



Modelado de una celda de combustible de carbonato fundido mediante el uso de aprendizaje automático

Valeria Ignacia Barra Pradenas

Memoria de Título presentada a la Facultad de Ingeniería de la Universidad de
Concepción para optar al título profesional de Ingeniero Civil Mecánico

Profesores guía:
Dr.- Ing. Cristian Cuevas
Dr.- Ing. (c) Andrés Escalona
Dr.- Ing. Hugo Garcés

Julio 2025
Concepción, Chile

©2025 Valeria Ignacia Barra Pradenas

Se autoriza la reproducción total o parcial, con fines académicos, por cualquier medio o procedimiento,
incluyendo la cita bibliográfica del documento

Agradecimientos

Quisiera agradecer a mi familia quienes me han apoyado a lo largo de toda mi vida de diferentes formas y se han sacrificado para que yo esté aquí ahora. A mi madre Flor, quien durante toda esta etapa universitaria esperaba cada día mi llamada para saber si estaba bien pese a estar lejos de casa, dándome palabras de aliento cada vez que lo necesité. A mi padre Sergio, quien, a la hora que fuera, siempre estuvo dispuesto a ir a buscarme, sin importar la distancia. A mi hermana Yasna, quien, como buena hermana mayor, nunca dejo de verme pequeña y mostró constantemente su preocupación por mí. Y a mi abuela, mi Lalay, quien, pese a ya no estar aquí, sé que está orgullosa. Muchas gracias.

Resumen ejecutivo

Dentro de este estudio se aborda el modelado de una celda de combustible de carbonato fundido (MCFC) mediante la implementación de técnicas de aprendizaje automático, con énfasis en modelos híbridos que incorporan conocimiento físico en el proceso de entrenamiento. Las MCFC representan una tecnología de generación de energía con alta eficiencia y bajo impacto ambiental, gracias a su capacidad para operar con diferentes tipos de combustibles ricos en hidrógeno y su integración en esquemas de cogeneración o captura de CO₂. Sin embargo, su modelado tradicional mediante modelos físicos suele requerir una caracterización detallada del sistema, elevados tiempos de desarrollo y una alta especialización técnica.

Frente a este desafío, se propone el uso de redes neuronales artificiales (ANN) como alternativa para modelar el comportamiento de una MCFC a partir de datos experimentales. Además, se implementó un modelo de redes neuronales guiadas por la física (PGNN), el cual incorpora parte de la física del sistema mediante una función de pérdida modificada en la ANN. Este enfoque busca mejorar la generalización fuera del dominio de entrenamiento, superando las limitaciones de modelos basados solo en datos.

Durante el desarrollo del trabajo se exploraron diferentes configuraciones de red, y luego se comparó el desempeño de una ANN tradicional, con regularización y la PGNN, mediante métricas como MSE, MAE y R², evaluando tanto el desempeño dentro del dominio de entrenamiento como su capacidad predictiva en condiciones no vistas.

Los resultados exponen que el modelo PGNN mejora la capacidad de extrapolación fuera del dominio (R² = 0.7881), reduciendo el sobreajuste y logrando un mejor balance entre precisión y generalización (R² = 0.9591 en entrenamiento) en comparación con los modelos basados solo en datos (R² = 0.9854 en entrenamiento y R² = -3.5138 fuera del dominio) o con regularización de los pesos de la red neuronal (R² = 0.9504 en entrenamiento y R² = 0.1291 fuera del dominio), destacando la utilidad de integrar conocimiento físico en la función de pérdida para optimizar el desempeño del algoritmo. También, se comenta su utilidad frente a otros tipos de modelos, que no son de aprendizaje automático, para disminuir el costo computacional asociado a hacer el modelo y obtener las predicciones.

Finalmente, se discute la proyección de este tipo de esquemas en contextos industriales reales, como en plantas piloto, sistemas de cogeneración y sistemas de captura de carbono acoplados a fuentes de emisión. Como trabajo futuro se plantea explorar modelos PINN más sofisticados, los cuales integran dinámicas temporales del sistema mediante el uso de datos secuenciales.

Este estudio busca así contribuir al avance del modelado de celdas de combustible mediante herramientas basadas en datos y conocimiento físico, sentando las bases para soluciones más eficientes, escalables y sostenibles en la transición hacia tecnologías energéticas limpias.

Palabras clave: MCFC, ANN, PGNN.

Abstract

This study addresses the modeling of a molten carbonate fuel cell (MCFC) through the implementation of machine learning techniques, with an emphasis on hybrid models that incorporate physical knowledge into the training process. MCFCs represent a high-efficiency, low-emission power generation technology due to their ability to operate with various hydrogen-rich fuels and their integration into cogeneration or CO₂ capture systems. However, traditional modeling using physical models often requires detailed system characterization, lengthy development times, and high technical expertise.

To address this challenge, the use of artificial neural networks (ANN) is proposed as an alternative for modeling the behavior of an MCFC based on experimental data. In addition, a physics-guided neural network (PGNN) model was implemented, which incorporates part of the system's physics through a modified loss function in the ANN. This approach aims to improve generalization beyond the training domain, overcoming the limitations of purely data-driven models.

During the study, different network configurations were explored, and the performance of a traditional ANN, an ANN with regularization, and the PGNN was compared using metrics such as MSE, MAE, and R², evaluating both in-domain performance and predictive capacity under unseen conditions.

The results show that the PGNN model improves extrapolation capability outside the training domain (R² = 0.7881), reduces overfitting, and achieves a better balance between accuracy and generalization (R² = 0.9591 in training) compared to purely data-driven models (R² = 0.9854 in training and R² = -3.5138 out of domain) or models with weight regularization (R² = 0.9504 in training and R² = 0.1291 out of domain). These results highlight the value of integrating physical knowledge into the loss function to optimize algorithm performance. The study also discusses its usefulness compared to other non-machine learning models in reducing the computational cost associated with modeling and prediction.

Finally, the potential application of such frameworks in real industrial contexts is discussed, such as in pilot plants, cogeneration systems, and carbon capture systems coupled to emission sources. As future work, the study proposes exploring more sophisticated PINN models, which incorporate the system's temporal dynamics using sequential data.

This study thus seeks to contribute to the advancement of fuel cell modeling through data- and physics-based tools, laying the groundwork for more efficient, scalable, and sustainable solutions in the transition toward clean energy technologies.

Keywords: MCFC, ANN, PGNN.

Contenidos

| | |
|--|-----------|
| Lista de Figuras | 1 |
| Lista de Tablas..... | 4 |
| Nomenclatura | 5 |
| 1 Introducción | 7 |
| 1.1 Contexto | 7 |
| 1.2 Estado del arte..... | 10 |
| 1.3 Hipótesis..... | 17 |
| 1.4 Objetivos..... | 17 |
| 1.4.1 Objetivo general..... | 17 |
| 1.4.2 Objetivos específicos | 17 |
| 1.5 Metodología..... | 18 |
| 2 Marco teórico..... | 20 |
| 2.1 Definiciones | 20 |
| 2.1.1 Celdas de combustible de carbonato fundido..... | 20 |
| 2.1.2 Modelado de celdas de combustible | 21 |
| 2.1.3 Redes neuronales artificiales..... | 22 |
| 2.1.4 PINN | 25 |
| 2.1.5 PGNN..... | 27 |
| 2.2 Ecuaciones utilizadas en las redes neuronales | 28 |
| 2.2.1 Preprocesamiento de los datos..... | 28 |
| 2.2.2 Métricas de evaluación de desempeño | 28 |
| 2.2.3 Funciones de pérdida para modelo PGNN | 29 |
| 3 Instrumentación y métodos | 30 |
| 3.1 Descripción del banco de ensayos | 30 |
| 3.2 Descripción de los ensayos realizados | 31 |
| 3.3 Variables medidas en los ensayos | 31 |
| 3.4 Diseño de la solución | 35 |
| 3.4.1 Algoritmo de ANN para datos del experimento 1 | 35 |
| 3.4.2 Algoritmo de ANN para todo el set de datos | 37 |
| 3.4.3 Algoritmo de PGNN para todo el set de datos..... | 37 |
| 3.4.4 Modelos sin semilla | 38 |
| 4 Resultados..... | 39 |
| 5 Conclusiones..... | 53 |

| | |
|---|-----------|
| Referencias..... | 57 |
| Anexos..... | 62 |
| Anexo 1: Modelo para datos experimento 1 | 62 |
| Anexo 2: Modelo para datos de todos los experimentos | 64 |
| Anexo 3: Gráficas obtenidas con los distintos modelos según su función de pérdida total para los datos de entrenamiento y prueba | 69 |
| Anexo 4: Evaluación estadística de desempeño y robustez de los modelos | 79 |

Lista de Figuras

| | |
|--|----|
| Figura 1: Emisión de gases de efecto invernadero por sector entre enero del 2021 y febrero del 2025 [2] | 7 |
| Figura 2: Costo nivelado de hidrógeno verde en Chile desde el 2020 hasta su proyección al 2050 (USD/kg H ₂) [7] | 8 |
| Figura 3: Esquema y proceso de trabajo de una MCFC [13] | 9 |
| Figura 4: Modelo de predicción de SOFC..... | 11 |
| Figura 5: Comparación de rendimiento entre el modelo básico y el optimizado: a) Curva de polarización, b) Curva de densidad de potencia [26] | 12 |
| Figura 6: Diagrama de flujo para el entrenamiento, prueba y validación del modelo de ANN [28] | 12 |
| Figura 7: Curva de polarización tras el proceso de entrenamiento del modelo de MCFC basado en una ANN de estructura 15-4-1 [30] | 13 |
| Figura 8: Valor absoluto del error de la densidad de corriente predicha por ambos modelos bajo diferentes estructuras de canales [32] | 14 |
| Figura 9: Estructura de la PINN utilizada en la predicción del voltaje de salida de la PEMFC [33] | 14 |
| Figura 10: Concepto general de la implementación del modelo en Aspen HYSYS [37] | 16 |
| Figura 11: Componentes de una MCFC [14] | 20 |
| Figura 12: Modelado clásico de una curva de polarización [39] | 21 |
| Figura 13: Ejemplo de ANN utilizada para modelar una SOFC [26]..... | 22 |
| Figura 14: Funciones de activación y sus derivadas [42] | 23 |
| Figura 15: Ejemplo de búsqueda de malla en un espacio con dos hiperparámetros [44]..... | 24 |
| Figura 16: Bloques de construcción de una PINN [45]..... | 26 |
| Figura 17: Celda única MCFC usada en pruebas [51] | 30 |
| Figura 18: Instalación de prueba MCFC [51] | 31 |
| Figura 19: Histogramas valores parámetros de a) voltaje, b) H ₂ (entrada ánodo), c) CO ₂ (entrada ánodo), y d) O ₂ (entrada cátodo) para datos dentro del dominio | 34 |
| Figura 20: Histogramas valores parámetros de a) voltaje, b) H ₂ (entrada ánodo), c) CO ₂ (entrada ánodo), y d) O ₂ (entrada cátodo) para datos fuera del dominio | 35 |
| Figura 21: Marco de modelado para la SVC | 36 |
| Figura 22: Marco de modelación de ANN para datos experimento 1 | 37 |

| | |
|--|----|
| Figura 23: Marco de modelación para PGNN para todos los datos..... | 38 |
| Figura 24: Evolución del error para diferentes modelos dependiendo de la función de pérdida utilizada | 40 |
| Figura 25: Evolución del error de los elementos que componen la función de pérdida para el Caso 3 (PGNN) | 41 |
| Figura 26: Comparativa entre los valores de voltaje experimentales y predichos para los datos fuera del dominio con el modelo de a) Caso 1, b) Caso 2, y c) Caso 3..... | 42 |
| Figura 27: Histogramas del error residual para los datos fuera del dominio con el modelo de a) Caso 1, b) Caso 2, y c) Caso 3..... | 43 |
| Figura 28: Curvas de polarización para valores experimentales y predichos de los datos fuera del dominio con el modelo de a) Caso 1, b) Caso 2, y c) Caso 3 | 45 |
| Figura 29: Curvas de potencia para valores experimentales y predichos de los datos fuera del dominio con el modelo de a) Caso 1, b) Caso 2, y c) Caso 3..... | 46 |
| Figura 30: Curvas de rendimiento para valores experimentales y predichos de los datos fuera del dominio con el modelo de a) Caso 1, b) Caso 2, y c) Caso 3 | 47 |
| Figura 31: Diagramas de cajas y bigotes para las métricas a) MSE, b) MAE, y c) R2, y distintos modelos según su función de pérdida total (datos de entrenamiento)..... | 48 |
| Figura 32: Diagramas de cajas y bigotes para las métricas a) MSE, b) MAE, y c) R2, y distintos modelos según su función de pérdida total (datos de prueba) | 49 |
| Figura 33: Diagramas de cajas y bigotes para las métricas a) MSE, b) MAE, y c) R2, y distintos modelos según su función de pérdida total (datos fuera del dominio) | 50 |
| Figura 34: Curvas de polarización clases reales y predichas | 62 |
| Figura 35: Curvas de polarización por clase para datos reales y predichos | 63 |
| Figura 36: Comparativa entre los valores de voltaje experimentales y predichos..... | 64 |
| Figura 37: Curvas de polarización para valores experimentales y predichos de los datos de a) entrenamiento y b) prueba | 65 |
| Figura 38: Curvas de potencia para valores experimentales y predichos de los datos de a) entrenamiento y b) prueba | 66 |
| Figura 39: Curvas rendimiento de la celda para valores experimentales y predichos de los datos de a) entrenamiento y b) prueba | 67 |
| Figura 40: Valores de voltaje experimentales y predichos para los datos fuera del dominio .. | 68 |
| Figura 41: Curvas de polarización para valores experimentales y predichos de los datos fuera del dominio | 68 |

| | |
|---|----|
| Figura 42: Comparativa entre los valores de voltaje experimentales y predichos para los datos de entrenamiento con el modelo de a) Caso 1, b) Caso 2, y c) Caso 3 | 69 |
| Figura 43: Comparativa entre los valores de voltaje experimentales y predichos para los datos de prueba con el modelo de a) Caso 1, b) Caso 2, y c) Caso 3 | 70 |
| Figura 44: Histogramas del error residual para los datos de entrenamiento con el modelo de a) Caso 1, b) Caso 2, y c) Caso 3..... | 71 |
| Figura 45: Histogramas del error residual para los datos de prueba con el modelo de a) Caso 1, b) Caso 2, y c) Caso 3..... | 72 |
| Figura 46: Curvas de polarización para valores experimentales y predichos de los datos de entrenamiento con el modelo de a) Caso 1, b) Caso 2, y c) Caso 3 | 73 |
| Figura 47: Curvas de polarización para valores experimentales y predichos de los datos de prueba con el modelo de a) Caso 1, b) Caso 2, y c) Caso 3..... | 74 |
| Figura 48: Curvas de potencia para valores experimentales y predichos de los datos de entrenamiento con el modelo de a) Caso 1, b) Caso 2, y c) Caso 3 | 75 |
| Figura 49: Curvas de potencia para valores experimentales y predichos de los datos de prueba con el modelo de a) Caso 1, b) Caso 2, y c) Caso 3 | 76 |
| Figura 50: Curvas de rendimiento para valores experimentales y predichos de los datos de entrenamiento con el modelo de a) Caso 1, b) Caso 2, y c) Caso 3 | 77 |
| Figura 51: Curvas de rendimiento para valores experimentales y predichos de los datos de prueba con el modelo de a) Caso 1, b) Caso 2, y c) Caso 3..... | 78 |
| Figura 52: Diagramas de cajas y bigotes de las métricas a) MSE, b) MAE, y c) R2 para los datos dentro del dominio..... | 79 |
| Figura 53: Diagramas de cajas y bigotes de las métricas a) MSE, b) MAE, y c) R2 para los datos fuera del dominio con los modelos del Caso 2 y Caso 3..... | 80 |

Lista de Tablas

| | |
|---|----|
| Tabla 1: Comparación entre modelos PGNN y PINN | 27 |
| Tabla 2: Tabla resumen para las variables de los datos dentro del dominio (entrenamiento y prueba) | 32 |
| Tabla 3: Tabla resumen para las variables de los datos fuera del dominio | 33 |
| Tabla 4: Arquitectura modelo PGNN | 39 |
| Tabla 5: Valores de los pesos para cada término utilizado en la función de pérdida total..... | 39 |
| Tabla 6: Errores para diferentes modelos (dependiendo de la función de pérdida utilizada) bajo diferentes métricas de evaluación | 40 |
| Tabla 7: Valor medio y varianza del error residual para cada caso..... | 44 |
| Tabla 8: Resumen diagramas de cajas y bigotes de los distintos modelos para los datos fuera del dominio | 51 |
| Tabla 9: Medias e intervalos de confianza (95%) para las métricas de evaluación de los distintos modelos para los datos fuera del dominio..... | 52 |
| Tabla 10: Comparación de errores en modelo hecho en Aspen HYSYS y en modelo PGNN bajo diferentes métricas de evaluación | 52 |
| Tabla 11:Arquitectura modelo ANN para datos experimento 1 | 62 |
| Tabla 12: Errores del modelo ANN (experimento 1) bajo diferentes métricas de evaluación.. | 63 |
| Tabla 13: Arquitectura modelo ANN para datos de todos los experimentos | 64 |
| Tabla 14: Errores del modelo ANN (todos los datos) bajo diferentes métricas de evaluación | 64 |
| Tabla 15: Errores del modelo ANN (todos los datos) para un set de datos fuera del dominio . | 67 |
| Tabla 16: Medias e intervalos de confianza (95%) para las métricas de evaluación de los distintos modelos para los datos de entrenamiento | 81 |
| Tabla 17: Medias e intervalos de confianza (95%) para las métricas de evaluación de los distintos modelos para los datos de prueba | 81 |

Nomenclatura

| | |
|---------------|---|
| b | : vector de sesgo |
| B | : operador indicador de condiciones iniciales arbitrarias o de contorno |
| E | : voltaje, V |
| \mathcal{F} | : operador diferencial no lineal |
| f | : función identificadora de datos del problema |
| F | : constante de Faraday, C/mol |
| FU | : factor de utilización de combustible |
| g | : función de contorno |
| h | : salida capa oculta |
| i | : densidad de corriente, i/cm ² |
| \mathcal{L} | : pérdida |
| MAE | : error absoluto medio |
| MSE | : error cuadrático medio |
| n | : cantidad de muestras |
| p | : presión parcial, bar |
| r | : resistencia, Ω |
| R | : constante de los gases ideales, J/mol/K |
| R^2 | : coeficiente de determinación |
| T | : temperatura, K |
| u | : solución desconocida |
| W | : matriz de pesos de las capa |
| x | : variables de entrada |
| y | : variable objetivo |
| z | : vector de coordenadas espacio-tiempo |

Subíndices

| | |
|----------------|--------------------------------------|
| 1 | : iónica interna específica del área |
| 2 | : electrónica específica del área |
| act | : activación |
| an | : ánodo |
| B | : condiciones de borde |
| c1 | : capa oculta 1 |
| c2 | : capa oculta 2 |
| ca | : cátodo |
| con | : concentración |
| d | : datos conocidos |
| data | : data |
| \mathcal{F} | : ecuación diferencial |
| FC | : celda de combustible |
| j | : número de la muestra |
| max | : máximo |
| O ₂ | : oxígeno |
| ohm | : óhmicas |
| phys | : física |
| pred | : predicha |
| real | : real |

reg : regularización de los pesos de la red neuronal
sal : capa de salida
scaled : escalada
total : total
x : variables de entrada

Símbolos griegos

γ : pérdida, V
 κ : parámetros relacionados a la física
 λ : peso de la pérdida
 μ : media de la muestra
 ω : pesos de la red neuronal
 Ω : dominio
 σ : desviación estándar de la muestra
 θ : vector parámetros desconocidos de la red neuronal
 ϑ : función de activación no lineal

1 Introducción

1.1 Contexto

En la actualidad, industrias de todo tipo han contribuido al aumento de las emisiones de carbono en la atmósfera, lo cual se ha convertido en un problema para los países en vías del desarrollo al ir de la mano con el calentamiento global y el cambio climático [1]. Uno de los principales sectores involucrados en lo anterior es el energético, ver Figura 1, específicamente los relacionados con la producción de energía mediante combustibles fósiles, tales como el gas natural (GN), el carbón, entre otros. Esto ha hecho que diferentes entidades traten de combatir el problema a través de energías renovables.

