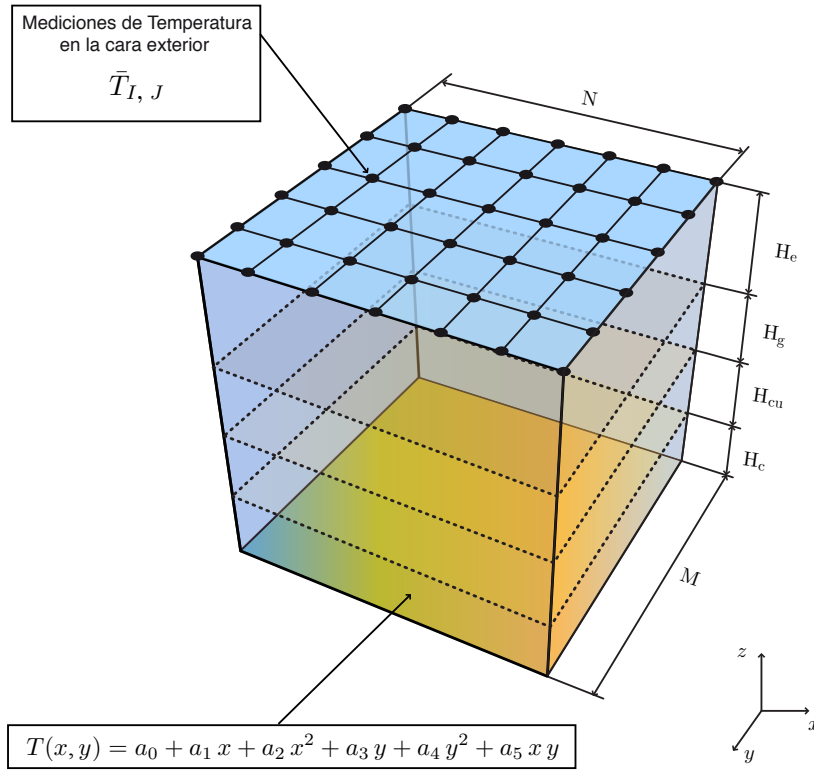
$$a_i^{n+1} = a_i^n - \beta_i \pi_i^{n+1}, \quad i = 0, 1, \dots, 5, \quad (4.17)$$

para las direcciones de búsqueda  $\pi_i^{n+1}$ , expresadas como una combinación lineal del vector modificado y la dirección del gradiente (Hanke, M. [17]), descritas por:

$$\pi_i^{n+1} = \frac{\partial J^n}{\partial a_i} + \gamma_i^n \pi_i^n \text{ con } i = 0, 1, \dots, 5. \quad (4.18)$$

Existen tres fórmulas bien establecidas para el cálculo de los coeficientes  $\gamma_i^n$ : Fletcher-Reeves (Fletcher, R. [14]), Polak-Ribière (Polak, E. *et al.* [28]), Hestenes-Stiefel (Hestenes, M. R. *et al.* [19]). Por simplicidad de operaciones, se considera la fórmula Fletcher-Reeves, es decir:

$$\gamma_i^n = \left[ \frac{(\partial J / \partial a_i)^n}{(\partial J / \partial a_i)^{n-1}} \right]^2 \text{ con } i = 0, 1, \dots, 5.$$



**Fig. 4.2.** Condiciones de frontera para el problema de estado estacionario propuesto.

Finalmente, el tamaño de paso  $\beta_i$  con  $i = 0, 1, \dots, 5$  queda descrito a la iteración  $n + 1$  sustituyendo 4.17 en 4.16

$$J^{n+1} = \sum_{i(=I)}^{\bar{m}} \sum_{j(=J)}^{\bar{n}} (T_{i,j,Nz}^{n+1} (a_0 - \beta_0 \pi_0^{n+1}, \dots, a_5 - \beta_5 \pi_5^{n+1}) - \bar{T}_{I,J})^2.$$

Aplicando una expansión en series de Taylor a la expresión anterior, tenemos

$$J^{n+1} = \sum_{i(=I)}^{\bar{m}} \sum_{j(=J)}^{\bar{n}} \left( (T_{i,j,Nz}^n - \bar{T}_{I,J}) - \left( \beta_0 \pi_0^n \frac{\partial T_{i,j,Nz}}{\partial a_0} + \dots + \beta_5 \pi_5^n \frac{\partial T_{i,j,Nz}}{\partial a_5} \right) + \dots \right)^2,$$

la cual al derivar con respecto a  $\beta_i$  e igualando a cero la expresión resultante, obtenemos

$$\sum_{k=0}^5 \beta_k \pi_k^n \left[ \sum_{i=1}^{\bar{m}} \sum_{j=1}^{\bar{n}} \frac{\partial T_{i,j,Nz}^n}{\partial a_l^n} \frac{\partial T_{i,j,Nz}^n}{\partial a_k} \right] = \sum_{i=1}^{\bar{m}} \sum_{j=1}^{\bar{n}} \left[ \left( T_{i,j,Nz}^n - \bar{T}_{I,J} \frac{\partial T_{i,j,Nz}^n}{\partial a_l^n} \right) \right],$$

con  $l = 0, 1, \dots, 5$ .

(4.19)

Finalmente, el tamaño de paso queda descrito resolviendo el sistema de ecuaciones anterior para  $\beta_i$  con  $i = 0, 1, \dots, 5$ .