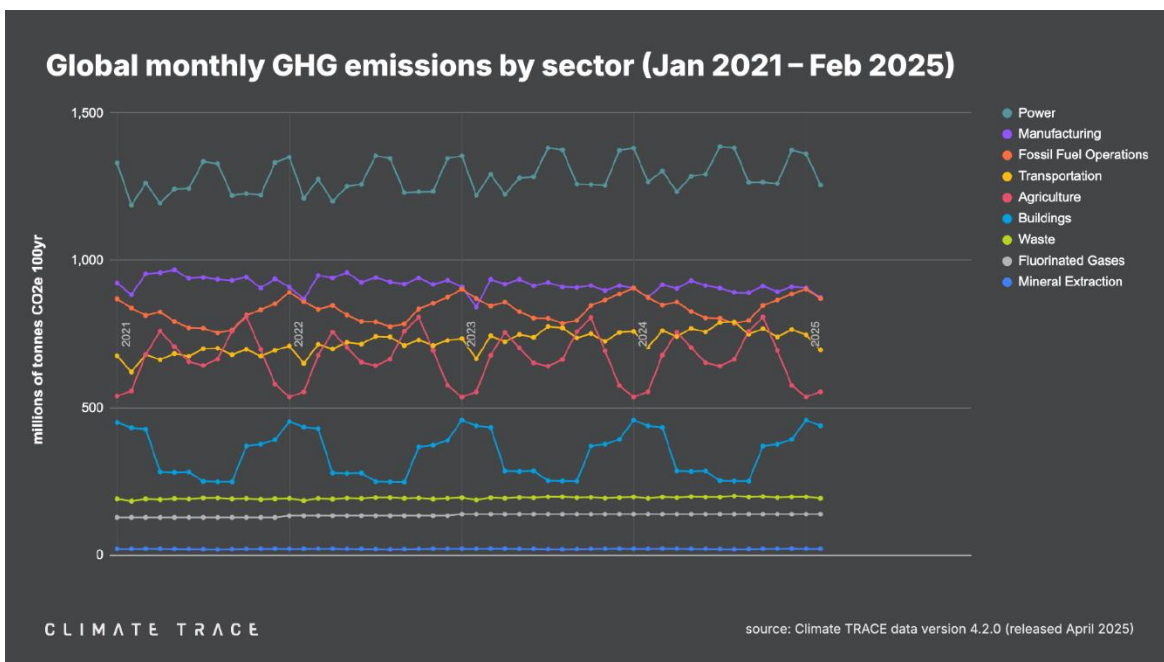


Figura 1: Emisión de gases de efecto invernadero por sector entre enero del 2021 y febrero del 2025 [2]

Dentro de los últimos años, Chile ha desarrollado diferentes planes para darle freno a las emisiones, tales como la Planificación energética de largo plazo que involucra 3 escenarios, la recuperación lenta post COVID considerando su impacto económico y social, la carbono neutralidad al 2050 y la transición energética acelerada a alternativas verdes [3].

Las energías renovables, en general, presentan desventajas, tales como que se encuentran lejos de los sitios de demanda, lo que dificulta su transporte, o que, la cantidad de electricidad generada no necesariamente coincide con la demanda, lo cual ha llevado al país a desarrollar proyectos de almacenamiento energético, que involucran el uso de baterías de iones de litio [4] [5], baterías de fosfato de hierro y litio [6], electrólisis y almacenamiento de hidrógeno, entre otros. La Estrategia nacional del hidrógeno verde (H2V) propone la generación de hidrógeno, para su uso como vector energético, a partir de la electrólisis del agua usando la energía eléctrica limpia. Considerando el alto potencial energético renovable (1800+ GW, lo cual es aproximadamente a 70 veces la demanda en Chile) dado por la maduración acelerada de los sectores solares y eólicos en el país, existe

la ventaja de contar con un H2V competitivo a nivel doméstico e internacional, lo que va asociado a los bajos costos en producción en comparación a otras naciones [7]. En la Figura 2 se presenta un gráfico que relaciona el costo nivelado de producción de hidrógeno verde según la zona en el país y su proyección hasta el 2050. Al hablar de vector energético se hace referencia a poder almacenar la energía, para luego, de forma controlada poder transformarla. Una tecnología que hace posible esto son las celdas de combustible (FC).



Figura 2: Costo nivelado de hidrógeno verde en Chile desde el 2020 hasta su proyección al 2050 (USD/kg H2) [7]

El funcionamiento de las FC se basa en la transformación de energía química de un combustible (como puede ser hidrógeno u otro) a energía eléctrica y térmica mediante una reacción redox. Las celdas de combustible tienen aplicaciones a nivel residencial, industrial y en electromovilidad [8].

A través de las curvas de polarización se puede caracterizar el comportamiento de estos dispositivos, para así poder representar las características de voltaje y potencia en función de la densidad de corriente y describir las pérdidas existentes en el sistema, además, se puede determinar el punto óptimo para su operación al identificar el punto de máxima potencia.

Las curvas mencionadas anteriormente se pueden obtener experimentalmente, sin embargo, este proceso suele ser costoso y más lento de lo esperado. Además, no siempre es posible identificar con claridad cómo interactúan todas las variables involucradas para generar los resultados observados. En este contexto, herramientas como el aprendizaje automático (ML, por sus siglas en inglés) resultan especialmente atractivas para predecir el comportamiento de las celdas, ya que permiten realizar simulaciones en cuestión de segundos, en contraste con otros métodos que requieren de un tiempo más prolongado.

El ML es un método que hace que sistemas puedan adquirir conocimientos mediante datos de entrenamiento y así automatizar la creación de modelos que resuelvan problemas específicos [9]. Este también cuenta con las ventajas de facilitar el desarrollo de diseño y optimización de las FC, su implementación a sistemas de control, en la predicción y diagnóstico de fallas, entre otras [10].

Esta disciplina ha sido utilizada ampliamente con los fines antes mencionados, ya sea para celdas de combustible de membrana de intercambio de protones (PEMFC), las cuales se caracterizan por funcionar a bajas temperaturas, tener una alta eficiencia (40-60%) y que sus reactantes sean solo hidrógeno y oxígeno, teniendo como producto agua [11], celdas de óxido sólido (SOFC), que operan a temperaturas elevadas proporcionando flexibilidad respecto a los tipos de combustibles que pueden ser utilizados [12], entre otras. Sin embargo, no existe una cantidad considerable de estudios que apliquen técnicas de ML a celdas de combustible de carbonato fundido (MCFC), que, a diferencia de otros tipos de celda de media y alta temperatura, su electrolito está en estado líquido y utiliza un flujo constante de CO_2 para producir la reacción electroquímica lo que implica que puede usar diversas composiciones de gases tanto en el cátodo como en el ánodo.

Las MCFC son dispositivos electroquímicos capaces de generar electricidad a partir de un combustible rico en hidrógeno. En la Figura 3 se presenta un esquema del proceso de trabajo de este tipo de FC, donde el cátodo es alimentado con una mezcla de oxígeno y dióxido de carbono, que reacciona para formar CO_3^{2-} , el cual atraviesa el electrolito, compuesto por carbonatos alcalinos fundidos, para reaccionar con el combustible del ánodo, en este caso hidrógeno, produciendo así agua y CO_2 . Tomando en cuenta lo anterior, este tipo de celda necesita de CO_2 para su operación, el cual puede ser extraído del ambiente o de gases de combustión externos.

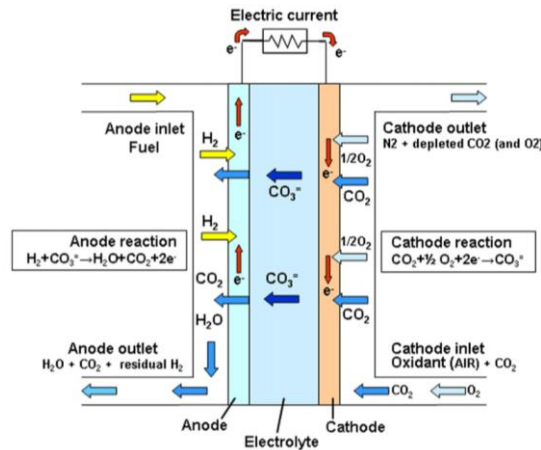


Figura 3: Esquema y proceso de trabajo de una MCFC [13]

El combustible que utilizan, como se mencionó anteriormente, puede ser hidrógeno lo que hace que logre una mejor eficiencia, pero también puede trabajar con hidrocarburos, como el gas natural, gas licuado de petróleo, amoníaco, metanol, diferentes tipos de gas de síntesis y hasta monóxido de carbono, tratándolos a través de un proceso de reformado interno para producir hidrógeno y CO [14], de modo que no se limita a ese único tipo de fuente de energía a diferencia de las PEMFC.

Llama la atención su uso en comparación a otros tipos de celda, ya que es uno de los pocos dispositivos que están disponibles en la escala de MW [15], y que capturan emisiones de CO₂ en hasta un 90% [16] [17] a la par de que producen la energía eléctrica y térmica [18].

Sin embargo, presentan desventajas tales como problemas de degradación en la matriz de la celda relacionados al uso de aluminato de litio [19] y a las temperaturas de operación que producen escenarios desfavorables para la durabilidad de la pila, una vida útil caracterizada por una tasa de caída de voltaje superior al 10% [20], además de que son dependientes de tener una fuente de CO_2 , lo que excluye su uso en aplicaciones donde solo se puede alimentar a la celda con hidrógeno [21].

Tomando en consideración lo anterior, resulta de interés ahondar en profundidad en los potenciales usos de las MCFC, y como, con ayuda de herramientas de ML, disminuir las brechas asociadas a la predicción de datos sobre el comportamiento de este tipo de celdas y al costo computacional que significa la modelación de ellas. Es por ello, que en colaboración con los datos experimentales aportados por el instituto térmico de la Universidad Politécnica de Varsovia a través del profesor Jaroslaw Milewski, se usará el aprendizaje automático para predecir curvas de polarización, densidad de potencia y rendimiento de una celda de carbonato fundido (MCFC).

En estudios previos sobre celdas de combustibles se han utilizado redes neuronales artificiales (ANN) para la predicción del voltaje, y de forma menos frecuente, se han aplicado enfoques guiados por la física en dichas redes. En este trabajo se plantea el uso inicial de ANN convencionales como base, para luego incorporar conocimiento físico al sistema transformando el modelo en una red neuronal guiada por la física (PGNN), a modo de mejorar las predicciones fuera del dominio.

Esta investigación es la primera etapa de un estudio a largo plazo que contempla la predicción de la curva de degradación de la celda de combustible durante su vida útil, así como su modelación dinámica y el desarrollo de un sistema de control predictivo.

1.2 Estado del arte

El ML se ha convertido en una herramienta clave para la modelación de celdas de combustibles a modo de mejorar su desempeño. Esta disciplina es capaz de manejar grandes volúmenes de datos, identificando patrones y prediciendo el comportamiento de la FC bajo diferentes condiciones de operación. Tomando en cuenta lo anterior, en esta sección se presenta una recopilación de artículos relevantes en este campo y para este trabajo.

Varios estudios han empleado algoritmos tradicionales como support vector machine (SVM), random forest (RF) y regresores Gaussianos en la predicción de curvas de polarización y selección de variables relevantes en PEMFC y SOFC. Song et al. [22] compararon las técnicas de ANN de back propagation (BP), SVM y RF para predecir el rendimiento en un sistema multicelda SOFC (30 celdas). Para ello, realizaron ensayos bajo distintas condiciones de operación con el fin de generar los datos experimentales necesarios para el entrenamiento de los modelos, de modo que con cada método se utilizaron 4 variables de entrada, como es posible observar en la Figura 4 que muestra un esquema para los modelos predictivos. Tras esto concluyeron que todos contaron con un error de fitting bajo el 5%, sin embargo, la ANN BP presentó el mejor desempeño tras comparar los valores de los diferentes criterios de evaluación utilizados, tales como R^2 ,

mean squared error (MSE), mean absolute error (MAE), así como los tiempos de entrenamiento y testeo.

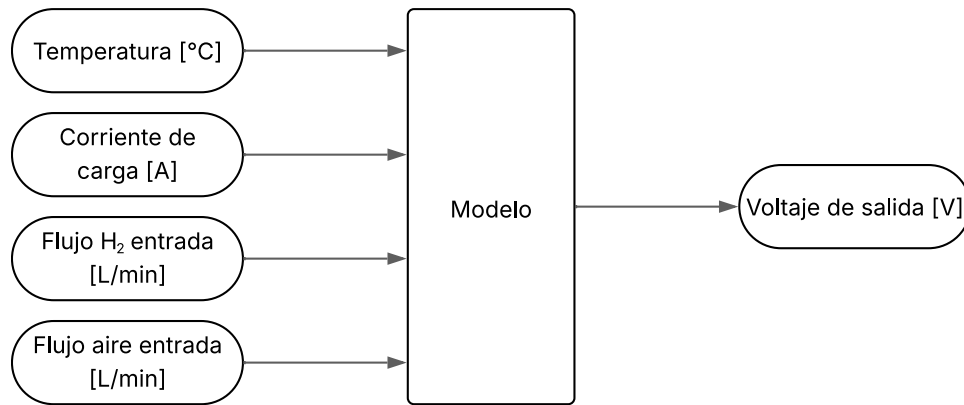


Figura 4: Modelo de predicción de SOFC

Similarmente, Huo et al. [23] combinaron RF y ANN convolucionales (CNN) para predecir curvas de polarización en una PEMFC, destacando el uso de técnicas como dropout y batch normalization para evitar el sobreajuste. Mientras que Sha et al. [24] evaluaron el desempeño de SVR, Gaussian process (GP) Y CNN con conjuntos de datos limitados, mostrando que los dos primeros logran predicciones más robustas con menos datos, mientras que CNN falla debido a su alta demanda de entrenamiento. Lo anterior resulta relevante considerando que los conjuntos de datos experimentales de celdas de combustibles, en especial si se tratan de tipos de alta temperatura, tienden a ser bastante limitados debido al tiempo y costo monetario que significa cada ensayo.

Chen et al. [25] desarrollaron un modelo CFD de cinco PEMFC conectadas en serie para generar datos sintéticos con condiciones operativas variables, los cuales fueron utilizados para entrenar modelos de ML orientados a predecir la volatilidad del voltaje de la pila. El mejor desempeño lo obtuvo un modelo de Gradient Boosting Decision Tree (GBDT), que fue posteriormente validado con datos experimentales de un stack de 220 celdas, demostrando la escalabilidad del enfoque desde nivel celda hacia sistemas multicelda reales.

El uso de ANN ha sido amplio en el modelado de FC, gracias a su flexibilidad para aprender relaciones no lineales entre variables. Xu et al. [26] desarrollaron un enfoque híbrido que integra un modelo de dinámica de fluidos computacional (CFD) para generar la base de datos, una ANN como modelo sustituto para reducir los tiempos de convergencia del de CFD, y algoritmos genéticos (GA) para optimizar el desempeño de una SOFC. Este enfoque permitió obtener mejoras significativas en la densidad de potencia, como se muestra en la Figura 5 que compara las curvas de polarización y de densidad de potencia del modelo básico con el optimizado. En dicha figura se indican los puntos de máxima potencia mediante la intersección de las líneas celestes verticales y horizontales. Otros estudios como el de Martsinchyk et al. [27] emplearon una deep feedforward ANN (DF ANN) para determinar la composición óptima del electrolito de una nueva FC modificando el de las

MCFC con boratos, donde comentan que el sobreajuste es un riesgo común durante el aprendizaje de las ANN, pero que se puede solucionar manteniendo la estructura lo más simple posible, disminuyendo el número de capas y neuronas.

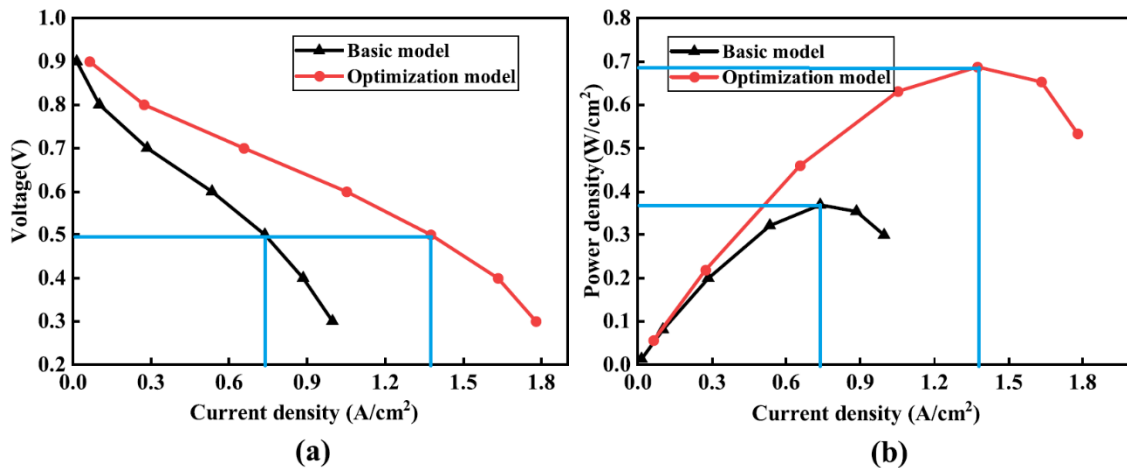


Figura 5: Comparación de rendimiento entre el modelo básico y el optimizado: a) Curva de polarización, b) Curva de densidad de potencia [26]

Subotić et al. [28] profundizaron en la mejora de la predicción de curvas de polarización de una SOFC mediante la optimización de hiperparámetros en la ANN, siguiendo el diagrama de flujo para el modelo mostrado en la Figura 6, donde algunos de los más relevantes fueron la función de activación, capas ocultas, número de neuronas por capa oculta, tasa de aprendizaje, etcétera. En el caso de PEMFC, Chen et al. [29] usaron extreme learning machine (ELM) y GA para predecir su degradación vía voltaje, logrando mejoras sustanciales en exactitud frente al ELM tradicional.

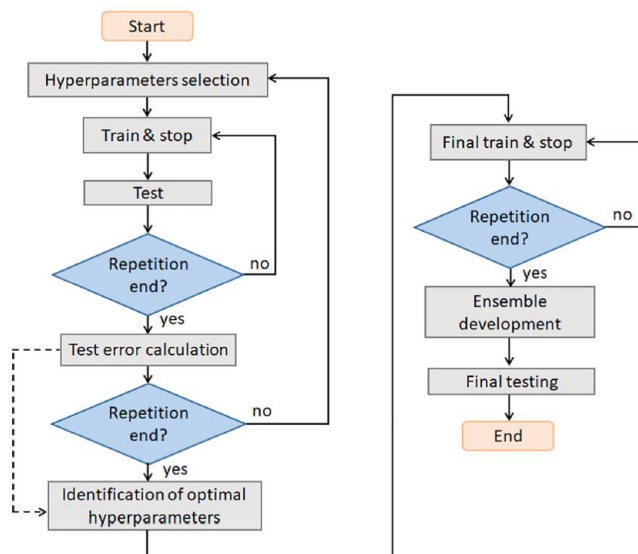


Figura 6: Diagrama de flujo para el entrenamiento, prueba y validación del modelo de ANN [28]

En el trabajo de Milewski et al. [30] utilizaron ANN para modelar una MCFC convencional (de la cual se tiene el conjunto de datos experimentales usado en el desarrollo del presente

estudio), incluyendo como parámetros de entrada múltiples variables geométricas y condiciones de operación. Tras el entrenamiento del modelo, la estructura con la menor cantidad de neuronas fue de 15-4-1 con un error relativamente pequeño del 2%. En la Figura 7 se muestra la curva de polarización para el voltaje predicho y experimental con el modelo de ANN.