Cabe notar que esta forma de minimizar la función objetivo conlleva inherentemente el cálculo de los términos  $\partial T_{i,j,Nz} / \partial a_l$ . Por ello, presentamos un método relativamente sencillo para determinarlo.

**Lema 4.3.** Si  $u(x, y, z) = \theta(a_0, \dots, a_5, x, y)$  entonces  $\frac{\partial \theta}{\partial a_i}$  con  $i = 0, \dots, 5$  satisface el problema de estacionario 3.11. Además, este problema se reescribe como:

$$\nabla^2 \frac{\partial \theta}{\partial a_i} = 0, \quad \text{en } \Omega \quad (4.20)$$

donde  $\Omega = \{(x, y, z) \in \mathbb{R}^3 : 0 < x \leq N, 0 < y \leq M, 0 < z \leq L\}$ . Las condiciones de frontera asociadas al problema de estado estacionario son:

(a) En las caras exteriores:

$$\pm \frac{\partial}{\partial n} \left( \frac{\partial \theta}{\partial a_i} \right) = h \frac{\partial \theta}{\partial a_i} \quad \text{con } i = 0, \dots, 5 \quad (4.6a)$$

donde  $n$  es la normal para cada cara exterior.

(b) En el interfaz entre dos capas sólidas:

$$\frac{\partial \theta_j}{\partial a_i} = \frac{\partial \theta_{j+1}}{\partial a_i} \quad \text{para } i = 1, \dots, 5, \quad (4.6b)$$

$$k_j \frac{\partial}{\partial n_j} \left( \frac{\partial \theta}{\partial a_i} \right) = k_{j+1} \frac{\partial}{\partial n_{j+1}} \left( \frac{\partial \theta}{\partial a_i} \right) \quad \text{para } j = 1, 2, 3, \quad (4.6c)$$

donde  $j$  y  $j + 1$  denotan dos capas contiguas.

**Observación:** Por tanto, basta con resolver numéricamente el nuevo problema estacionario 4.20 para obtener  $\frac{\partial T_{i,j,Nz}}{\partial a_l}$ .

### 4.2.6. Algoritmo del método de regularización

La finalidad de esta sección es la de presentar un algoritmo del método de regularización de forma accesible para una posterior implementación computacional.

#### Algoritmo 4.1

Dado  $\bar{T}_{I,J}$  obtener el ajuste óptimo para los coeficientes  $a_i$  con  $i = 0, 1, \dots, 5$ .

1. Seleccionar la aproximación inicial de  $a_i^0$  con  $i = 0, 1, \dots, 5$ .
2. Resolver numéricamente el problema de estado estacionario con

$$u_0 = a_0^0 + a_1^0 x + a_2^0 x^2 + a_3^0 y + a_4^0 y^2 + a_5^0 x y.$$

3. Extraer  $T_{i,j,Nz}$  con  $i = 1, \dots, NX$  y  $j = 1, \dots, NY$ .

4. Calcular

$$\frac{\partial J}{\partial a_l} = \sum_{i(=I)}^{\bar{m}} \sum_{j(=J)}^{\bar{n}} 2 (T_{i,j,Nz} - \bar{T}_{I,J}) \frac{\partial T_{i,j,Nz}}{\partial a_l}.$$

5. Mientras  $\left\| \frac{\partial J}{\partial a_l} \right\| \geq tol.$ , hacer:

- a) Minimizar

$$J = \sum_{i(=I)}^{\bar{m}} \sum_{j(=J)}^{\bar{n}} (T_{i,j,Nz} - \bar{T}_{I,J})^2.$$

- 1) Calcular  $\frac{\partial T_{i,j,Nz}}{\partial a_l}$  con  $l = 0, 1, \dots, 5$  mediante el Lema 4.3

- 2) Calcular los coeficientes

$$\gamma_i^n = \left[ \frac{(\partial J / \partial a_i)^n}{(\partial J / \partial a_i)^{n-1}} \right]^2 \text{ con } i = 0, 1, \dots, 5.$$

- 3) Calcular las direcciones de búsqueda

$$\pi_i^{n+1} = \frac{\partial J^n}{\partial a_i} + \gamma_i^n \pi_i^n \text{ con } i = 0, 1, \dots, 5.$$

- 4) Calcular los tamaños de paso  $\beta_i$  resolviendo el sistema de ecuaciones 4.19.

b) Actualiza los coeficientes  $a_i$  con  $i = 0, 1, \dots, 5$  usando

$$a_i^{n+1} = a_i^n - \beta_i \pi_i^{n+1}, \quad i = 0, 1, \dots, 5.$$

c) Resolver numéricamente el problema de estado estacionario con

$$u_0 = a_0^{n+1} + a_1^{n+1} x + a_2^{n+1} x^2 + a_3^{n+1} y + a_4^{n+1} y^2 + a_5^{n+1} x y.$$

6. Imprime  $a_i$  con  $i = 0, 1, \dots, 5$ .

#### 4.2.7. Experimentos numéricos

En esta sección, usamos el algoritmo 4.1 para estimar tres perfiles distintos de temperatura con cuatro tipos distintos de solución exacta  $\theta(x, y)$ . Para cada uno de los experimentos numéricos, escogimos un mallado de  $41 \times 41 \times 35$  con una condición de paro del procedimiento iterativo de  $tol = 10^{-5}$ . Asimismo, los datos sintéticos se generaron con una perturbación  $\sigma$  usando la función  $\theta(x, y)$ . Para los distintos perfiles se obtuvieron diferentes aproximaciones a los coeficientes  $a_i$  (con  $i = 0, \dots, 5$ ).