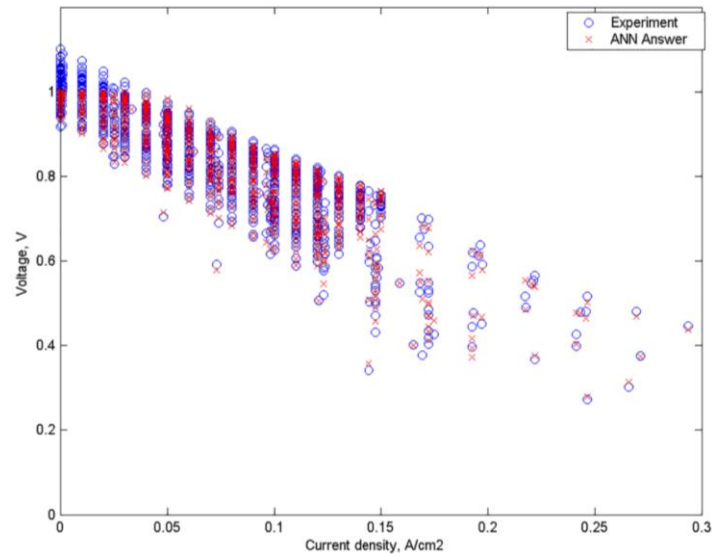


Figura 7: Curva de polarización tras el proceso de entrenamiento del modelo de MCFC basado en una ANN de estructura 15-4-1 [30]

Se ha buscado también disminuir la complejidad computacional mediante modelos sustitutos, como en [26] donde utilizaron ANN para disminuir el tiempo que tomaba obtener predicciones con el modelo en CFD, o en el estudio [31] donde se entrenaron modelos ANN y SVM con datos provenientes de simulaciones físicas, demostrando que ANN supera a SVM en predicciones multivariantes, aunque este último es más eficiente para tareas de regresiones simples puesto que reduce considerablemente el costo computacional sin sacrificar la exactitud, también se mostró, que incorporar la técnica dropout a los algoritmos de ML puede proporcionar predicciones bastante exactas con un $R^2 \geq 0.99$ para todas las variables predichas. En el estudio de Li et al. [32], una red neuronal Bagging (BNN), en comparación con una BP, tuvo un mejor desempeño en términos de la exactitud de la predicción según lo observado en la Figura 8, requiere de menos datos de entrenamiento para ello, y, también, pudo predecir con precisión la curva de polarización de la FC en menos de 10 segundos, reduciendo significativamente el tiempo de optimización de la estructura.

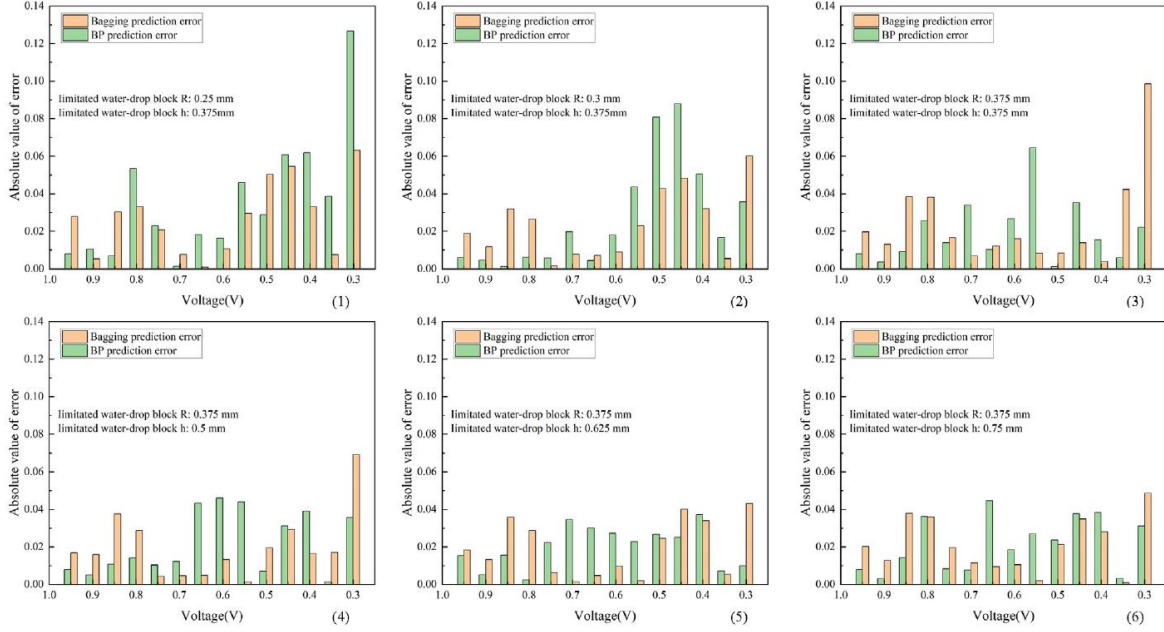


Figura 8: Valor absoluto del error de la densidad de corriente predicha por ambos modelos bajo diferentes estructuras de canales [32]

Dentro del ML, es posible hacer que las ANN incluyan ecuaciones relacionadas a la física del problema, por ejemplo, las redes neuronales informadas por la física (PINN) son estructuras que integran ecuaciones de gobierno que reflejen el conocimiento previo en un modelo de deep learning. En el estudio de Ko et al. [33] se utiliza esta técnica para pronosticar la vida útil remanente en dos PEMFC, ya que puede mitigar la dependencia del modelo de deep learning a la cantidad de datos disponibles, lo que resulta relevante dada la dificultad para hacer pruebas y obtener suficientes datos de envejecimiento como para entrenar al modelo. En la Figura 9 se expone la estructura de PINN utilizada para el modelo de ML.

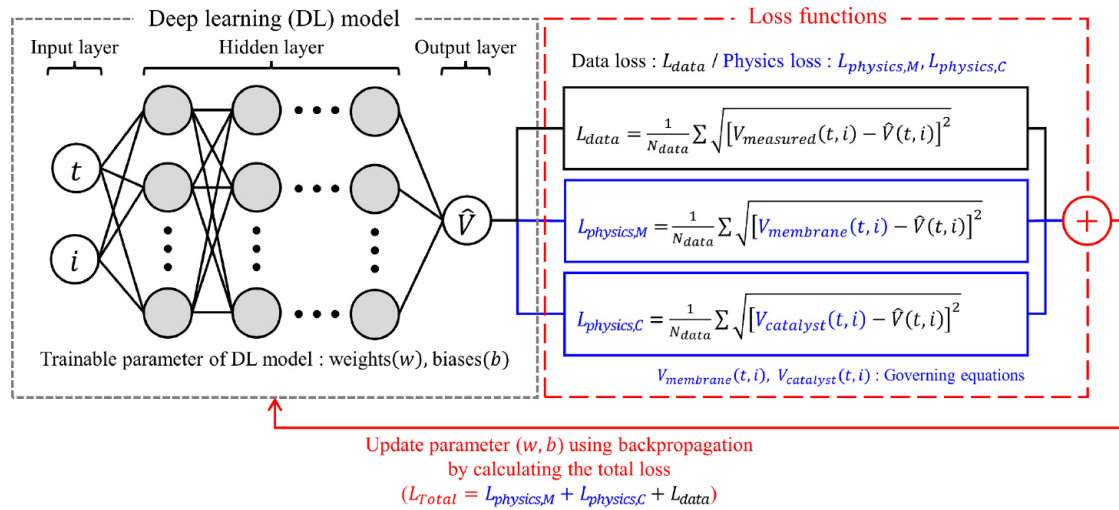


Figura 9: Estructura de la PINN utilizada en la predicción del voltaje de salida de la PEMFC [33]

Tras la obtención de los modelos se observó que el que era de PINN junto a ecuaciones de gobierno tenía considerablemente un mejor desempeño en comparación al que no las tenía, ya que este último llevaba a resultados de predicción divergentes debido a la cantidad insuficiente de datos de entrenamiento, no pudiendo así predecir correctamente la vida útil remanente de las FC.

Zerrougui et al. [34] también aplicaron PINN para la predicción de temperatura en electrolizadores PEM, mostrando superioridad sobre modelos ANN de long-short term memory (LSTM), aunque con un mayor tiempo de entrenamiento.

Fuera de las herramientas mencionadas de ML, existen otras técnicas y softwares para la modelación de celdas de combustible, los cuales son relevantes para hacer comparaciones respecto a su desempeño, uno de estos es Aspen HYSYS, un simulador de procesos usado a nivel industrial, en específico para realizar el diseño conceptual, control, optimización y seguimiento del proceso en diferentes etapas de un proyecto [35]. Milewski et al. [36] y Szczesniak et al. [37] modelaron en este software una SOFC conductora de protones y una pila MCFC (18 celdas en total) respectivamente, logrando buena concordancia con datos experimentales y demostrando que estos modelos poseen buena fidelidad física. En la Figura 10 se presenta el concepto general del modelo del estudio [37].

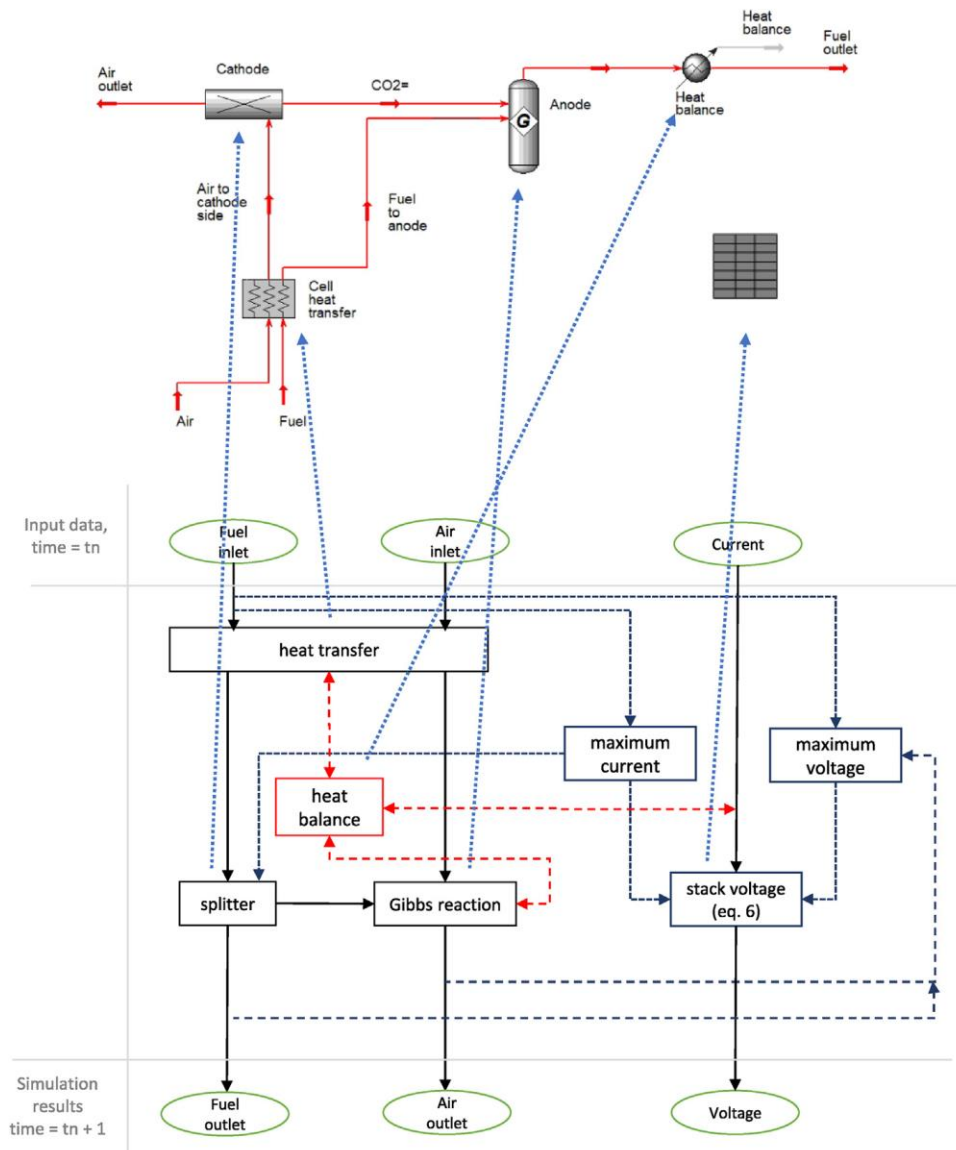


Figura 10: Concepto general de la implementación del modelo en Aspen HYSYS [37]

A partir del análisis anterior, se identifican brechas clave en la modelación de celdas MCFC mediante herramientas de aprendizaje automático. Entre ellas destaca el enfoque desbalanceado hacia la modelación de PEMFC y SOFC, así como la escasa incorporación de modelos híbridos físico-datos en MCFC. Si bien existen algunos enfoques basados en PINN, estos se han aplicado principalmente a sistemas dinámicos, limitando su aplicabilidad en modelos estáticos. Esta situación compromete la robustez del modelo ante condiciones no vistas o en escenarios con escasez de datos, donde los enfoques estrictamente data-driven presentan debilidades en su capacidad de extrapolación.

En este contexto, el enfoque PGNN surge como una alternativa prometedora y aún inexplorada en MCFC, al permitir la incorporación de conocimiento físico sin requerir necesariamente la inclusión explícita de ecuaciones diferenciales parciales, facilitando así la integración de ecuaciones fisicoquímicas propias del sistema. Además, también hay una

oportunidad relevante para que, en un futuro, los modelos PGNN, al igual que otras técnicas de ML, sean probados en la modelación de celdas individuales o pequeños stacks, y luego extendidas a sistemas multicelda reales.

1.3 Hipótesis

La implementación de técnicas de ML, específicamente las ANN, en el modelado de MCFC permitirán la predicción de las curvas de rendimiento y polarización de forma más eficiente en comparación a métodos experimentales tradicionales, los cuales están sujetos al error humano en la toma de mediciones, y a modelos físicos convencionales, que requieren un mayor conocimiento sobre el proceso físico y un tiempo de desarrollo más extenso. Lo anterior es en base a que las ANN pueden manejar grandes volúmenes de datos experimentales, detectar patrones complejos en ellos y, además, presentan tiempos de iteración significativamente menores durante el entrenamiento del modelo. Además, la integración de esto con redes neuronales guiadas por la física (PGNN), permitirá hacer predicciones fuera de los dominios de entrenamiento, solucionando esa limitación de las ANN frente a modelos físicos.

De esta forma se espera llenar un vacío existente en la literatura que relaciona estos tópicos, y, además, contribuir al desarrollo de tecnologías más eficientes y sostenibles en el contexto de la generación de energía a partir de hidrocarburos.

1.4 Objetivos

1.4.1 Objetivo general

Analizar el comportamiento de una celda de combustible de carbonato fundido (MCFC) mediante el desarrollo y aplicación de modelos de aprendizaje automático entrenados con datos experimentales, con el propósito de definir un modelo de su curva de polarización, en un entorno controlado de experimentos numéricos.

1.4.2 Objetivos específicos

OE1: Caracterizar la MCFC del caso de estudio mediante el análisis de parámetros fisicoquímicos, estructurales y operacionales, con el propósito de generar una base de datos técnica robusta para el modelado, durante el primer mes del proyecto.

OE2: Evaluar la idoneidad de distintas técnicas de aprendizaje automático (ML) supervisado, tales como regresión, redes neuronales y árboles de decisión, considerando dimensiones de precisión, complejidad y costo computacional, con el propósito de seleccionar el enfoque más adecuado para modelar las curvas de polarización de la MCFC, dentro del segundo mes del proyecto.

OE3: Implementar experimentos computacionales para la caracterización de la MCFC, utilizando el entorno de desarrollo Python, validando su funcionamiento mediante pruebas controladas con datos experimentales antes del tercer mes del proyecto.

OE4: Optimizar el desempeño del modelo utilizando redes neuronales guiadas por física (PGNN), cuantificando la mejora respecto a los modelos convencionales mediante métricas como MSE, MAE Y R^2 , en un horizonte de 4 meses.

1.5 Metodología

A continuación, se exponen las diferentes actividades a realizar para el cumplimiento de los objetivos específicos.

- **Actividad 1: Análisis integral del caso de estudio. (OE1)**

Actividad 1.1: Recopilar información respecto a la celda de combustible de carbonato fundido utilizada en el banco de ensayos, para caracterizarla en base a los diferentes materiales usados para sus componentes y su configuración geométrica.

Actividad 1.2: Analizar la configuración del banco de ensayos, ya sea en que dispositivos lo componen, que instrumentos son utilizados para hacer la toma de datos experimentales y bajo qué condiciones se hicieron las pruebas para la obtención de estos mismos.

Actividad 1.3: Organizar las variables del set de datos entregado que resultan relevantes para la obtención de las curvas a través de ML, como los flujos de entrada a la FC, la densidad de corriente, temperatura de la celda, el voltaje de salida, entre otras.

Hito 1: Información de la celda recopilada y organizada.

- **Actividad 2: Evaluación de técnicas de aprendizaje automático. (OE2)**

Actividad 2.1: Realizar una búsqueda de los algoritmos de aprendizaje supervisado que han sido utilizados para la obtención de las curvas de polarización y rendimiento de celdas de combustible en diferentes estudios y que hayan tenido resultados exitosos en su predicción al compararlos con los datos experimentales.

Actividad 2.2: Analizar técnicas innovadoras, no antes probadas para conseguir las curvas descritas, pero que sí puedan ser aplicadas en la modelación de una celda de combustible, habiendo demostrado su eficacia en contextos similares.

Actividad 2.3: Seleccionar el algoritmo de aprendizaje supervisado más adecuado para su prueba dentro de este estudio, basándose en los hallazgos de las actividades previas y el volumen del set de datos proporcionados de la MCFC.

- **Actividad 3: Programación del algoritmo de ML. (OE3)**

Actividad 3.1: Calcular, a partir del set de datos entregado en formato Excel, la información faltante para la obtención de las curvas de manera experimental, y reordenar los datos para facilitar su lectura en los modelos a programar.

Actividad 3.2: Implementar el algoritmo seleccionado en un entorno de Python, por la abundancia en recursos de aprendizaje disponibles para este lenguaje de programación, específicamente en el software de Jupyter Notebook, dado a que es de código abierto.

Actividad 3.3: Optimizar el algoritmo a partir de la selección más adecuada de hiperparámetros en base a los criterios de desempeño utilizando métodos de búsqueda, como el de búsqueda de cuadrícula, por ejemplo.

Hito 2: Modelo de ML implementado y optimizado.

- **Actividad 4: Optimización del modelo de ML con PGNN. (OE4)**

Actividad 4.1: A partir del modelo original, agregar, específicamente en la función de costo total, ecuaciones pertinentes, para transformarlo a un algoritmo PGNN y se puedan hacer predicciones fuera del dominio de entrenamiento.

Actividad 4.2: Optimizar el algoritmo PGNN, considerando las funciones de costo agregadas, que pueden hacer que se necesiten cambios en la estructura de la red neuronal original para su mejor desempeño. Todo esto será a través de la mejora de la combinación de hiperparámetros utilizados a partir de métodos de búsqueda.

Actividad 4.3: Hacer la comparativa entre los dos modelos obtenidos respecto a su desempeño, a partir de los criterios usados en ambos, para definir si el algoritmo informado por la física propuesto mejoró o no las predicciones de las curvas de polarización y rendimiento.

Hito 3: Modelo PGNN implementado y optimizado, listo para su comparativa de desempeño con el modelo original.

2 Marco teórico

2.1 Definiciones

2.1.1 Celdas de combustible de carbonato fundido

Las MCFC son celdas de alta temperatura capaces de generar electricidad, mediante el uso de una variada cantidad de combustibles hidrocarburos, a la par de capturar el CO_2 proveniente de gases de combustión.

Estas se ven compuestas por tres elementos principales, el electrolito (matriz) que está formado por una mezcla de carbonatos de litio y potasio (o sodio) fundidos, retenidos en una matriz cerámica porosa, el ánodo, y el cátodo, como se es mostrado en la Figura 11. En el ánodo, los iones de carbonato reaccionan con el H_2 para producir vapor y CO_2 , como se expone en la Ecuación (1) [14], al mismo tiempo que el oxígeno y el dióxido de carbono son alimentados al cátodo, y reaccionan para producir los iones de carbonato [38], según lo mostrado en la Ecuación (2) [14].

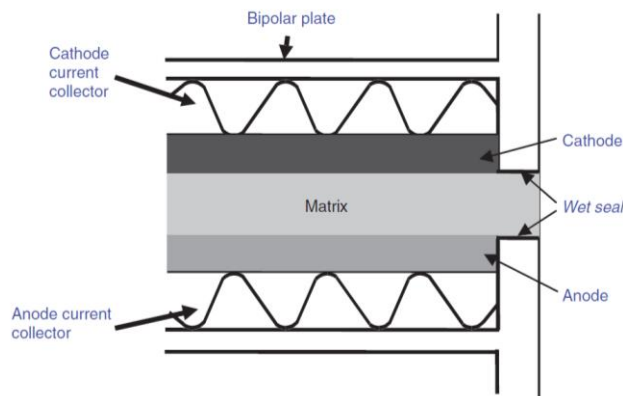
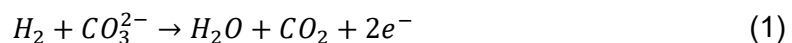


Figura 11: Componentes de una MCFC [14]



En general, la reacción sería según lo mostrado en la Ecuación (3) [14].