*Ejemplo 4.1*

$$\theta(x, y) = 80 + 10x - 80x^2 + 20y - 80y^2 - 5xy$$

**Tabla 4.1.**

	$\sigma = 0.0$	$\sigma = 0.1$	$\sigma = 0.5$	$\sigma = 1.0$
$a_0$	80.0000	79.8776	79.7583	79.7128
$a_1$	10.0000	9.9724	9.9768	9.9436
$a_2$	-80.0000	-78.5341	-78.3682	-81.1442
$a_3$	20.0000	20.1303	19.9256	19.2377
$a_4$	-80.0000	-81.0541	-72.3711	-80.5173
$a_5$	-5.0000	-5.0006	-5.1789	-4.9172
<i>res.</i>	$1.9398e - 05$	$1.9429e - 05$	$1.9537e - 05$	$1.9691e - 05$

## Ejemplo 4.2

$$\theta(x, y) = 87 + 26x - 95x^2 + 14y - 93y^2 - 7xy$$

Tabla 4.2.

	$\sigma = 0.0$	$\sigma = 0.1$	$\sigma = 0.5$	$\sigma = 1.0$
$a_0$	87.0000	86.6804	85.28173	83.5707
$a_1$	26.0000	27.17086	27.7471	37.5311
$a_2$	-95.0000	-96.0758	-96.2968	-105.4727
$a_3$	14.0000	16.1728	16.9256	24.8637
$a_4$	-93.0000	-93.0763	-95.3959	-103.1254
$a_5$	-7.0000	-6.9888	-7.0426	-7.1376
res.	$1.0629e - 05$	$1.0638e - 05$	$1.0646e - 05$	$1.0659e - 05$

## Ejemplo 4.3

$$\theta(x, y) = 100 + 10x - 30x^2 - 10y + 30y^2 - 15xy$$

Tabla 4.3.

	$\sigma = 0$	$\sigma = 0.1$	$\sigma = 0.5$	$\sigma = 1.0$
$a_0$	100.0000	99.6838	98.2704	96.1820
$a_1$	10.0000	12.0721	20.4707	31.6146
$a_2$	-30.0000	-31.0353	-35.0840	-40.4541
$a_3$	-10.0000	-7.7689	0.6945	11.6723
$a_4$	30.0000	28.8853	24.8133	19.5173
$a_5$	-15.0000	-14.9590	-15.0344	-15.1883
res.	$1.1184e - 05$	$1.1267e - 05$	$1.1371e - 05$	$1.1492e - 05$

Ejemplo 4.4

$$\theta(x, y) = 20 + 15x + 40x^2 - 10y + 30y^2 - 25xy$$

**Tabla 4.4.**

	$\sigma = 0$	$\sigma = 0.1$	$\sigma = 0.5$	$\sigma = 1.0$
$a_0$	20.0000	19.6433	18.2271	16.5704
$a_1$	15.0000	17.1863	25.5120	36.0474
$a_2$	40.0000	38.9246	34.8929	29.7500
$a_3$	-10.0000	-7.7970	0.6738	11.5310
$a_4$	30.0000	28.9221	24.8242	19.5181
$a_5$	-25.0000	-24.9929	-25.0337	-25.1498
res.	$1.4211e - 05$	$1.4391e - 05$	$1.4418e - 05$	$1.4621e - 05$