Teniendo en cuenta la capacidad de estas pilas de capturar CO_2 , resulta de gran interés poder fusionar esta tecnología con otros sistemas, o en específico, plantas de energía, como calderas de carbón, turbinas de gas y motores diésel, de las cuales se obtienen los gases de escape con los que se alimenta la entrada del cátodo. Esto es relevante al tomar en cuenta que este compuesto químico es uno de los gases de efecto invernadero primarios, y que la economía energética basada en combustibles fósiles no se puede reemplazar en el corto plazo.

Sin embargo, todavía existen desafíos por sobrellevar respecto a las MCFC, como la ampliación de su módulo, ya que su limitada potencia de salida (del orden de pocos MW) dificulta su aplicación en la captura de carbono a gran escala, como la requerida en centrales eléctricas de gas o vapor en el corto plazo. Además, su producción no masiva contribuye a mantener elevados los costos de manufactura [38].

2.1.2 Modelado de celdas de combustible

El modelado clásico de las celdas de combustible está basado en una aproximación de la curva de densidad de corriente y voltaje, también conocida como curva de polarización, y se divide en tres zonas según el tipo de pérdida que está ocurriendo, las cuales son de activación γ_{act} , óhmicas γ_{ohm} y de concentración γ_{con} . Dichas pérdidas se sustraen del voltaje máximo definido por la ecuación de Nernst, la cual es mostrada en la Ecuación (4), donde R corresponde a la constante de los gases ideales, T la temperatura de la celda, F la constante de Faraday, y p_{O_2} la presión parcial del oxígeno en el cátodo y ánodo según se indique, para obtener el voltaje de la celda, que se calcula según la Ecuación (5). En la Figura 12 se presenta un ejemplo de una curva de polarización.

$$E_{max} = \frac{RT}{4F} \ln \left(\frac{p_{O_2,ca}}{p_{O_2,an}} \right) \quad (4)$$

$$E_{FC} = E_{max} - \gamma_{act} - \gamma_{ohm} - \gamma_{con} \quad (5)$$

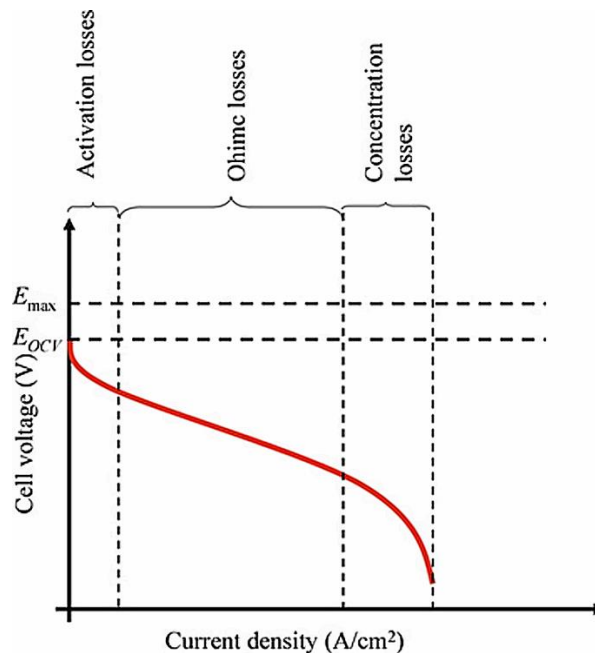


Figura 12: Modelado clásico de una curva de polarización [39]

La caída de voltaje en la parte inicial de la curva, donde hay bajas densidades de corriente, es debido a las pérdidas por activación, las que corresponden al voltaje requerido para

superar la energía de activación de la reacción electroquímica en la superficie catalítica. Las pérdidas óhmicas son el resultado de la resistencia intrínseca al flujo de cargas en materiales conductivos, y los componentes de la celda que contribuyen a esa resistencia eléctrica son el electrolito, la capa catalizadora, la capa de difusión de gas, las placas bipolares contactos de interfaz y las conexiones de terminales [40]. En la última parte de la curva, dominan las pérdidas por concentración, o también llamadas por transporte de masa, y van asociadas al transporte de gases en dirección perpendicular a la superficie de los electrodos, y también a que los electrodos están hechos de materiales porosos que afectan la forma en que se entregan y reciben los gases alrededor de la zona de reacción [39].

A diferencia del enfoque clásico, existe un modelo físico que cuenta con la ventaja de analizar la influencia de factores clave en el rendimiento de la celda de forma aislada entre ellas, es decir, que al cambiar algún parámetro (sea flujo de combustible, tipo de electrolito, temperatura, espesor del ánodo o cátodo, entre otros) no se necesita cambiar los valores de los otros coeficientes usados. En este contexto, es posible utilizar otra fórmula para calcular el voltaje de la celda, la que es mostrada en la Ecuación (6), donde i_{max} es la densidad de corriente máxima, FU el factor de utilización de combustible, r_1 la resistencia iónica interna específica del área y r_2 la resistencia electrónica específica del área [39].

$$E_{FC} = \frac{E_{max} - i_{max} \cdot r_1 \cdot FU}{\frac{r_1}{r_2} (1 - FU) + 1} \quad (6)$$

2.1.3 Redes neuronales artificiales

Las ANN son un modelo computacional hecho por cierto número de neuronas conectadas entre sí, donde cada una de ellas representa una función de salida específica llamada función de activación, y cada conexión entre ellas representa un peso de la señal pasando a través de dicha conexión, lo cual se llama, valga la redundancia, peso, el que equivale a la memoria de la ANN. La salida de la red dependerá de cómo este conectada, los valores de los pesos y de las funciones de activación [41]. En la Figura 13 se muestra un ejemplo de red neuronal aplicada a la modelación de una celda de combustible.

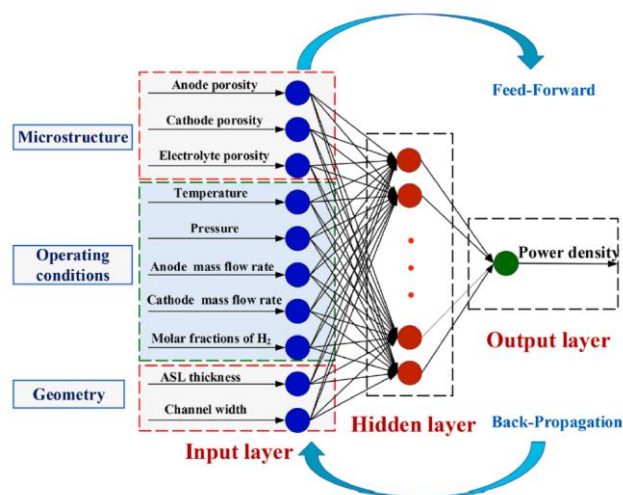


Figura 13: Ejemplo de ANN utilizada para modelar una SOFC [26]

Como es posible observar en la Figura anterior, la capa de entrada contiene los datos con los que será entrenado el algoritmo, en este caso correspondientes a los valores obtenidos de diferentes parámetros (una neurona cada uno) de una SOFC. Esta capa se conecta a la capa oculta a través de las neuronas de ambas, y aquí se aplica la función de activación, es importante mencionar que, puede existir más de una capa oculta con diferentes cantidades de neuronas y asimismo utilizar diferentes funciones de activación en cada capa. La última capa oculta se conecta, a través de las neuronas, a la capa de salida, que en este caso contiene solo una neurona, pero también se puede hacer que tenga más neuronas dependiendo de los resultados buscados.

Las ANN cuentan con las características básicas de que son [41]:

- No lineales: al estar basadas en el comportamiento de las redes neuronales del cerebro, la relación entre la entrada y la salida de estos modelos no necesariamente va a ser lineal, lo cual resulta importante a la hora de resolver sistemas de mayor complejidad.
- No limitadas: pueden consistir de múltiples capas ocultas y neuronas. El sistema no solo depende de las características de una sola neurona, sino que de la interacción e interconexión entre todas las unidades.
- No cualitativas: hace predicciones numéricas y/o de clasificación precisa.
- No convexas: al tener funciones que tienen múltiples extremos locales, no siempre convergerá al mínimo global. Considerando esto, son más estables en estados de equilibrio.

La necesidad de las funciones de activación va ligada a los problemas no lineales, ya que, si se encadenan varias transformaciones lineales, se obtiene una transformación lineal, es decir, si no existe alguna no linealidad entre las capas, aunque la ANN tenga una gran cantidad de capas, sería equivalente a una sola, y no se podrían resolver problemas complejos con el modelo obtenido [42]. En la Figura 14 se presentan algunas de las funciones más comunes junto a sus derivadas.

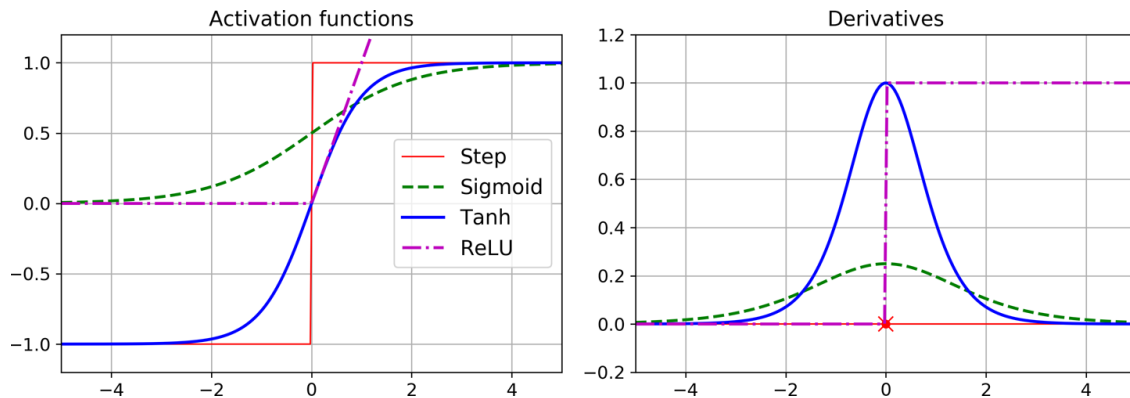


Figura 14: Funciones de activación y sus derivadas [42]

Considerando el estudio llevado a cabo dentro de esta investigación, es relevante mencionar que, al construir la ANN para regresión, no se deben utilizar funciones de activación en la neurona de salida, ya que se quiere predecir un valor real sin distorsión.

La ecuación de un perceptrón multicapa con 2 capas ocultas (pues con esa arquitectura se harán los modelos ANN dentro del estudio) se obtiene según la Ecuación (7), (8) y (9),

donde h son las salidas de cada capa oculta, ϑ las funciones de activación no lineales, W las matrices de pesos de las capas, b los vectores de sesgo, x el vector de entrada, e y el vector objetivo.

$$h_{c1} = \vartheta_{c1}(W_{c1}x + b_{c1}) \quad (7)$$

$$h_{c2} = \vartheta_{c2}(W_{c2}h_{c1} + b_{c2}) \quad (8)$$

$$y = W_{sal}h_{c2} + b_{sal} \quad (9)$$

Para el entrenamiento del algoritmo se utilizan funciones de pérdida, las cuales corresponden a métricas para medir el error entre los valores predichos y los reales, de modo que sea posible saber que tan bien entrenado fue el modelo. Algunas de las más utilizadas son el error cuadrático medio (MSE) y el error absoluto medio (MAE). Para comprender de mejor manera lo anterior, se toma como ejemplo la Figura 13, que es un algoritmo de BP, donde primero se hace una predicción (forward pass) y se mide el error, luego va a través de cada capa en reversa para medir la contribución al error por cada conexión (reverse pass), y después ajustan los pesos para reducir el error [42].

Como los modelos ANN están hechos por una o múltiples capas con neuronas, es relevante hacer una arquitectura adecuada de modo que el modelo tenga el mejor desempeño posible considerando sus datos de entrada. Se puede optimizar el modelo probando manualmente diferentes combinaciones de hiperparámetros para cada capa, sin embargo, esto resulta en una tarea tediosa. Existen diferentes técnicas en el contexto del ML para lograr lo anterior de forma computacional, una de ellas es la búsqueda de malla, que en el lenguaje de programación Python ya existe como una función llamada “*GridSearch*”, específicamente en la biblioteca de Keras Tuner [43], donde se colocan los hiperparámetros y valores con los que se desea experimentar, y con validación cruzada se evalúan todas las posibles combinaciones [42]. En la Figura 15 se muestra un esquema de cómo con la búsqueda de malla se escoge la combinación que minimice más la pérdida.

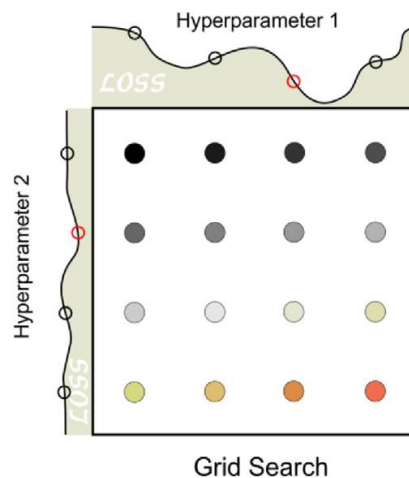


Figura 15: Ejemplo de búsqueda de malla en un espacio con dos hiperparámetros [44]

Es relevante considerar que, las ANN pese a ofrecer un gran potencial para modelar sistemas complejos, también conllevan una serie de riesgos y limitaciones que se deben considerar, algunas de ellas son:

- **Sobreajuste:** ocurre cuando la red se ajusta excesivamente a los datos de entrenamiento, mostrando un buen desempeño en la predicción de estos, pero deficiente frente a nuevos datos (prueba y/o fuera del dominio). Esto suele presentarse cuando la red cuenta con un exceso de parámetros, como demasiadas capas ocultas o neuronas por capa, en relación con la cantidad de datos disponibles, o cuando el entrenamiento se prolonga en exceso sin una regularización adecuada.
- **Alta dependencia a los datos de entrenamiento:** dado que las ANN tradicionales aprenden exclusivamente de los datos proporcionados, y no tienen conocimiento externo de sistema físico, si el conjunto no representa adecuadamente el dominio de interés, el modelo será incapaz de predecir fuera de ese rango. Además, requieren de grandes volúmenes de datos para lograr una generalización robusta.
- **Interpretabilidad:** al tratarse de modelos tipo “caja negra”, es difícil comprender como una ANN estándar llegó a una determinada predicción o si dicha predicción tiene sentido físico. Esta falta de transparencia limita su confiabilidad en aplicaciones críticas.
- **Sensibilidad:** las ANN pueden amplificar errores si los datos de entrenamiento están contaminados con ruido o inconsistencias. Asimismo, si no se realiza un preprocesamiento adecuado, la red no distinguirá entre información relevante o no. Por esta razón, los datos experimentales utilizados deben ser de alta calidad, de lo contrario, el modelo será incapaz de representar el comportamiento real del sistema.

2.1.4 PINN

Las redes neuronales informadas por la física son una técnica de ML que codifican ecuaciones modelo, entre ellas las ecuaciones parciales diferenciales (PDE), como un componente de la propia ANN, integrando conocimiento previo de un fenómeno físico con el aprendizaje profundo. En el estudio de Cuomo et al. [45] demuestran como, en este contexto, las características de las redes neuronales son usadas, como la información física es suministrada, y que problemas físicos pueden ser resueltos en la literatura.

Las PINN aproximan las soluciones de las PDE al entrenar la ANN minimizando la función de pérdida, incluyendo términos que reflejan las condiciones iniciales y de contorno en el límite del dominio espacio-tiempo, y el residuo de las PDE en puntos seleccionados del dominio. Incluir redes residuales que codifican las ecuaciones físicas de gobierno es una novedad en las PINN, y la ventaja de esto es que, al utilizar esas funciones como funciones de pérdida, se toma en cuenta la física del problema, más que solo deducir la solución únicamente a partir de datos.

Con esta herramienta es posible resolver problemas descritos por pocas muestras de datos u observaciones experimentales ruidosas, y como pueden utilizar datos conocidos en conjunto a cualquier ley física especificada por PDE generales no lineales, pueden usarse en problemas que involucren aprendizaje supervisado. Las ecuaciones diferenciales pueden ser resueltas por esta técnica según lo expresado en la Ecuación (10), donde \mathcal{F}

corresponde al operador diferencial no lineal, f es la función que identifica los datos del problema, \mathcal{B} es el operador que indica condiciones iniciales arbitrarias o de contorno, g es la función de contorno, u es la solución desconocida, κ son los parámetros relacionados a la física, z es el vector de coordenadas espacio-tiempo, y Ω es el dominio en \mathbb{R}^d con el contorno $\partial\Omega$.

$$\begin{aligned}\mathcal{F}(u(z); \kappa) &= f(z) & z \text{ en } \Omega, \\ \mathcal{B}(u(z)) &= g(z) & z \text{ en } \Omega\end{aligned}\tag{10}$$

En la Figura 16 se presenta un ejemplo de la construcción de una PINN, donde se muestra que está conformada por 3 componentes, la red neuronal, la red físicamente informada, y un mecanismo de retroalimentación.

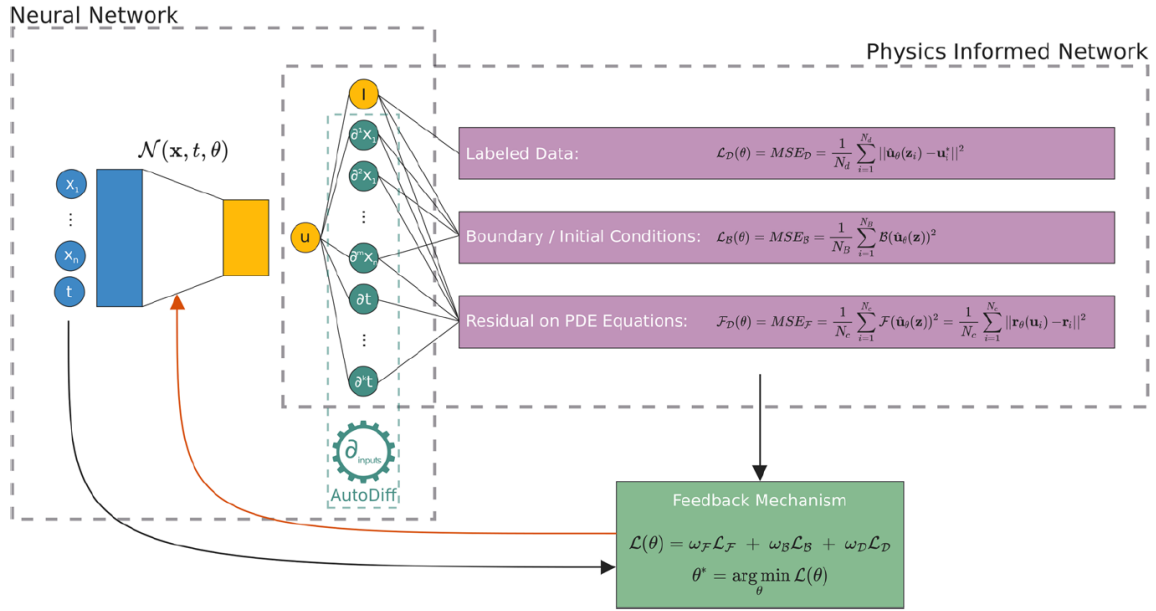


Figura 16: Bloques de construcción de una PINN [45]

En base a la Figura anterior, la primera parte correspondiente a la ANN hace la transformación de los datos de entrada z en las salidas de red u , luego, pasando a la parte de PINN, se toma el campo de salida u y calcula la derivada para determinar los términos de las ecuaciones de pérdida, y también los términos de las condiciones iniciales y de contorno de la Ecuación (11), que es utilizada para minimizar la función de costo total, donde θ representa el vector de parámetros desconocidos en la red neuronal, y los parámetros desconocidos γ en caso de que el problema sea inverso y se deseen encontrar esos valores a partir de los datos. \mathcal{L}_F , \mathcal{L}_B y \mathcal{L}_d son las funciones de pérdida correspondientes a la ecuación diferencial, las condiciones de borde, y los datos conocidos respectivamente, cada una ponderada adecuadamente por un peso λ .

$$\theta^* = \arg \min (\lambda_F \mathcal{L}_F(\theta) + \lambda_B \mathcal{L}_B(\theta) + \lambda_d \mathcal{L}_d)\tag{11}$$

En el mecanismo de retroalimentación, se minimiza la pérdida utilizando una tasa de aprendizaje determinada, con el objetivo de ajustar el vector de parámetros θ de la ANN asociado a u .