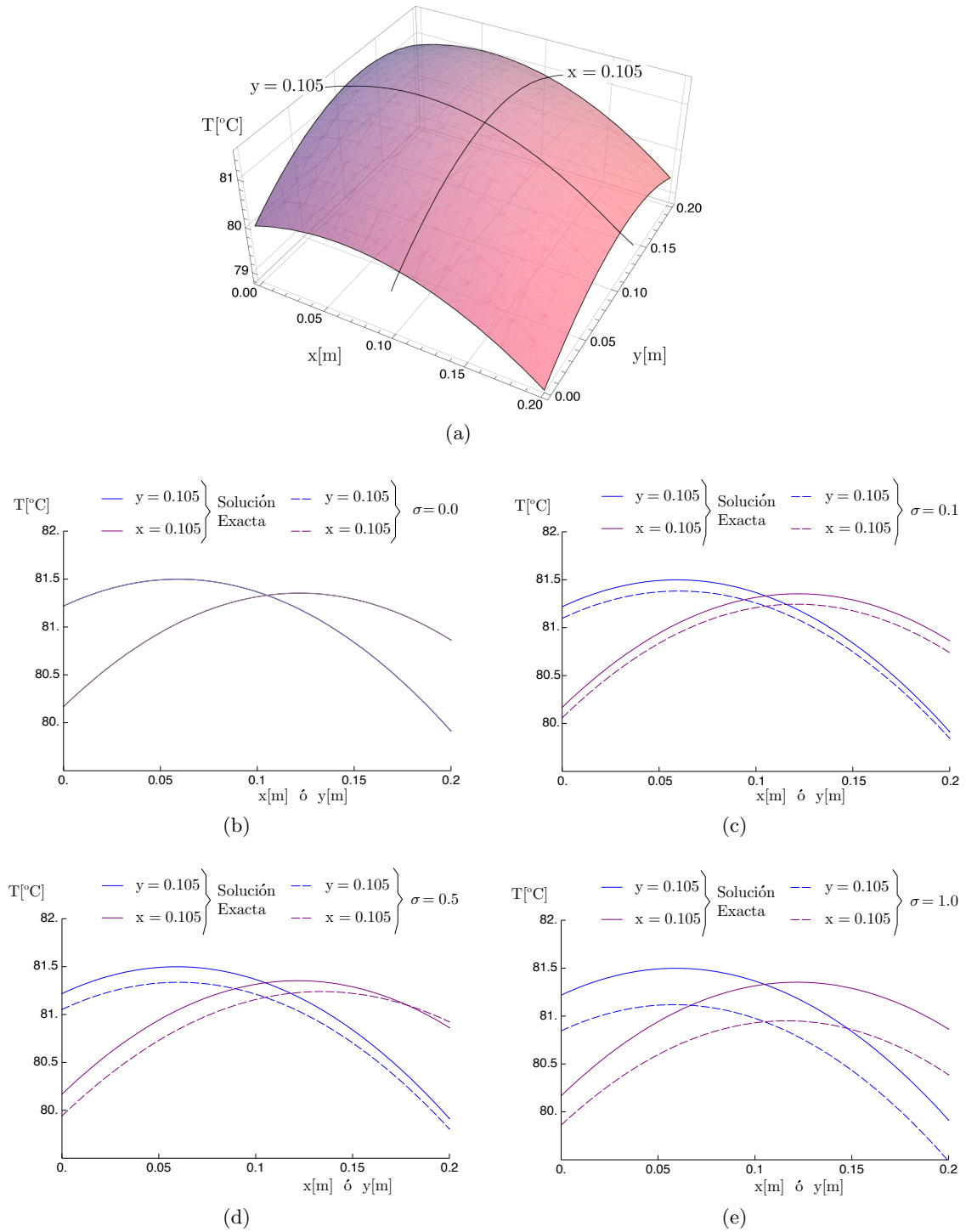
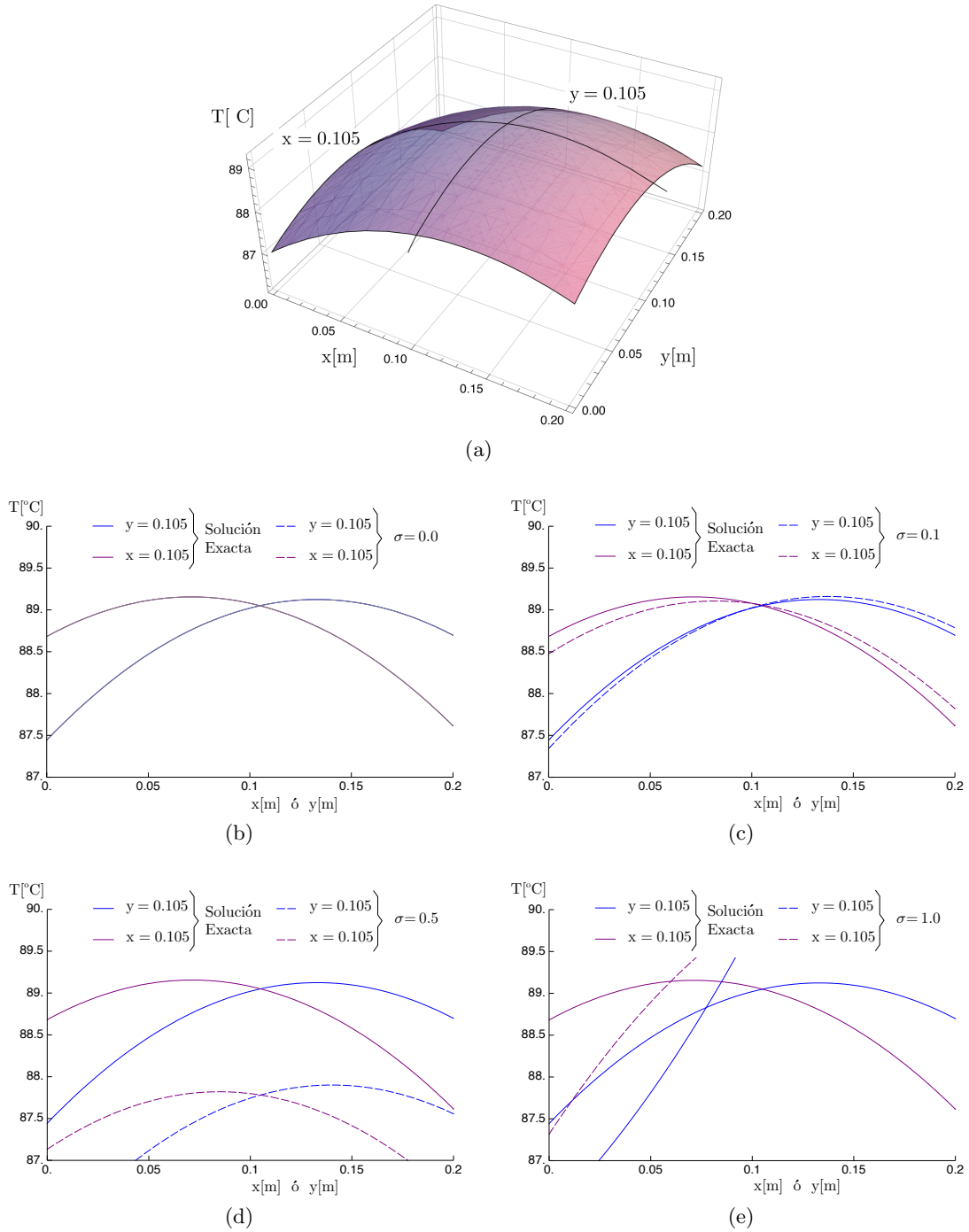