2.1.5 PGNN

Las redes neuronales guiadas por la física (PGNN) son algoritmos donde se utilizan técnicas estándar de ML para construir modelos sustitutos que relacionan entradas formateadas y salidas obtenidas a partir de experimentos y cálculos realizados en un entorno controlado. Dichas asignaciones se gestionan mediante procesos rigurosos que aseguran el cumplimiento de principios físicos y leyes fundamentales [46]. Y, a diferencia de las PINN, no es necesario que utilice PDE o la física del problema dentro de la función de pérdida para que sea una ANN informada por la física [47].

A continuación, en la Tabla 1 se dejan las principales características comparables entre los modelos PGNN y PINN, para así conocer en qué casos se puede utilizar cada uno y bajo qué condiciones.

Tabla 1: Comparación entre modelos PGNN y PINN

| Criterio | PGNN | PINN |
|-----------------------------|--|--|
| Tipo de integración física | VARIABLES AUXILIARES, RESTRICCIONES O COMPONENTES EN LA ARQUITECTURA O LA FUNCIÓN DE PÉRDIDA | Incorpora PDE directamente en la función de pérdida como términos residuales |
| Requisitos sobre ecuaciones | Puede usar relaciones físicas no necesariamente diferenciales | Requiere que estén expresadas como PDEs o EDOs |
| Flexibilidad | Alta: se adapta fácilmente a distintas formas de guiar el modelo con física, sin necesidad de formular toda la física explícitamente | Baja: requiere formular y codificar las ecuaciones en forma simbólica o automática |
| Uso de datos | Combina conocimiento físico con datos reales | Combina conocimiento físico con datos reales |
| Entrenamiento | Similar a una ANN clásica, pero se guía con conocimiento físico según el tipo de integración | Entrenamiento complejo, ya que evalúan derivadas de la red neuronal con respecto a las entradas para computar el término físico (residual de la PDE) |
| Ventaja | Alta interpretabilidad y adaptabilidad | Puede resolver PDEs sin necesidad de un método numérico clásico, y permite generalizar en regiones sin datos |
| Desventaja | Requiere de una buena estrategia para la incorporación de la física, lo que puede ser artesanal y menos sistemático | Entrenamiento costoso computacionalmente; difícil de aplicar si la física es incierta o mal formulada |

2.2 Ecuaciones utilizadas en las redes neuronales

2.2.1 Preprocesamiento de los datos

Para alcanzar resultados correctos al utilizar algoritmos de ANN para la predicción es necesario preparar los datos antes de ingresarlos a algún modelo. Una forma de hacer esto es separar el conjunto de datos, de modo que haya datos de entrenamiento y de prueba.

En Python existe una librería que contiene una función llamada “*train_test_split*” capaz de realizar lo anterior de forma aleatoria. Entre los parámetros de dicha función se destacan los “**arrays*” que corresponden a los datos de entrada, el “*test_size*” que indica que cantidad de datos se guardan como datos de prueba, el “*random_state*” que controla como se barajan los datos antes de separarlos de modo que la salida puede ser reproducible si así se desea, y “*shuffle*” que indica si se barajan o no los datos antes de separarlos [48].

Otra herramienta para el preprocesamiento de los datos es la estandarización, la cual es necesaria cuando existen funciones de activación no lineales en las capas [49]. Un método de escalamiento lineal altamente utilizado es usar una escala estándar, que tiene como objetivo, tener una media cero y una desviación estándar de uno [50] y se calcula como se muestra en la Ecuación (12).

$$x_{scaled} = \frac{x - \mu_x}{\sigma_x} \quad (12)$$

Dentro de la misma librería de Python, existe la función “*StandardScaler*” que realiza lo anterior, y entre sus parámetros de entrada solo es necesario colocar el set de datos a escalar. Es importante mencionar que dichos datos corresponden a los de entrenamiento, ya que cuando se entrene al modelo, el conjunto de prueba simula una muestra desconocida, y si se escalaran todos los datos (entrenamiento más prueba) se filtraría información futura al entrenamiento.

2.2.2 Métricas de evaluación de desempeño

En los modelos de regresión una métrica común para calcular el error es con el MSE, el cual se obtiene según la Ecuación (14) [42], con y_{pred} el valor objetivo predicho, e y_{real} el valor objetivo real, que dentro del estudio corresponderá al valor objetivo obtenido de forma experimental.

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (y_{pred,j} - y_{real,j})^2 \quad (13)$$

Frente a una cantidad considerable de valores atípicos una métrica a considerar es la de MAE, que es una forma de medir la distancia entre dos vectores, el de las predicciones y el de los valores reales [42]. Este se puede calcular según la Ecuación (14).

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n |y_{pred,j} - y_{real,j}| \quad (14)$$

El coeficiente de determinación R^2 puede ser utilizado para representar la exactitud del desempeño de la predicción del modelo, siendo 1 el valor más favorable [22]. Esta métrica se calcula según la Ecuación (15).

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{j=1}^n (y_{pred,j} - y_{real,j})^2}{\sum_{j=1}^n y_{pred,j}^2} \quad (15)$$

En Python ya existen funciones capaces de calcular todas las métricas antes mencionadas.

2.2.3 Funciones de pérdida para modelo PGNN

En un modelo PINN, la función de pérdida total se compone de la sumatoria de los siguientes términos mostrados en la Ecuación (16), que incluyen la pérdida asociada a los datos \mathcal{L}_{data} , a la regularización de los pesos \mathcal{L}_{reg} , y a la física \mathcal{L}_{phys} , cada una de ellas multiplicada por su peso λ correspondiente.

$$\mathcal{L}_{total} = \lambda_{data} \cdot \mathcal{L}_{data} + \lambda_{reg} \cdot \mathcal{L}_{reg} + \lambda_{phys} \cdot \mathcal{L}_{phys} \quad (16)$$

Las pérdidas asociadas a los datos, o al error en la predicción, puede ser calculado bajo diferentes métricas, dentro del presente estudio se utilizará el MSE, de modo que será según la Ecuación (13).

Cuando la pérdida va asociada a la regularización de los pesos es para penalizar los pesos utilizados en la red neuronal, evitando el sobreajuste. Existen diferentes formas de penalización, pero en este caso se utilizará la regularización L2, que obtiene según la Ecuación (17).

$$\mathcal{L}_{reg} = \sum_j^m \omega_j^2 \quad (17)$$

Pasando a la pérdida física, se basará en una ecuación antes presentada (Ecuación (6)), la cual involucra el cálculo del voltaje de la celda, tomando como forma de cálculo el MSE. Luego, la pérdida por la física del problema estará dada por la Ecuación (18).

$$\mathcal{L}_{phys} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (y_{pred,j} - E_{FC,j})^2 \quad (18)$$

Como la parte física dentro de la función de pérdida es calculada de tal forma, no utiliza PDE, por lo que el modelo como tal, al utilizar esta función de pérdida total, sería uno de PGNN.

3 Instrumentación y métodos

3.1 Descripción del banco de ensayos

La celda de combustible, de la cual fueron obtenidos los datos, es una de carbonato fundido con un área plana de 100 cm², mostrada en la Figura 17, donde el ánodo era una estructura de Ni con porosidad del 55% y espesor de 0.76 mm, el cátodo era una estructura de óxido de níquel de porosidad del 60% y espesor de 0.7 mm, y el electrolito era una mezcla de carbonato de litio y carbonato de potasio $(\text{Li}_2\text{CO}_3)_{0.62}(\text{K}_2\text{CO}_3)_{0.38}$.



Figura 17: Celda única MCFC usada en pruebas [51]

Los electrodos y el electrolito van entre 2 placas separadoras opuestas, con los flujos de combustible y oxidante fluyendo simultáneamente en canales opuestos, y los colectores de corriente catódica y anódica están hechos en forma de láminas en relieve de acero inoxidable. La celda fue probada en una instalación experimental como se puede ver en la Figura 18, donde se mantuvo en un recipiente, y se pudo configurar y controlar cada parámetro de operación. El sistema vaporizador mide y controla el vapor dirigido al ánodo y cátodo.



Figura 18: Instalación de prueba MCFC [51]

La temperatura del sistema fue controlada de forma externa, y las temperaturas locales fueron medidas con termocuplas, en diferentes posiciones en la celda, y procesadas por la placa de PC.

El voltaje de la celda fue medido en los dos electrodos y su valor fue procesado por una placa de National Instruments. La resistencia fue medida usando un HIOKI 350 AC m Ω HiTESTER (4 cables, 1kHz). La composición del gas y las razones de flujo fueron controladas por un set de controladores de flujo másico. El flujo de gases y agua son medidos y controlados por los Brookss 5850E Digital Mass Flow Controllers. Y para la demanda de carga se usa DC electronic load (SAE Electronic Conversion SRL).

3.2 Descripción de los ensayos realizados

Los experimentos fueron con la MCFC operando a presión atmosférica y bajo diferentes condiciones de operación, donde se varió la temperatura, los combustibles usados, la composición del gas en la entrada del ánodo, el flujo de aire al cátodo, entre otros. Al ser diferentes tipos de ensayos, no se tiene información específica respecto a cómo fueron hechos cada uno de ellos, por lo que a continuación se explica únicamente el denominado como experimento 1, en el cual solo varió la temperatura a la que funcionaba la celda, probando temperaturas de 550°C a 650°C para obtener los valores de voltaje.

3.3 Variables medidas en los ensayos

En la Tabla 2 y Tabla 3 se presenta un resumen de las variables asociadas a los datos dentro y fuera del dominio respectivamente.

Tabla 2: Tabla resumen para las variables de los datos dentro del dominio (entrenamiento y prueba)

| Variable | Media | Mediana | Varianza | Moda | Skewness | Kurtosis | Mínimo | Máximo | Rango |
|---------------------------------------|----------|---------|----------|---------|----------|----------|---------|---------|---------|
| Corriente [A/cm ²] | 0.0721 | 0.0700 | 0.0025 | 0 | 0.5790 | 0.4436 | 0 | 0.2937 | 0.2937 |
| Voltaje [V] | 0.8428 | 0.8530 | 0.0180 | 0.9470 | -0.7785 | 0.9349 | 0.2730 | 1.1010 | 0.8280 |
| T [°C] | 646.8190 | 650 | 224.3809 | 650 | -5.0970 | 26.0520 | 550 | 650 | 100 |
| H2a [ml/min/cm ²] | 1.9548 | 2.2039 | 0.1885 | 2.2039 | -0.0759 | 1.6384 | 0.2204 | 4.4077 | 4.1873 |
| H2Oa [ml/min/cm ²] | 0.3939 | 0.4132 | 0.0279 | 0.4132 | 2.2269 | 9.0516 | 0.0514 | 1.2896 | 1.2382 |
| N2a [ml/min/cm ²] | 0.0529 | 0 | 0.0507 | 0 | 4.5652 | 20.5078 | 0 | 1.3774 | 1.3774 |
| COa [ml/min/cm ²] | 0.0004 | 0 | 0.0001 | 0 | 34.1760 | 1166.001 | 0 | 0.4160 | 0.4160 |
| CH4a [ml/min/cm ²] | 3.55e-5 | 0 | 1.48e-6 | 0 | 34.1760 | 1166.001 | 0 | 0.0416 | 0.0416 |
| CO2a [ml/min/cm ²] | 0.4848 | 0.5509 | 0.0118 | 0.5510 | 0.0111 | 1.7289 | 0.0551 | 1.1019 | 1.0468 |
| δNia [mm] | 0.76 | 0.76 | 5.54e-29 | 0.76 | 1 | -2 | 0.76 | 0.76 | 0 |
| ρa [Ω cm ²] | 0.55 | 0.55 | 8.99e-30 | 0.55 | 1 | -2 | 0.55 | 0.55 | 0 |
| δLiKe [mm] | 0.8977 | 0.90 | 0.0007 | 0.90 | -11.2747 | 125.1189 | 0.60 | 0.90 | 0.30 |
| δNiOc [mm] | 0.70 | 0.70 | 1.47e-28 | 0.70 | -1 | -2 | 0.70 | 0.70 | 0 |
| ρc [Ω cm ²] | 0.60 | 0.60 | 1.69e-28 | 0.60 | - | - | 0.60 | 0.60 | 0 |
| O2c [ml/min/cm ²] | 1.4168 | 1.2950 | 0.7140 | 1.2950 | 2.9193 | 9.9390 | 0.1295 | 5.2504 | 5.1209 |
| N2c [ml/min/cm ²] | 8.9424 | 4.8743 | 49.1832 | 4.8717 | 1.5119 | 1.2060 | 0.4872 | 29.1086 | 28.6214 |
| CO2c [ml/min/cm ²] | 2.1558 | 2.1500 | 1.3428 | 2.6667 | 6.7640 | 68.2762 | 0.2667 | 14.2447 | 13.9781 |
| H2Oc [ml/min/cm ²] | 0.7500 | 0 | 1.5571 | 0 | 2.0383 | 3.6942 | 0 | 5 | 5 |
| E _{max} [V] | 0.9472 | 0.9551 | 0.0049 | 0.8624 | -0.7238 | 0.6289 | 0.6529 | 1.0891 | 0.4362 |
| η [-] | 0.3068 | 0.2847 | 0.0469 | 0 | 0.5034 | -0.3357 | 0 | 0.9676 | 0.9676 |
| i _{max} [A/cm ²] | 0.2454 | 0.2499 | 0.0037 | 0.2958 | 0.3766 | 1.2892 | 0.0296 | 0.5917 | 0.5621 |
| r ₁ [Ω] | 2.0015 | 1.9734 | 0.0186 | 1.9734 | 5.4197 | 30.0240 | 1.9734 | 2.9355 | 0.9620 |
| r ₂ [Ω] | 91.8777 | 91.8777 | 3.91e-25 | 91.8777 | - | - | 91.8777 | 91.8777 | 0 |

Tabla 3: Tabla resumen para las variables de los datos fuera del dominio

| Variable | Media | Mediana | Varianza | Moda | Skewness | Kurtosis | Mínimo | Máximo | Rango |
|---------------------------------------|----------|---------|----------|---------|----------|----------|---------|---------|---------|
| Corriente [A/cm ²] | 0.1411 | 0.1389 | 0.0097 | 0.0012 | 0.4171 | -0.6440 | 0.0012 | 0.3531 | 0.3518 |
| Voltaje [V] | 0.7651 | 0.7719 | 0.0559 | 0.1220 | -0.7593 | 0.3929 | 0.1220 | 1.0893 | 0.9673 |
| T [°C] | 650.1200 | 650 | 0.1933 | 650 | 3.6451 | 12.2075 | 650 | 652 | 2 |
| H2a [ml/min/cm ²] | 10.2171 | 13.3333 | 26.0117 | 13.3333 | -0.9800 | -1.0397 | 2.2039 | 13.3333 | 11.1295 |
| H2Oa [ml/min/cm ²] | 0 | 0 | 0 | 0 | - | - | 0 | 0 | 0 |
| N2a [ml/min/cm ²] | 0 | 0 | 0 | 0 | - | - | 0 | 0 | 0 |
| COa [ml/min/cm ²] | 0 | 0 | 0 | 0 | - | - | 0 | 0 | 0 |
| CH4a [ml/min/cm ²] | 0 | 0 | 0 | 0 | - | - | 0 | 0 | 0 |
| CO2a [ml/min/cm ²] | 2.5550 | 3.3333 | 1.6225 | 3.3333 | -0.9800 | -1.0397 | 0.5537 | 3.3333 | 2.7796 |
| δNia [mm] | 0.76 | 0.76 | 1.28e-32 | 0.76 | - | - | 0.76 | 0.76 | 0 |
| ρa [Ω cm ²] | 0.55 | 0.55 | 5.14e-32 | 0.55 | - | - | 0.55 | 0.55 | 0 |
| δLiKe [mm] | 2.6672 | 2.6672 | 8.22e-31 | 2.6672 | - | - | 2.6672 | 2.6672 | 0 |
| δNiOc [mm] | 0.70 | 0.70 | 5.14e-32 | 0.70 | - | - | 0.70 | 0.70 | 0 |
| ρc [Ω cm ²] | 0.60 | 0.60 | 5.14e-32 | 0.60 | - | - | 0.60 | 0.60 | 0 |
| O2c [ml/min/cm ²] | 6.0870 | 7.9506 | 9.3024 | 7.9506 | -0.9800 | -1.0397 | 1.2950 | 7.9506 | 6.6556 |
| N2c [ml/min/cm ²] | 22.8989 | 29.9095 | 131.6472 | 29.9095 | -0.9800 | -1.0397 | 4.8717 | 29.9095 | 25.0378 |
| CO2c [ml/min/cm ²] | 12.5985 | 16.4609 | 39.9590 | 16.4609 | -0.9800 | -1.0397 | 2.6667 | 16.4609 | 13.7942 |
| H2Oc [ml/min/cm ²] | 0.1200 | 0 | 0.1933 | 0 | 3.6451 | 12.2075 | 0 | 2 | 2 |
| E _{max} [V] | 1.0583 | 1.0572 | 0.0042 | 0.9176 | -0.1503 | 0.2913 | 0.9176 | 1.1872 | 0.2696 |
| η [-] | 0.1514 | 0.1169 | 0.0235 | 0.0007 | 1.6787 | 2.0158 | 0.0007 | 0.5927 | 0.5920 |
| i _{max} [A/cm ²] | 1.3715 | 1.7898 | 0.4687 | 1.7898 | -0.9800 | -1.0397 | 0.2958 | 1.7898 | 1.4939 |
| r ₁ [Ω] | 1.9726 | 1.9734 | 9.34e-6 | 1.9734 | -3.6417 | 12.1798 | 1.9596 | 1.9734 | 0.0139 |
| r ₂ [Ω] | 91.8777 | 91.8777 | 2.1e-28 | 91.8777 | - | - | 91.8777 | 91.8777 | 2.8e-14 |

A continuación, en la Figura 19 y Figura 20 se exponen histogramas de los valores de voltaje, así como de las entradas de H₂ y CO₂ al ánodo, y O₂ al cátodo, para los sets de datos dentro y fuera del dominio respectivamente. El objetivo de esto es visualizar como varían estos parámetros entre ambos conjuntos, ya que fuera del dominio hay una mayor dispersión, en conjunto a la presencia de valores extremos. Esta diferencia implica que los datos de entrada fuera del dominio son significativamente distintos a aquellos usados en el entrenamiento y prueba de los modelos desarrollados en este estudio, lo que afectaría negativamente en la exactitud de la predicción del voltaje.