Fig. 4.3. Efectos experimentales sobre la exactitud de la predicción de la temperatura para el ejemplo 4.1.



**Fig. 4.4.** Efectos experimentales sobre la exactitud de la predicción de la temperatura para el ejemplo 4.2.

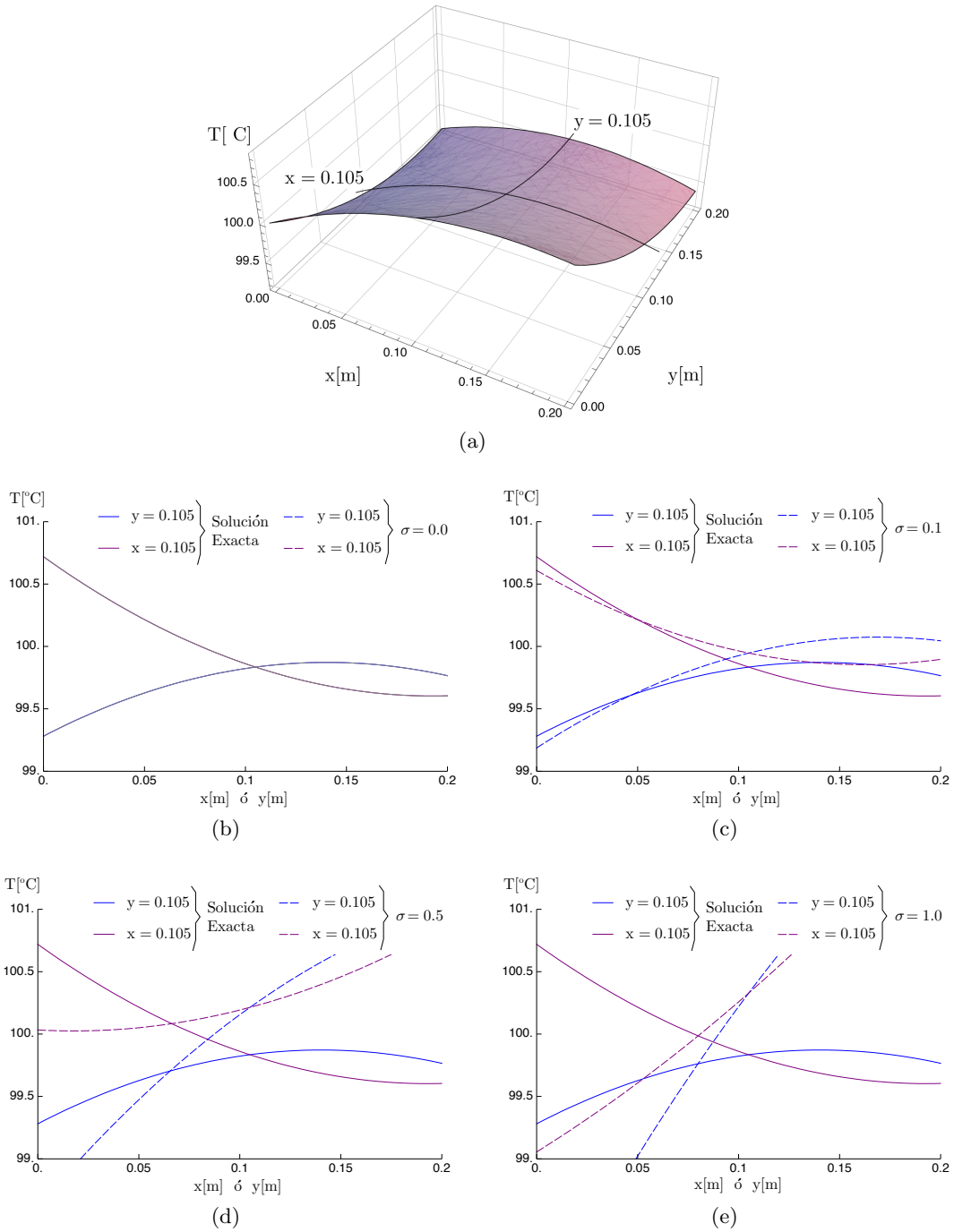


Fig. 4.5. Efectos experimentales sobre la exactitud de la predicción de la temperatura para el ejemplo 4.3.