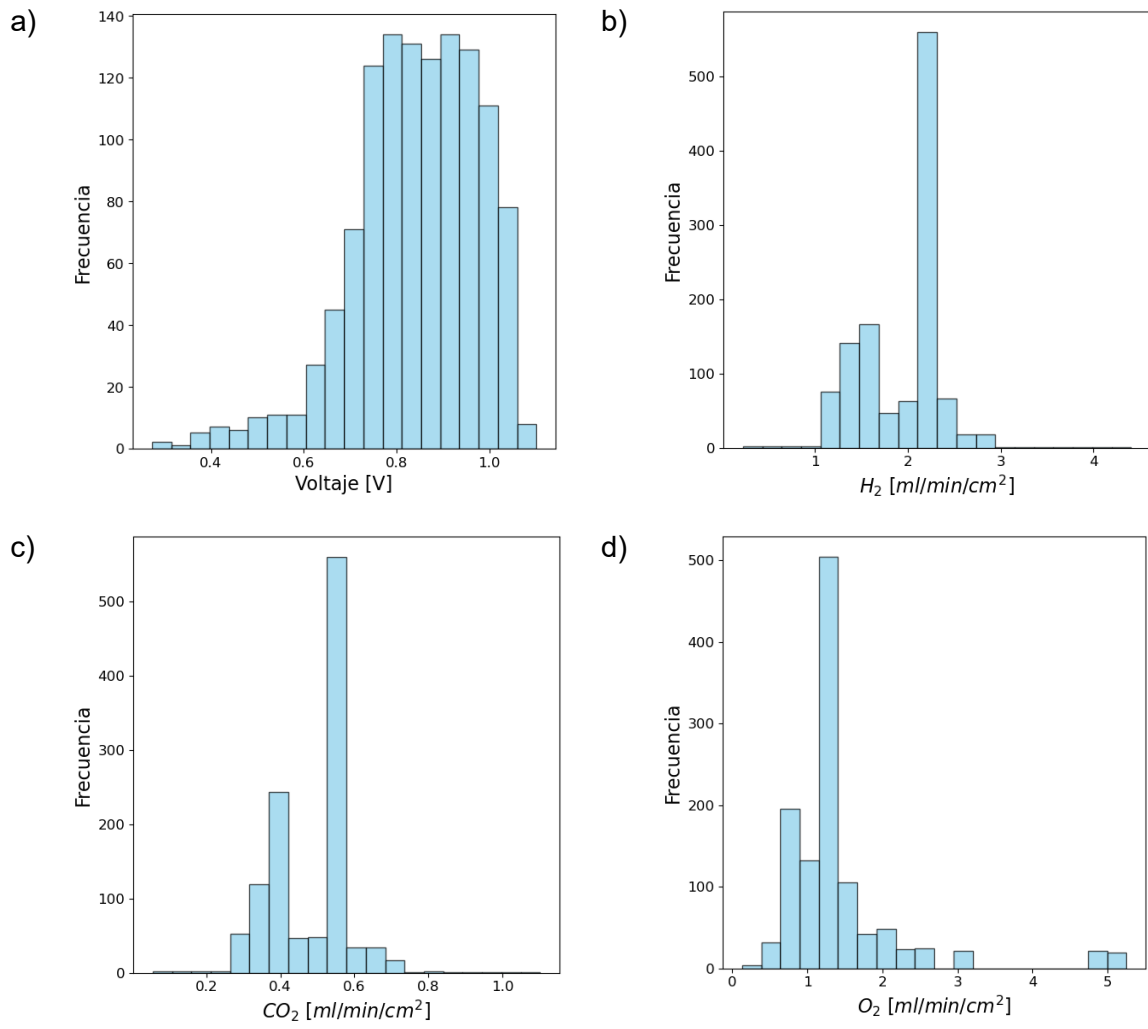


Figura 19: Histogramas valores parámetros de a) voltaje, b) H_2 (entrada ánodo), c) CO_2 (entrada ánodo), y d) O_2 (entrada cátodo) para datos dentro del dominio

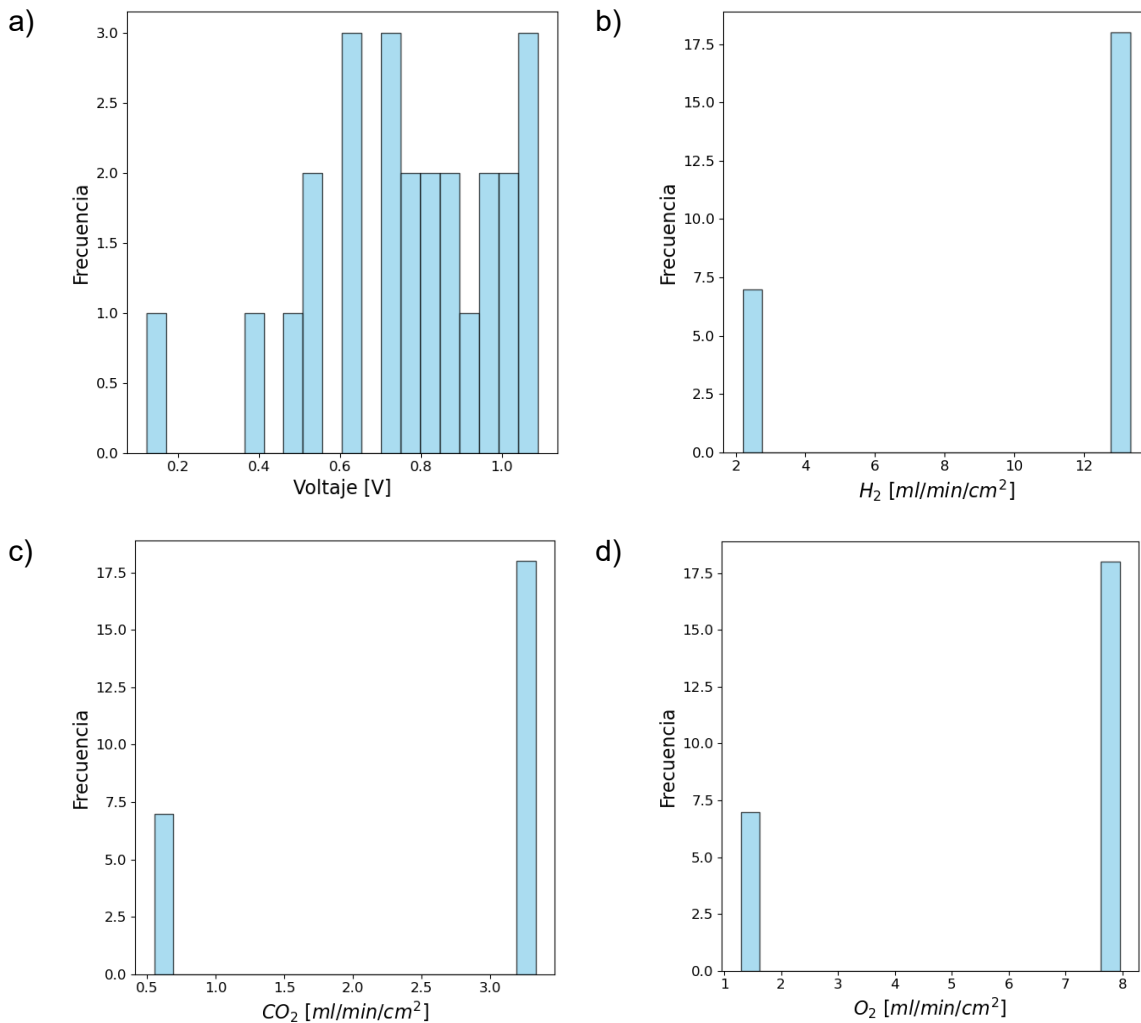


Figura 20: Histogramas valores parámetros de a) voltaje, b) H_2 (entrada ánodo), c) CO_2 (entrada ánodo), y d) O_2 (entrada cátodo) para datos fuera del dominio

3.4 Diseño de la solución

3.4.1 Algoritmo de ANN para datos del experimento 1

En esta etapa del estudio, se realiza un algoritmo ANN con un subset de datos del original, el cual se denominó con anterioridad como experimento 1, esto con el fin de tener un primer acercamiento a como deberá hacerse el modelo para el set de datos completo.

Como se conocen las diferentes condiciones de temperatura en que fueron hecho los ensayos, de 550°C aumentando de a 25°C hasta llegar a los 650°C, tras el preprocesamiento de los datos, se hace una clasificación por clases (temperatura) a modo de que se puedan distinguir que datos corresponden a cada curva de polarización, donde se tuvo que definir una función para crear las clases.

Lo anterior se hace con ayuda de un modelo SVM para la clasificación, y a través de una búsqueda de malla se encuentra la mejor combinación de hiperparámetros. En la Figura 21 se presenta el marco para el modelo de clasificación.

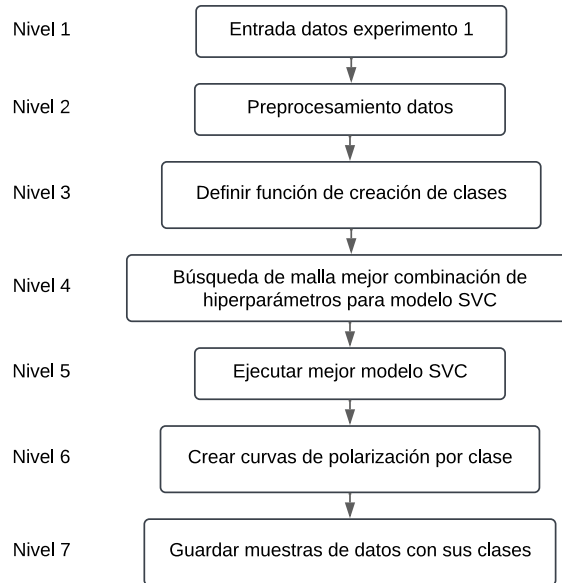


Figura 21: Marco de modelado para la SVC

Es importante destacar que, esto se hará previamente solo para el modelo de ANN de este subset, y no para todos los datos originales, ya que aquí se conoce la cantidad de clases que son, y es posible distinguir las curvas entre una y otra al no ser una cantidad de muestras amplia.

Tras lo anterior, se obtiene el mismo subset de datos más una columna extra que le da la clase predicha a las muestras. Este nuevo conjunto es luego utilizado para el entrenamiento del modelo ANN del experimento 1.

Para encontrar la arquitectura más adecuada del modelo se construye un modelo con Sequential de la biblioteca Keras de 2 capas densas y un optimizador con diferentes hiperparámetros, de modo que con una búsqueda de malla se encuentre la combinación óptima. Luego el modelo con el mejor desempeño es entrenado y guardado como un archivo keras. Es importante mencionar que, al igual que en el modelo SVC anterior, también se hace un preprocesamiento de los datos. En la Figura 22 se muestra el flujo con el que se hizo la ANN.

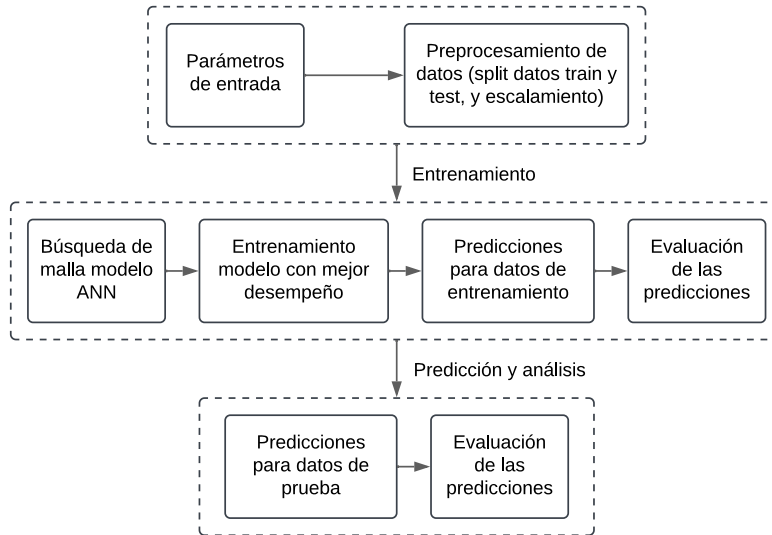


Figura 22: Marco de modelación de ANN para datos experimento 1

Los resultados asociados a esta sección se encuentran en Anexo 1.

3.4.2 Algoritmo de ANN para todo el set de datos

Tras realizar el modelo anterior, se tiene una base sobre cómo debe realizarse la red neuronal para un set de datos más amplio, donde se vuelve a armar un modelo de 2 capas, y también se realiza una búsqueda de malla a modo de encontrar los mejores parámetros para cada capa y el optimizador, siguiendo el mismo marco de modelación que en la Figura 22. También se miden los tiempos de entrenamiento en la búsqueda, junto al uso de RAM antes y después de este.

Luego de encontrar la combinación óptima, se entrena el modelo que presentó el mejor desempeño con una cantidad de épocas pertinente en base a las métricas de evaluación MSE, MAE y R^2 , y se guarda como un archivo keras para que pueda probarse con otros datos fuera del dominio. Los resultados de lo anterior se encuentran en Anexo 2.

3.4.3 Algoritmo de PGNN para todo el set de datos

Para la implementación del modelo PINN se seguirá en cierta forma con el marco de modelación del algoritmo de ANN para todo el set de datos, pero en la etapa del entrenamiento del modelo, específicamente en la búsqueda de malla para el modelo con el mejor desempeño, se cambia la función de pérdida utilizada, que era solo de las pérdidas asociadas a los datos, por la función de pérdida total que involucra las pérdidas vinculadas a los datos, a la regularización de los pesos y a la física del problema (modelo Caso 3). En la Figura 23 se deja el marco de modelación actualizado para el modelo PGNN.

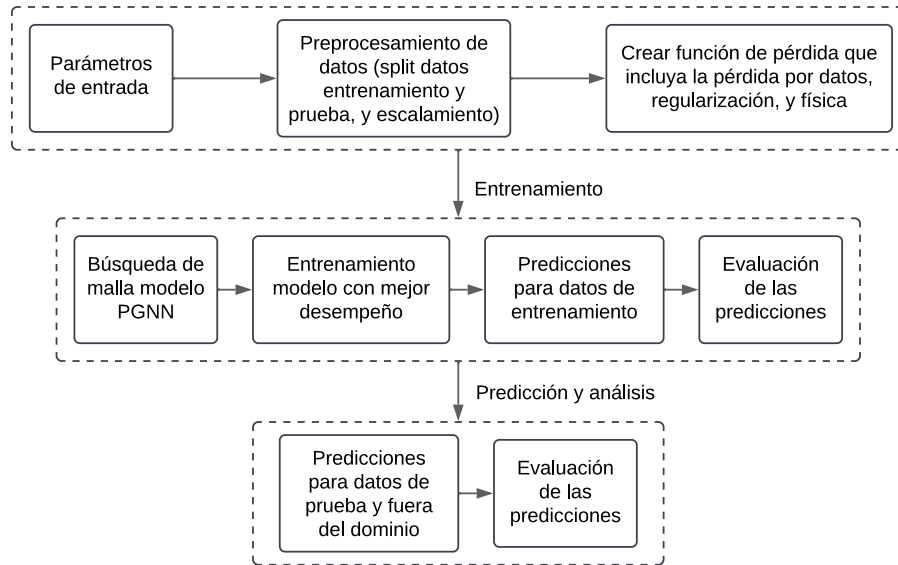


Figura 23: Marco de modelación para PGNN para todos los datos

Es importante destacar que, por cómo se calcula la parte física en la función de pérdida total, se añadieron parámetros de entrada en la red neuronal, los cuales corresponden a los términos utilizados en la Ecuación (6).

Tras la evaluación de las predicciones del modelo PGNN en base a los voltajes obtenidos de forma experimental (para los datos de entrenamiento, prueba y validación), se hará la comparativa entre los resultados obtenidos cuando la función de pérdida solo incluye la pérdida por los datos (modelo Caso 1) y cuando incluye la pérdida por los datos y la regularización de los pesos (modelo Caso 2), esto con el fin de ver la influencia de la física del problema en un modelo que mantiene su arquitectura. Además, en la etapa final de la investigación, se compararán los resultados del mejor modelo de redes neuronales conseguido con un modelo en Aspen HYSYS de la misma MCFC.

3.4.4 Modelos sin semilla

A modo de evaluar la robustez y variabilidad de los modelos (misma arquitectura, pero entrenado con funciones de pérdida distintas), se realizarán, por cada modelo, 1000 entrenamientos, lo que tendrán una inicialización de pesos y un barajado de lotes aleatorio. Luego se verá el comportamiento de cada uno para los datos de entrenamiento, prueba y validación.

4 Resultados

La arquitectura óptima encontrada para el modelo PGNN se presenta en la Tabla 4, esta toma en cuenta tanto los resultados de las métricas para los datos de entrenamiento y prueba, como los que están fuera del dominio. Además, en la Tabla 5 se muestran los valores de los pesos necesarios para cada término de la función de pérdida total, destacando el peso para la componente física el cual cuenta con la mayor ponderación.

Tabla 4: Arquitectura modelo PGNN

| | Tipo | Función de activación | Cantidad de neuronas |
|---------------------|---------------|-----------------------|----------------------|
| Capa oculta #1 | Densa | ReLU | 104 |
| Capa regularizadora | Dropout (0.2) | - | - |
| Capa oculta #2 | Densa | ReLU | 16 |
| Capa regularizadora | Dropout (0.2) | - | - |
| Capa de salida | Densa | - | 1 |
| Optimizador | rmsprop | - | - |

Tabla 5: Valores de los pesos para cada término utilizado en la función de pérdida total

| Tipo de pérdida | Datos | Regularización | Física |
|-----------------|-------|----------------|--------|
| Peso óptimo | 0.399 | 0.001 | 0.6 |

Los errores para los diferentes modelos (misma arquitectura, pero diferente función de pérdida total), con los datos de entrenamiento, prueba y fuera del dominio se pueden observar en la Tabla 6. En la Figura 24 se muestra la evolución del error en el entrenamiento para los distintos modelos, observándose una disminución progresiva en todos los casos. Por su parte, la Figura 25 presenta la evolución del aporte que hace cada término en la función de pérdida total del modelo PGNN, donde todos los componentes disminuyen, destacándose que el término de regularización se reduce de forma más gradual en comparación con los otros dos.

Tabla 6: Errores para diferentes modelos (dependiendo de la función de pérdida utilizada) bajo diferentes métricas de evaluación

| Función de pérdida | Tipo de dato | MSE | MAE | R ² |
|---|-------------------|--------|--------|----------------|
| Caso 1: Solo datos ($\lambda_{data} = 1$) | Entrenamiento | 0.0003 | 0.0103 | 0.9854 |
| | Prueba | 0.0003 | 0.0114 | 0.9830 |
| | Fuera del dominio | 0.2421 | 0.4658 | -3.5138 |
| Caso 2: Datos y regularización ($\lambda_{data} = 0.999, \lambda_{reg} = 0.001$) | Entrenamiento | 0.0009 | 0.0170 | 0.9504 |
| | Prueba | 0.0010 | 0.0188 | 0.9417 |
| | Fuera del dominio | 0.0467 | 0.1672 | 0.1291 |
| Caso 3: Datos, regularización y física (Tabla 5) | Entrenamiento | 0.0007 | 0.0200 | 0.9591 |
| | Prueba | 0.0009 | 0.0210 | 0.9505 |
| | Fuera del dominio | 0.0114 | 0.0711 | 0.7881 |

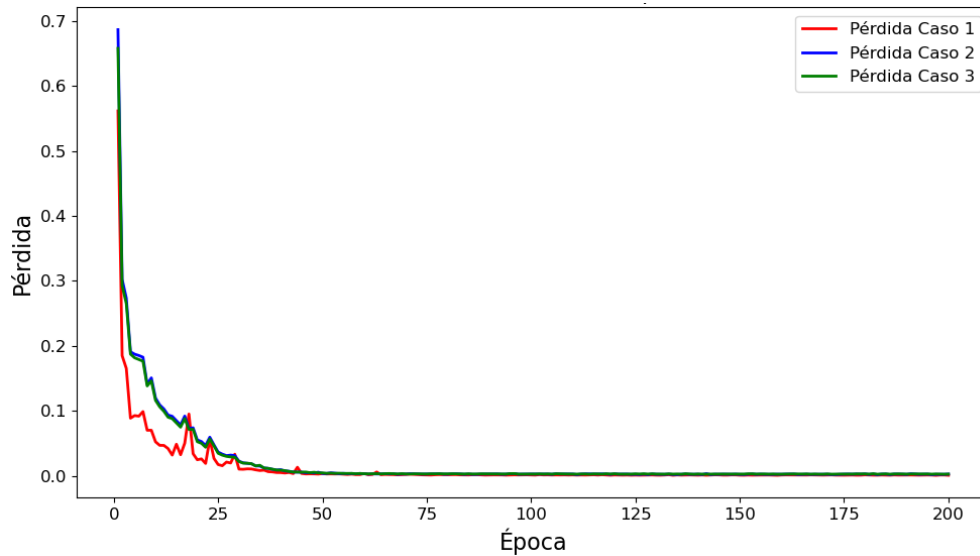


Figura 24: Evolución del error para diferentes modelos dependiendo de la función de pérdida utilizada

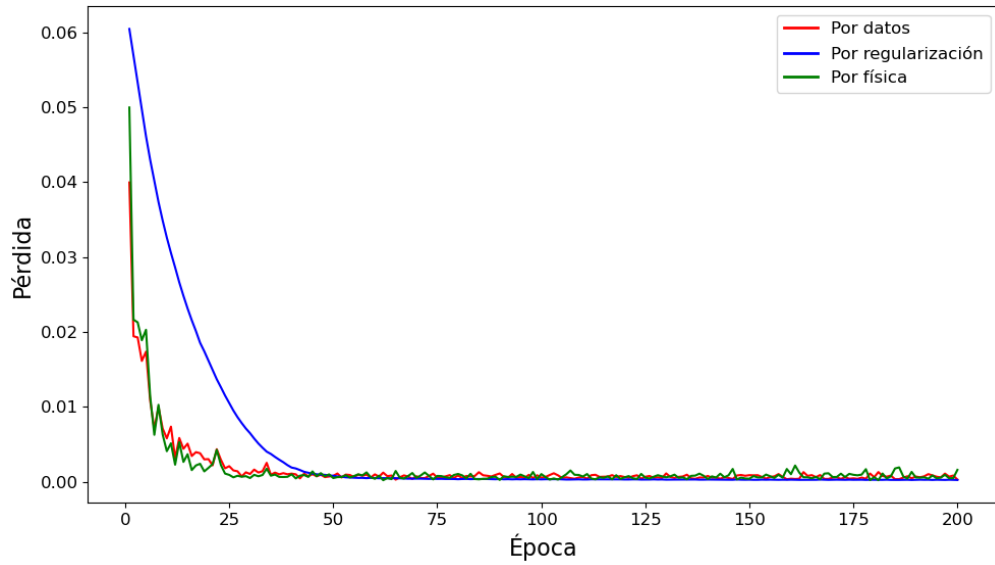


Figura 25: Evolución del error de los elementos que componen la función de pérdida para el Caso 3 (PGNN)

En la Figura 26 se presentan gráficas comparativas entre los voltajes obtenidos de forma experimental y los predichos para los datos fuera del dominio, distinguiéndose que existen tres curvas de polarización en este conjunto, y en la Figura 27 los histogramas del error residual obtenidos para los distintos modelos. En Anexo 3 se presentan los mismos gráficos, pero para los datos de entrenamiento y prueba.

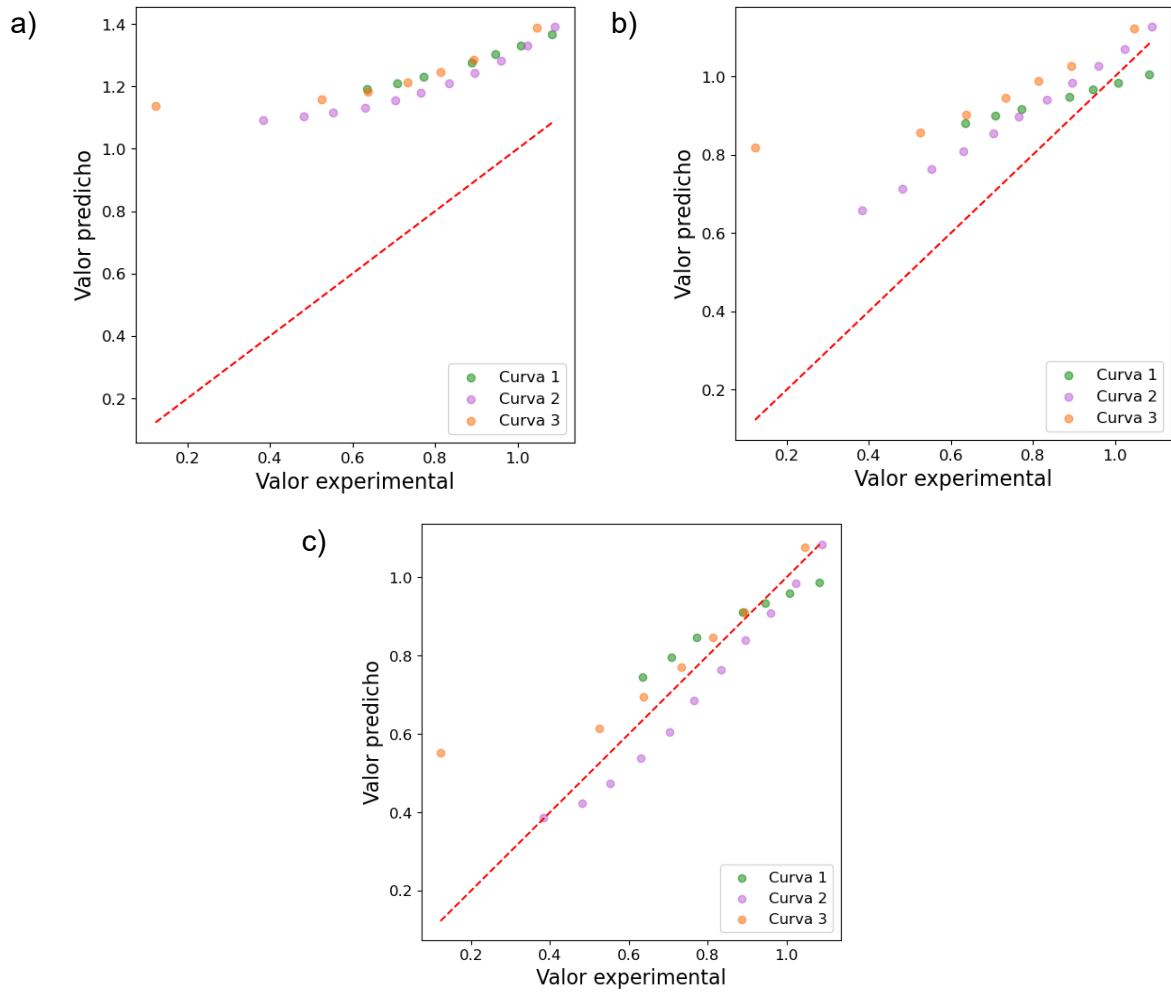


Figura 26: Comparativa entre los valores de voltaje experimentales y predichos para los datos fuera del dominio con el modelo de a) Caso 1, b) Caso 2, y c) Caso 3

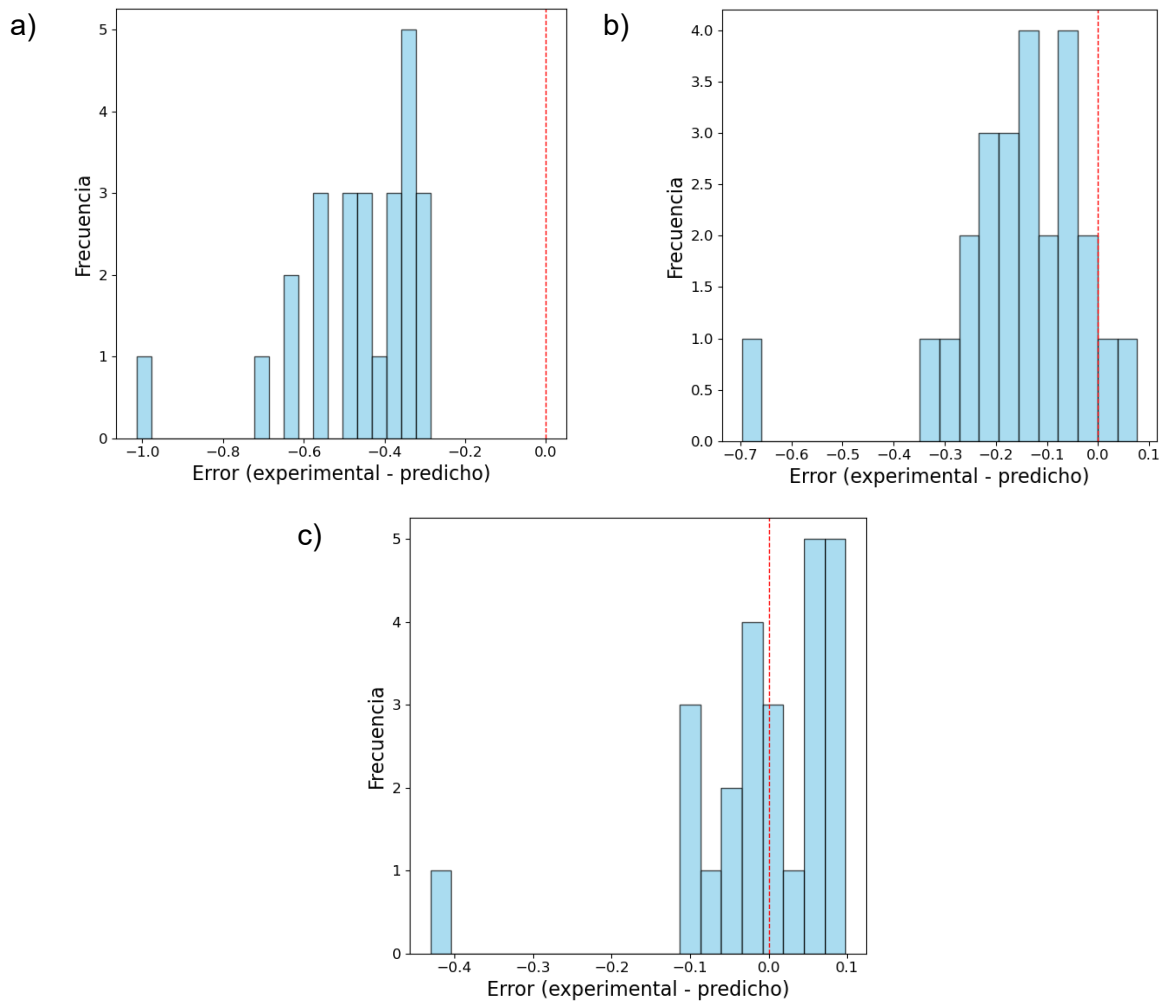


Figura 27: Histogramas del error residual para los datos fuera del dominio con el modelo de a) Caso 1, b) Caso 2, y c) Caso 3

Como es posible observar en la Figura 26, el Caso 1 y Caso 2 evidencian una mayor dispersión en las predicciones en comparación al Caso 3, que tiene predicciones más cercanas a la referencia real. De forma complementaria, en la Figura 27, respecto a los errores residuales, para el Caso 1 y Caso 2 hay una mayor dispersión de ellos, mientras que en el Caso 3, se concentran más alrededor del 0 y tienen una menor magnitud.

A continuación, en la Tabla 7 se presenta, para cada modelo, el valor medio y varianza del error dependiendo del tipo de dato, destacándose para los datos fuera del dominio el Caso 3, que cuenta con el menor valor de la media y varianza.

Tabla 7: Valor medio y varianza del error residual para cada caso

| Función de pérdida | Tipo de dato | Media | Varianza |
|--|-------------------|---------|----------|
| Caso 1: Solo datos ($\lambda_{data} = 1$) | Entrenamiento | 0.0035 | 0.0003 |
| | Prueba | 0.0029 | 0.0003 |
| | Fuera del dominio | -0.4658 | 0.0252 |
| Caso 2: Datos y regularización ($\lambda_{data} = 0.999, \lambda_{reg} = 0.001$) | Entrenamiento | -0.0090 | 0.0008 |
| | Prueba | -0.0116 | 0.0008 |
| | Fuera del dominio | -0.1591 | 0.0214 |
| Caso 3: Datos, regularización y física (Tabla 5) | Entrenamiento | 0.0115 | 0.0006 |
| | Prueba | 0.0102 | 0.0008 |
| | Fuera del dominio | -0.0086 | 0.0113 |

En la Figura 28, Figura 29, y Figura 30 se exponen las curvas de polarización, potencia y rendimiento respectivamente, para valores experimentales y predichos fuera del dominio bajo los distintos modelos, donde se puede ver que el Caso 3 muestra el mejor ajuste en todas las curvas en comparación con los demás casos. Las mismas curvas para los conjuntos de datos de entrenamiento y prueba se encuentran en Anexo 3.

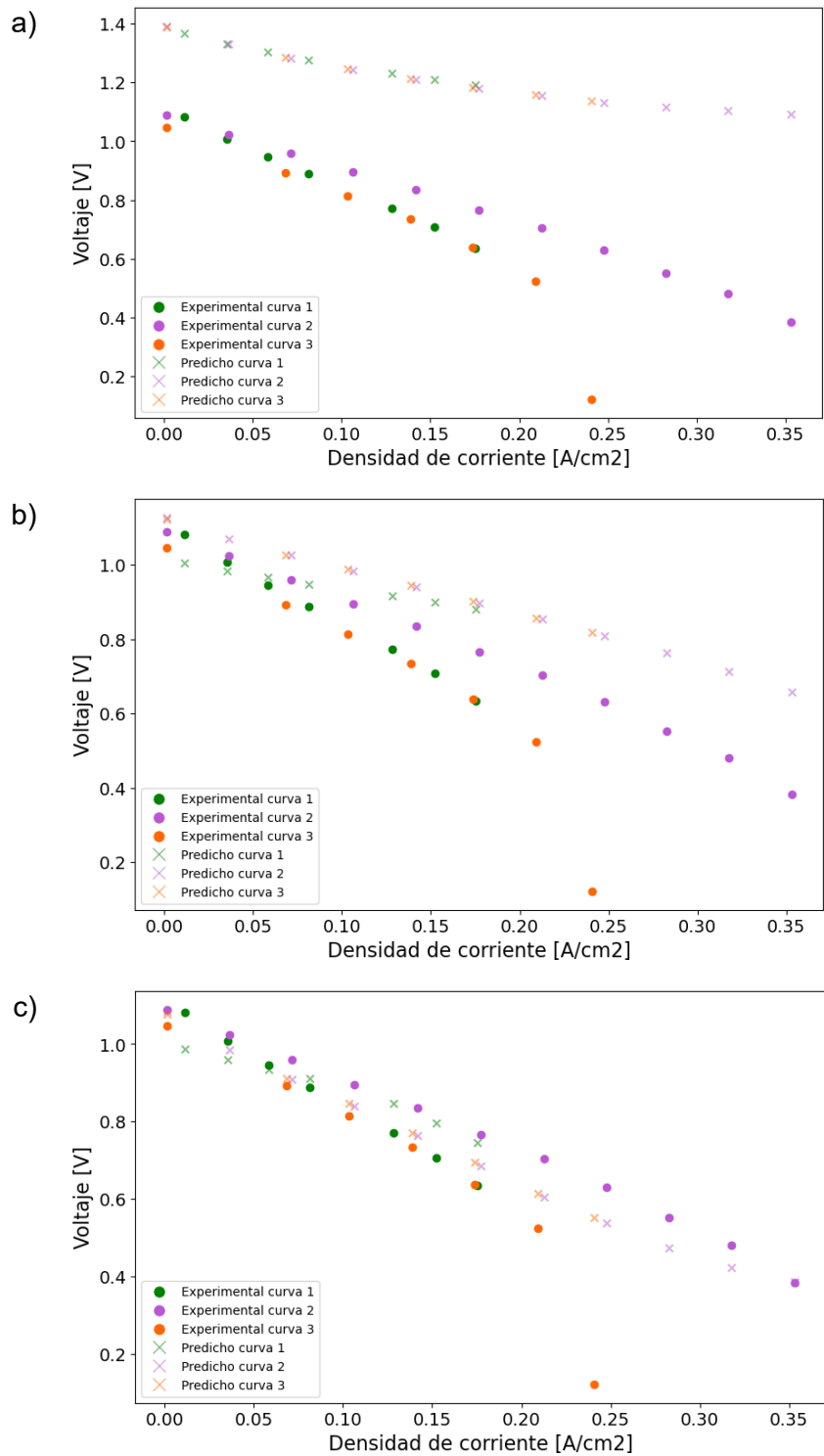


Figura 28: Curvas de polarización para valores experimentales y predichos de los datos fuera del dominio con el modelo de a) Caso 1, b) Caso 2, y c) Caso 3

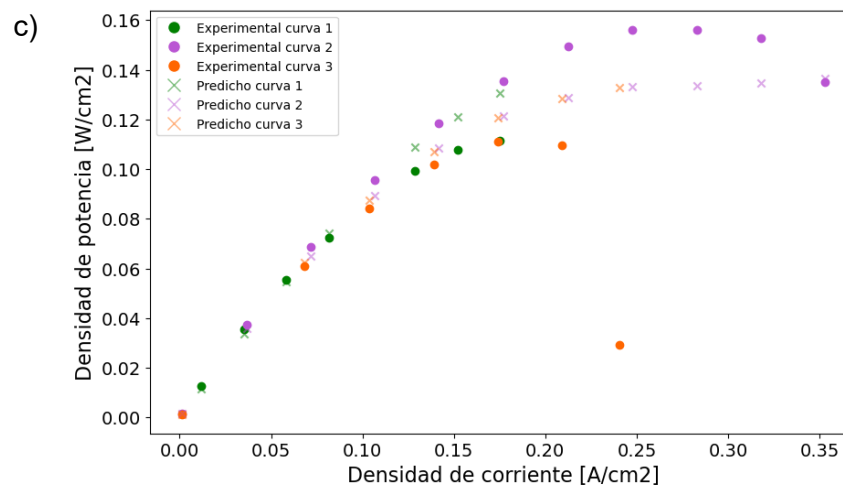
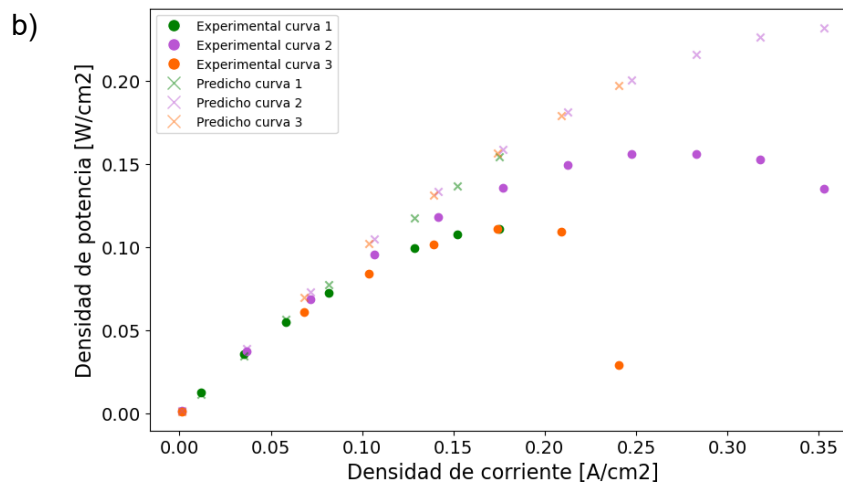
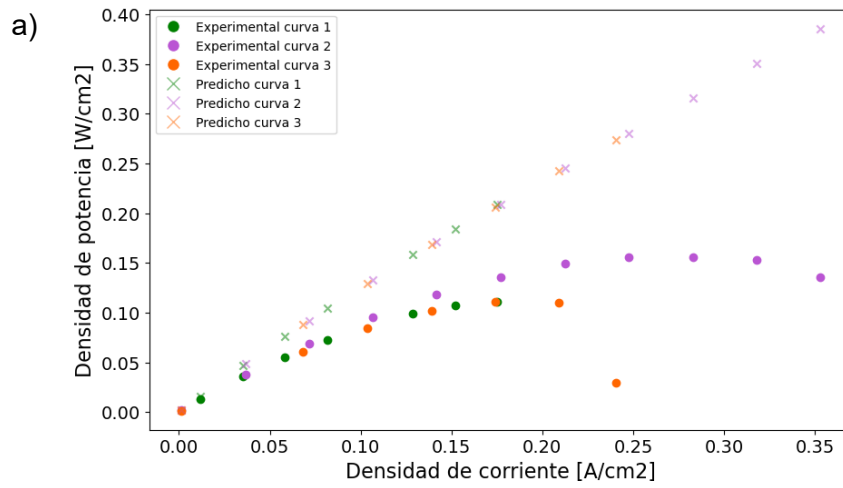


Figura 29: Curvas de potencia para valores experimentales y predichos de los datos fuera del dominio con el modelo de a) Caso 1, b) Caso 2, y c) Caso 3

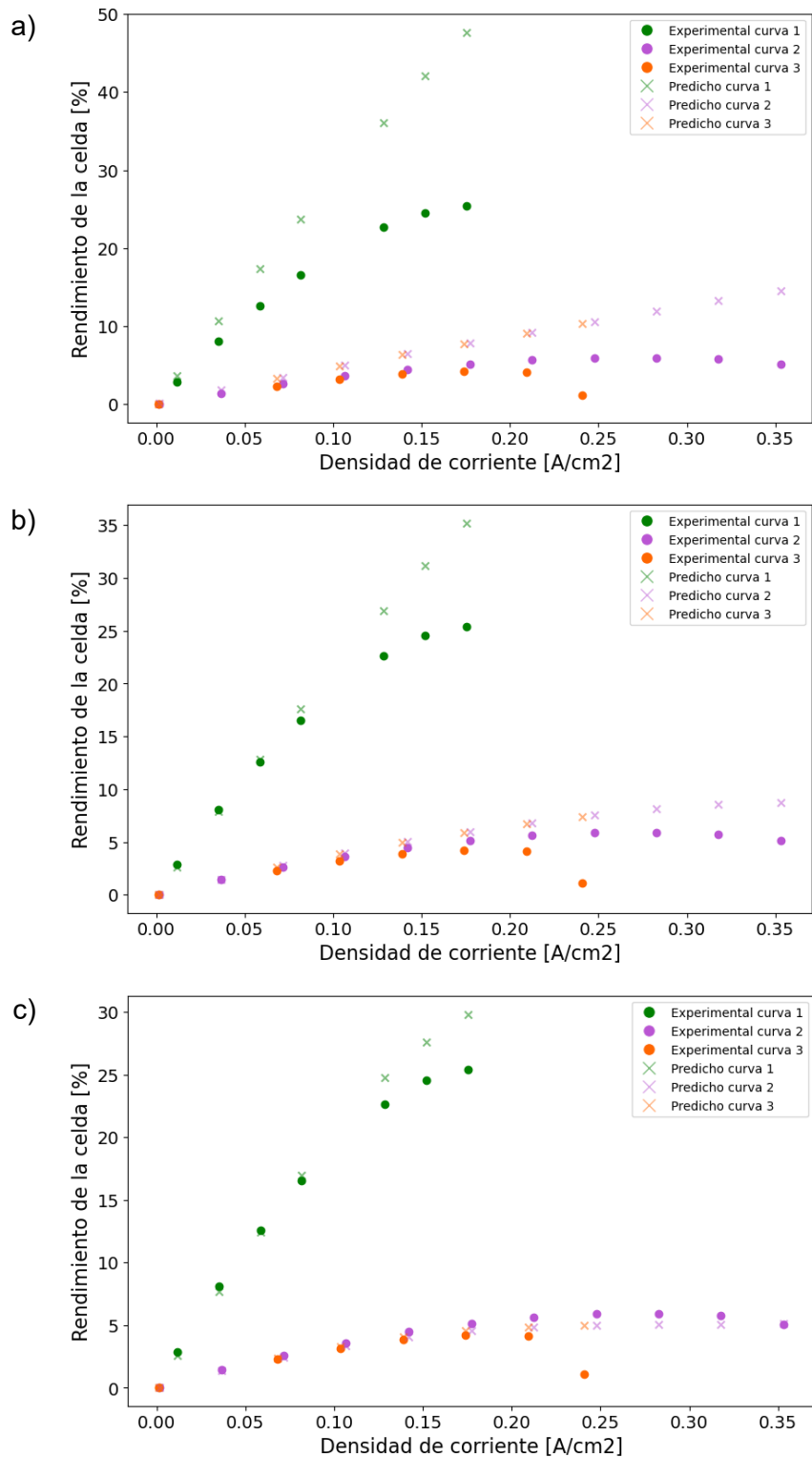


Figura 30: Curvas de rendimiento para valores experimentales y predichos de los datos fuera del dominio con el modelo de a) Caso 1, b) Caso 2, y c) Caso 3

Siguiendo con la Figura 31, Figura 32, y Figura 33, en ellas se presentan diagramas de cajas y bigotes, de cada métrica utilizada para evaluar los modelos según su función de

pérdida, para los datos de entrenamiento, prueba, y fuera del dominio respectivamente. En Anexo 4 se presentan los mismos diagramas, pero separados por tipo de dato para una mejor visualización.