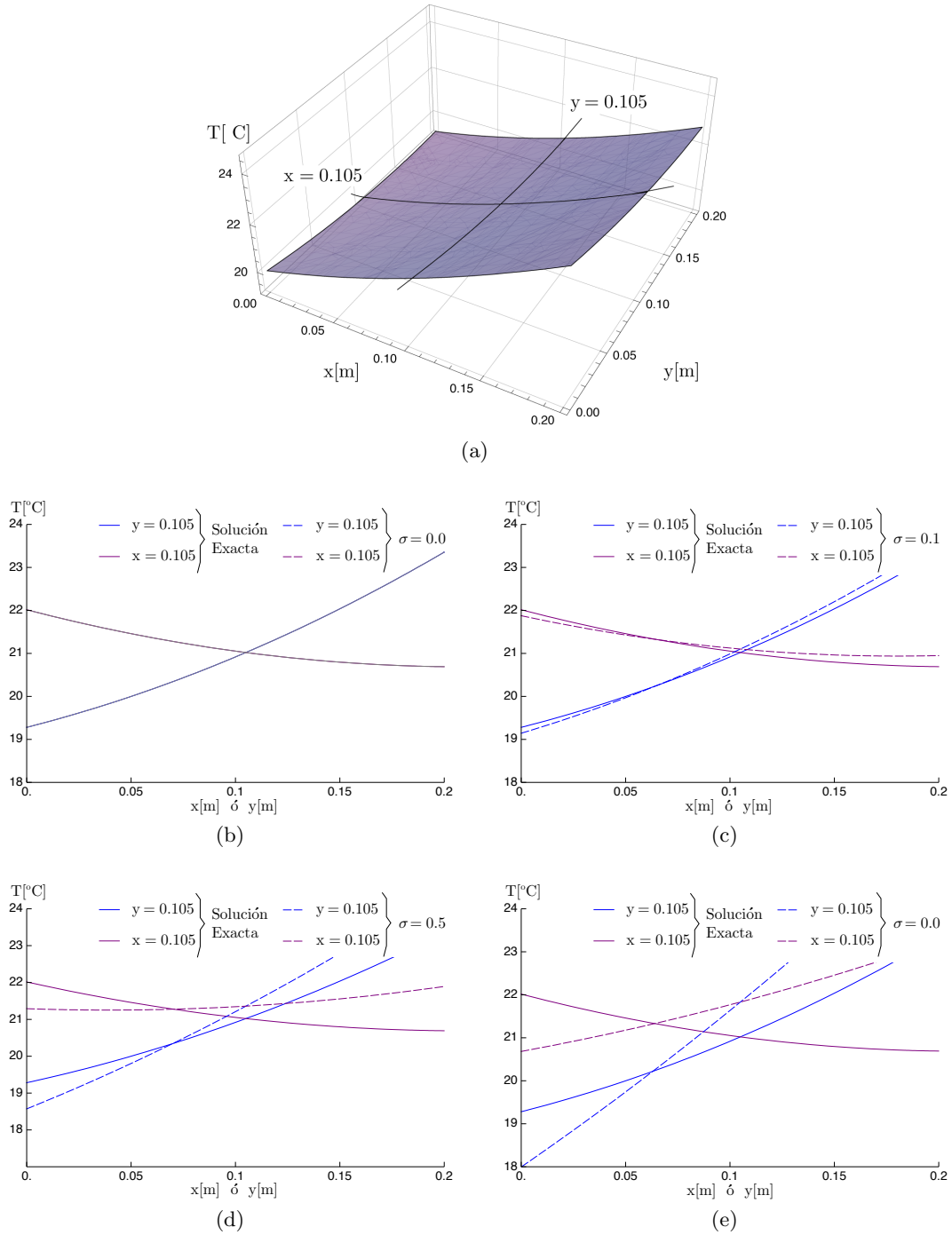


Fig. 4.6. Efectos experimentales sobre la exactitud de la predicción de la temperatura para el ejemplo 4.4.

## Conclusiones y Perspectivas

---

A lo largo de este trabajo hemos planteado un panorama general en la descripción de la tecnología de celdas de combustible. Si bien esta tecnología se vislumbra como una alternativa dentro de la vasta colección de tecnologías alternativas de generación de energía (*e. g.* energía solar, eólica, hidráulica, mareomotriz o geotérmica), aún su precio de manufactura para aplicaciones comerciales resulta elevado en comparación con otras de extracción de energía no renovable. Como consecuencia, su modelado y simulación se utilizan extensivamente como herramientas en instituciones e industria de investigación a través del mundo con el único fin de reducir su costo de producción.

El reciente auge que han tenido las celdas de combustible, se traduce en trabajos que han abordado específicamente el modelado matemático de las llamadas celdas de combustible de membrana de intercambio de protones, PEMFC. La mayoría de éstos, desarrollados a principio y mediados de la década de los 90, presentan escenarios unidimensionales simplificados (1-D). Tal suposición reduce las ecuaciones gobernantes a una forma sencilla en la que se pueden implementar técnicas analíticas o bien numéricas para obtener una solución.

Dado que estos modelos son la base para un modelado bidimensional o tridimensional, su aporte al desarrollo de resultados significativos es de suma importancia. Si bien, los modelos unidimensionales predicen adecuadamente el rendimiento de una celda en regímenes limitados, éstos no lo hacen cuando se consideran regímenes de operación con densidades de corriente reales o considerando fenómenos complejos de transporte de masa (la información sobre el efecto de la geometría sobre el transporte total se ignora). En consecuencia, para entender el efecto en el transporte total en el funcionamiento de la celda de combustible, un modelado bidimensional (o tridimensional), es imprescindible.

Basado en esta premisa, el modelado tridimensional fue adoptado hacia finales de los años noventa y principios del nuevo milenio. En varios de estos trabajos, versiones de variada complejidad de las ecuaciones gobernantes (presentadas en el capítulo dos) fueron resueltas utilizando distintos métodos computacionales.

Sin embargo, aún con los beneficios que un modelado tridimensional puede presentar, muchas de las preguntas sobre el rendimiento siguen sin una respuesta totalmente convincente. No se sabe con certeza cómo afecta el calor generado en el rendimiento de la celda o cuál es la mejor forma de manejar los efectos del calor generado por la reacción química. Los resultados que se tienen, apuntan a un estudio detallado del flujo de calor.

Por tal razón, la implementación de modelos de *estado estacionario* han sido los primeros candidatos para representar una aproximación al flujo de calor en celdas de combustible. En efecto, la hipótesis de considerar un sistema que no varíe con el tiempo tiene sustento en el hecho de que al dejar pasar un tiempo razonable, tenderá a su estado estacionario.

En el capítulo tres se mostraron dos modelos para representar el flujo de calor. El primero exhibe una aproximación del flujo de calor más real al considerar una fuente interna de generación de calor; mientras que el segundo, no. Dado que el propósito de este trabajo es abordar el problema reconstrucción de frontera y su regulación, se tomó el modelo más sencillo que describe la transferencia de calor en un medio de varias capas con capacidades térmicas distintas.

Para este fin, se desarrolla un *resolvidor* numérico al problema directo de transferencia de calor. Éste aproximará la solución al sistema de ecuaciones algebraicas obtenidas al aplicar el método de *diferencias finitas* a la ecuación que describe el modelo usando el método de sobre relajación (SOR). De la literatura en álgebra computacional y análisis numérico es sabido que los métodos iterativos presentan mejores rendimientos en problemas tridimensionales. Por ello y acusando a la simplicidad del algoritmo, se optó en implementar dicho método.

En consecuencia, al aplicar el resolvidor a los datos de la tabla 3.2, se obtuvieron resultados que sugieren que la mayor temperatura se localiza justamente entre la placa de carbón y la placa de cobre (justamente en el final del montaje del electrodo), lo cual es consistente con resultados experimentales, Barbir, F. [2]. Cabe notar que los datos empleados provienen de un problema real. Por lo que, sus implicaciones pueden ser de relevancia a la hora de considerar nuevos materiales con el fin de mejorar el rendimiento

de la celda.

No obstante, el mejoramiento del diseño y de los materiales que constituyen una celda de combustible PEM, no elimina la necesidad de llevar un seguimiento de su temperatura interna. Por lo que, uno de los problemas más importantes que consideran los diseñadores de celdas de combustible es el de poder estimar el perfil de temperatura en las distintas capas que componen una celda de combustible. En este trabajo, abordamos un método basado en las técnicas de regularización de un problema inverso.

La ventaja principal de este método es la de no producir ningún efecto destructivo sobre la estructura de la celda combustible. Sus principales características se resumen a continuación:

1. Se asume que el perfil de temperatura  $T(x, y)$  se aproxima con la expresión polinomial:

$$T(x, y) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 y + a_4 y^2 + a_5 x y.$$

2. Se minimiza la función objetivo:

$$J = \sum_{i(=I)}^{\bar{m}} \sum_{j(=J)}^{\bar{n}} (T_{i,j,Nz} - \bar{T}_{I,J})^2.$$

donde  $\bar{T}_{I,J}$  son las mediciones en la cara exterior y  $T_{i,j,Nz}$  denota la solución numérica de la temperatura en el punto del mallado  $(i, j, Nz)$ .

3. La minimización de  $J$  se logra usando el método del gradiente conjugado. Basándose en el esquema

$$a_i^{n+1} = a_i^n - \beta_i \pi_i^{n+1}, \quad i = 0, 1, \dots, 5,$$

para las direcciones de búsqueda  $\pi_i^{n+1}$ , expresadas como una combinación lineal del vector modificado y la dirección del gradiente, descritas por:

$$\pi_i^{n+1} = \frac{\partial J^n}{\partial a_i} + \gamma_i^n \pi_i^n \text{ con } i = 0, 1, \dots, 5.$$

4. Finalmente, el tamaño de paso  $\beta_i$  con  $i = 0, 1, \dots, 5$  queda descrito resolviendo el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\sum_{k=0}^5 \beta_k \pi_k^n \left[ \sum_{i=1}^{\bar{m}} \sum_{j=1}^{\bar{n}} \frac{\partial T_{i,j,Nz}^n}{\partial a_l^n} \frac{\partial T_{i,j,Nz}^n}{\partial a_k} \right] = \sum_{i=1}^{\bar{m}} \sum_{j=1}^{\bar{n}} \left[ \left( T_{i,j,Nz}^n - \bar{T}_{I,J} \frac{\partial T_{i,j,Nz}^n}{\partial a_l^n} \right) \right],$$

con  $l = 0, 1, \dots, 5$ .

Con el fin de investigar los efectos en las soluciones obtenidas con el método propuesto, se mostraron tres casos con distintas formas de solución exacta. Gracias a los resultados obtenidos nos damos cuenta que la incertidumbre de los datos experimentales (o ruido en la mediciones) juegan un papel preponderante en la predicción de las soluciones. A pesar de ello, el método resulta eficiente al ajustar los datos generados sintéticamente con funciones polinomiales de segundo orden, figuras 4.3 y 4.5. Sin embargo, es de esperar que para datos sintéticos generados con funciones polinomiales de ordenes superiores, las aproximaciones estén alejadas de la solución real (datos generados de forma exacta).

### **Perspectivas**

Las perspectivas que se infieren de este trabajo son:

- mejorar el desempeño de resolutor al problema directo propuesto usando otros métodos numéricos de mayor eficacia y rapidez,
- abordar el problema inverso implementando otra técnica de regularización (*e. g.* regularización de Tikonov),
- o bien, suponer *a priori* una expansión polinomial más compleja para un perfil de temperatura dado.



# Referencias

---

1. Banks, H., Kunisch, K.: *Parameter Estimation Techniques for Distributed Systems*. Birkhauser (1989)
2. Barbir, F.: *PEM Fuel Cells: Theory and Practice*. Elsevier Academic Press (2005)
3. Barnett, B.M., Teagan, W.P.: The role of fuel cells in our energy future. *Journal of Power Sources* **37**, 15–21 (1992)
4. Beck, J.V., Blackwell, B., Clair, C.S.: *Inverse Heat Conduction: Ill-Posed Problems*. Wiley-Interscience (1985)
5. Berning, T., Djilali, N.: Three-dimensional computational analysis of transport phenomena in a pem fuel cell—a parametric study. *Journal of Power Sources* **124**, 440–452 (2003)
6. Bertero, M., Boccacci, P.: *Introduction to Inverse Problems in Imaging*. Taylor & Francis (1998)
7. Cheddie, D., Munroe, N.: Review and comparison of approaches to proton exchange membrane fuel cell modelling. *Journal of Power Sources* **147**, 72–84 (2005)
8. Cheng, C.H., Chang, M.H.: Predictions of internal temperature distribution of pemfc by non-destructive inverse method. *Journal of Power Sources* **139**(115-125) (2005)
9. Colton, D., Kress, R.: *Inverse Acoustic and Electromagnetic Scattering Theory*. SIAM (1998)
10. Demmel, J.W.: *Applied Numerical Linear Algebra*. SIAM (1997)
11. Elman, H.C., Silvester, D.J., Wathen, A.J.: *Finite Elements and Fast Iterative Solvers*. Oxford University Press (2005)
12. Engl, H.W.: *Inverse Problems in Medical Imaging and Non-Destructive Testing*. Springer (1996)
13. Engl, H.W., Rundell, W.: *Inverse Problems in Diffusion Processes*. SIAM (1988)
14. Fletcher, R.: Function minimization by conjugate gradients. *Comp. J.* **7**, 149–154 (1964)
15. Golub, G.H., Loan, C.F.V.: *Matrix Computations*. John Hopkins University Press (1996)
16. Hadamard, J.: Sur les problèmes aux dérivées partielles et leur signification physique. *Princeton University Bulletin* pp. 49–52 (1902)
17. Hanke, M.: *Conjugate gradient type methods for ill-posed problems*. Chapman & Hall (1995)
18. Haslinger, J., Neittaanmäki, P.: *Finite Element Approximation for Optimal Shape Design: Theory and Applications*. John Wiley & Sons Inc (1988)
19. Hestenes, M.R., Stiefel, E.: Methods of conjugate gradients for solving linear systems. *J. Res. Natl. Bur. Stand.* **49**(409-436) (1952)
20. Isakov, V.: *Inverse Problems in Partial Differential Equations*. Springer (2005)
21. Kirsch, A.: *An Introduction to the Mathematical Theory of Inverse Problems*. Springer (1996)
22. Larminie, J., Dicks, A.: *Fuel Cell Systems Explained*, 2 edn. John Wiley & Sons (2000)
23. Li, X.: *Principle of Fuel Cells*. Taylor & Francis (2006)
24. Mathews, J.H., Fink, K.K.: *Numerical Methods Using Matlab*, 4th Edition. Prentice-Hall Inc. (2004)

25. Mijailov, V.P.: Ecuaciones Diferenciales en Derivadas Parciales. MIR (1978)
26. Natterer, F.: The Mathematics of Computerized Tomography. SIAM (2001)
27. O'Hayre, R., Cha, S.W., Colella, W., Prinz, F.B.: Fuel Cells Fundamentals. John Wiley & Sons (2006)
28. Polak, E., Ribière, G.: Note sur la convergence de directions conjuguées. Rev. Francaise Informat Recherche Operationelle **3e Année**(16), 35–43 (1989)
29. Ramm, A.G.: Scattering by Obstacles. Springer (1986)
30. Sivertsen, B.R., Djilali, N.: Cfd-based modelling of proton exchange membrane fuel cells. Journal of Power Sources **141**(1), 65–78 (2004)
31. Spiegel, C.: Modeling and Simulation using Matlab. Academic Press (2008)
32. Standaert, F., Hemmes, K., Woudstra, N.: Analytical fuel cell modeling; non-isothermal fuel cells. Journal of Power Sources **70**(2), 181–199 (1998)
33. Vielstich, W., Lamm, A., Gasteiger, H. (eds.): Handbook of Fuel Cells:. John Wiley & Sons (2003)
34. Vogel, C.R.: Computational Methods for Inverse Problems. SIAM (2002)