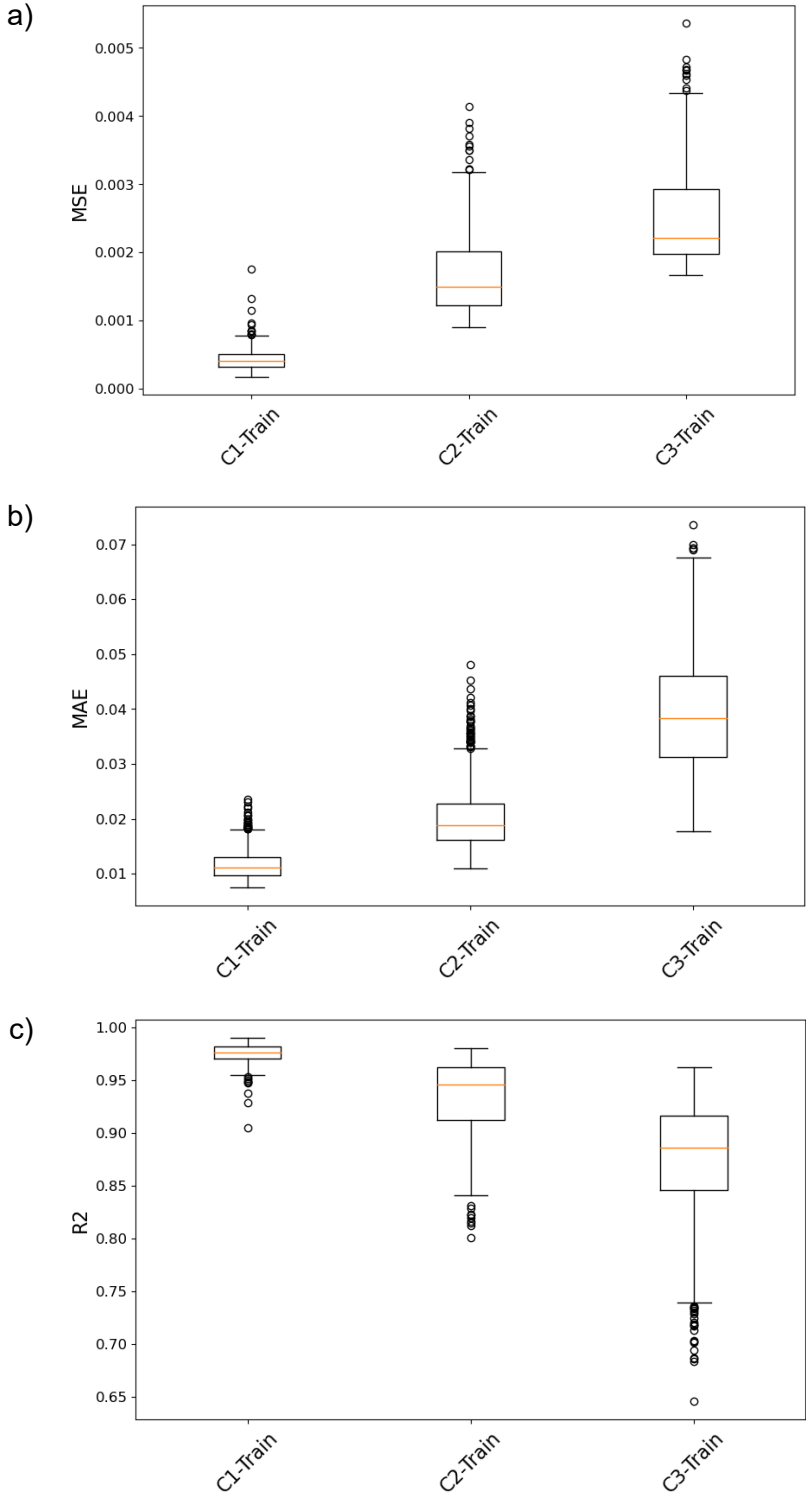


Figura 31: Diagramas de cajas y bigotes para las métricas a) MSE, b) MAE, y c) R2, y distintos modelos según su función de pérdida total (datos de entrenamiento)

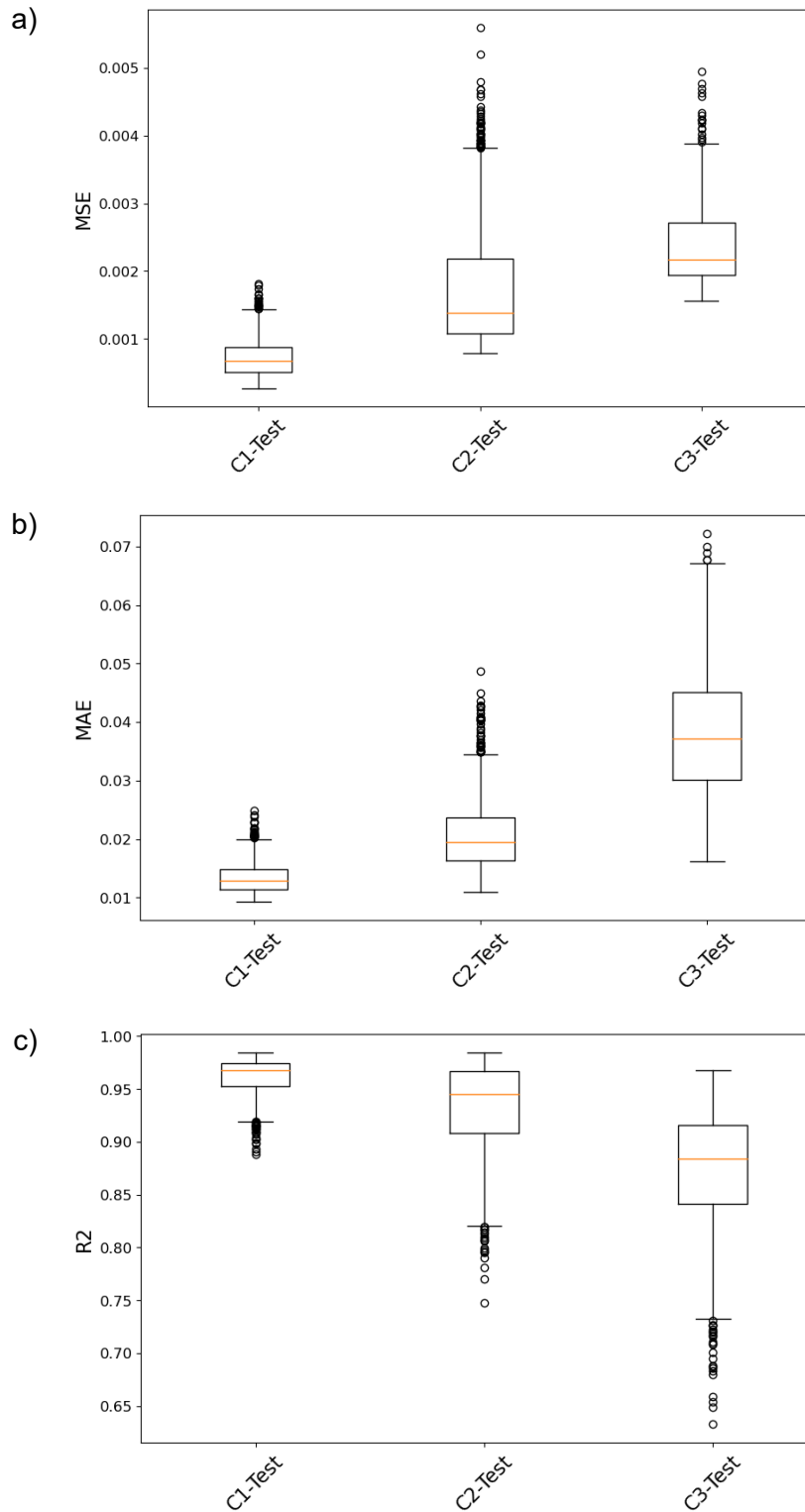


Figura 32: Diagramas de cajas y bigotes para las métricas a) MSE, b) MAE, y c) R2, y distintos modelos según su función de pérdida total (datos de prueba)

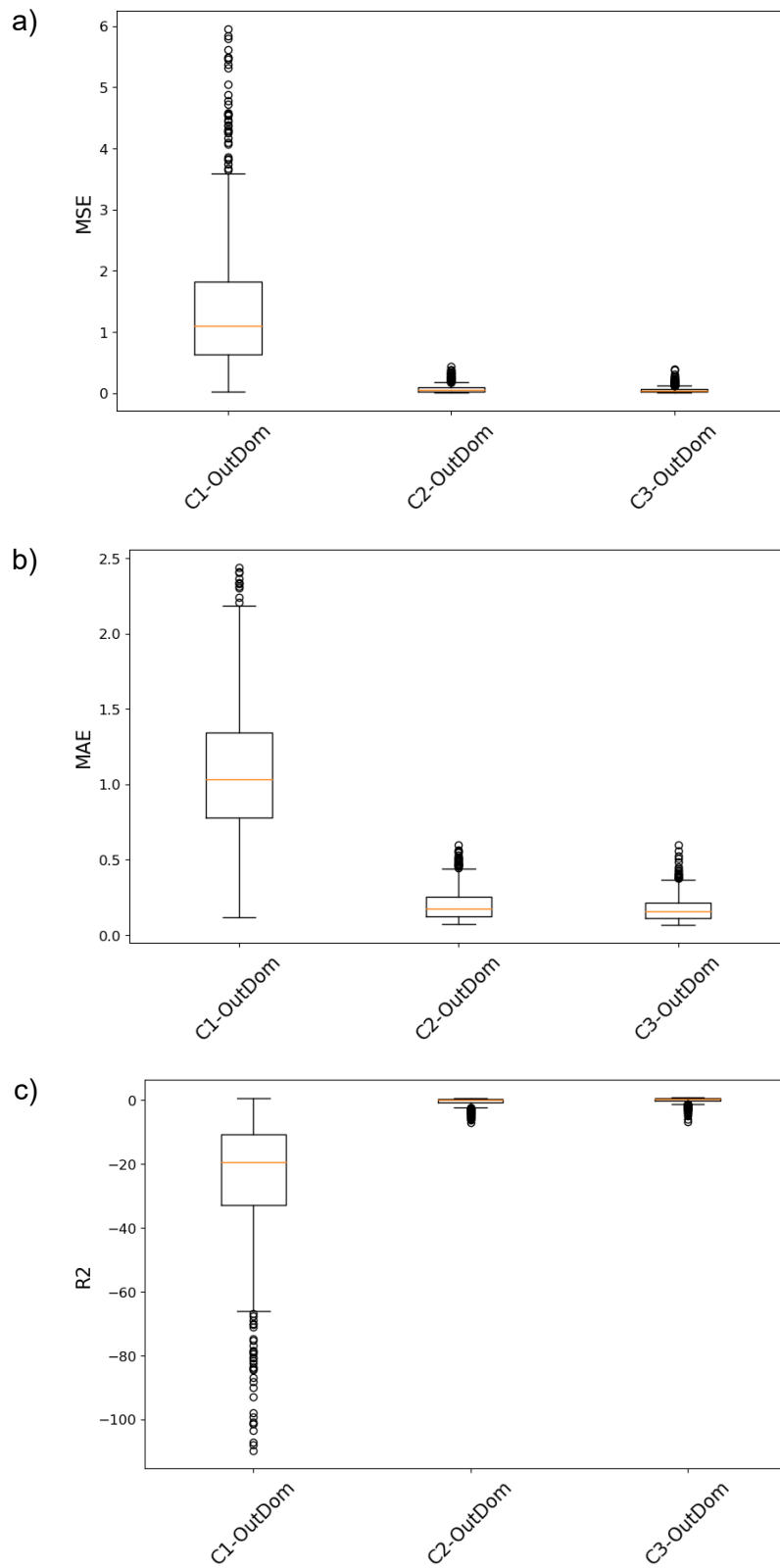


Figura 33: Diagramas de cajas y bigotes para las métricas a) MSE, b) MAE, y c) R2, y distintos modelos según su función de pérdida total (datos fuera del dominio)

De los diagramas anteriores, para las predicciones de los datos dentro del dominio (entrenamiento y prueba), el Caso 1 presenta los mejores resultados, no así cuando se utiliza el conjunto fuera del dominio, pues ahí el Caso 3 cuenta con la menor dispersión y error.

A modo de resumen de los diagramas de cajas y bigotes de las métricas usadas para evaluar los distintos modelos, cuando se trataba de los datos fuera del dominio, se muestra la Tabla 8.

Tabla 8: Resumen diagramas de cajas y bigotes de los distintos modelos para los datos fuera del dominio

| Función de pérdida | Métrica | Mínimo | Q1 | Q2 (mediana) | Q3 | Máximo | IQR |
|--------------------|---------|-----------|----------|--------------|----------|--------|---------|
| Caso 1 | MSE | 0.0240 | 0.6314 | 1.0976 | 1.8176 | 5.9475 | 1.1862 |
| | MAE | 0.1192 | 0.7787 | 1.0353 | 1.3406 | 2.4356 | 0.5619 |
| | R2 | -109.8822 | -32.8864 | -19.4638 | -10.7710 | 0.5531 | 22.1154 |
| Caso 2 | MSE | 0.0139 | 0.0290 | 0.0485 | 0.0892 | 0.4348 | 0.0603 |
| | MAE | 0.0746 | 0.1256 | 0.1758 | 0.2529 | 0.5965 | 0.1273 |
| | R2 | -7.1041 | -0.6595 | 0.1038 | 0.4687 | 0.7524 | 1.1281 |
| Caso 3 | MSE | 0.0057 | 0.0209 | 0.0357 | 0.0622 | 0.3962 | 0.0413 |
| | MAE | 0.0658 | 0.1134 | 0.1607 | 0.2171 | 0.5989 | 0.1037 |
| | R2 | -6.6146 | -0.1816 | 0.3055 | 0.5682 | 0.7949 | 0.7499 |

Además, en la Tabla 9 se presentan los valores de la media y del intervalo de confianza (IC) para los distintos modelos para los datos fuera del dominio (para los de dentro del dominio revisar Anexo 4). Se utiliza un IC del 95% por ser el valor estándar en análisis estadísticos y con ello se obtiene que el Caso 3 es superior a los demás ya que presenta los menores errores y variabilidad (IC más estrecho).

Tabla 9: Medias e intervalos de confianza (95%) para las métricas de evaluación de los distintos modelos para los datos fuera del dominio

| Función de pérdida | Métrica | Media | IC 95% inferior | IC 95% superior |
|--------------------|----------------|----------|-----------------|-----------------|
| Caso 1 | MSE | 1.3563 | 0.1349 | 4.1736 |
| | MAE | 1.0742 | 0.3288 | 2.0380 |
| | R ² | -24.2863 | -76.8099 | -1.5149 |
| Caso 2 | MSE | 0.0709 | 0.0170 | 0.2560 |
| | MAE | 0.2014 | 0.0854 | 0.4613 |
| | R ² | -0.3140 | -3.1106 | 0.6930 |
| Caso 3 | MSE | 0.0497 | 0.0094 | 0.1636 |
| | MAE | 0.1752 | 0.0760 | 0.3555 |
| | R ² | 0.0476 | -2.0827 | 0.7630 |

Continuando con la comparación en desempeño entre un modelo de la MCFC hecho en Aspen HYSYS y el creado con ML, en la Tabla 10 se dejan los resultados de las diferentes métricas bajo ambos modelos y para distintos conjuntos de datos. En este caso, el modelo físico supera en generalización a la PGNN.

Tabla 10: Comparación de errores en modelo hecho en Aspen HYSYS y en modelo PGNN bajo diferentes métricas de evaluación

| Modelo | Tipo de dato | MSE | MAE | R ² |
|----------------------|-----------------------------|--------|--------|----------------|
| Modelo Aspen HYSYS | Dentro del dominio (subset) | 0.0027 | 0.0169 | 0.7714 |
| | Fuera del dominio | 0.0065 | 0.0425 | 0.8789 |
| Modelo PGNN (Caso 3) | Dentro del dominio (subset) | 0.0004 | 0.0172 | 0.9662 |
| | Fuera del dominio | 0.0114 | 0.0711 | 0.7881 |

5 Conclusiones

Tras realizar la búsqueda de malla para determinar la configuración óptima del modelo PGNN, se definió una arquitectura basada en una red neuronal densa con dos capas ocultas, compuestas por 104 y 16 neuronas respectivamente, cada una seguida de una capa Dropout de 0.2, empleada para mitigar el sobreajuste. La elevada cantidad de neuronas en la primera capa sugiere una alta capacidad de aprendizaje por parte del modelo, mientras que el uso de Dropout actúa como mecanismo de regularización frente al aumento de parámetros. La red concluye con una capa de salida de una sola neurona (modelo de regresión), para predecir el voltaje de la celda de combustible tipo MCFC.

Durante el entrenamiento, se utilizó una función de pérdida compuesta por tres términos con diferentes ponderaciones. El componente asociado a las pérdidas físicas recibió el mayor peso (0.6), lo que evidencia la prioridad otorgada a la consistencia física del sistema durante el ajuste de los parámetros del modelo.

Al comparar los tres casos presentados en la Tabla 6, se observa que el modelo entrenado exclusivamente con datos (Caso 1) presenta un excelente ajuste dentro del dominio de entrenamiento, pero falla completamente al extrapolar, evidenciado por errores elevados y un R^2 negativo fuera del dominio. La incorporación de regularización (Caso 2) mejora levemente la capacidad de generalización, pero aún resulta insuficiente. En cambio, al incluir información física en la función de pérdida (Caso 3), el modelo logra un balance más robusto, manteniendo un rendimiento aceptable dentro del dominio y mejorando significativamente su capacidad predictiva fuera de él, alcanzando un R^2 de 0.7881. Esto confirma que el enfoque PGNN no solo reduce el sobreajuste, sino que también permite capturar el comportamiento físico del sistema, mejorando las predicciones cuando ciertos valores de los parámetros de entrada no se encuentran dentro del dominio.

Es importante destacar que, pese a haber alcanzado mejores resultados con PGNN en las predicciones de los datos de validación, aún existe una brecha entre esos resultados y los de entrenamiento y prueba (R^2 de 0.9591 y de 0.9505 respectivamente). Esto sugiere que el modelo guiado por la física sigue sobreajustándose para los datos que están dentro del dominio, limitando su capacidad para generalizar adecuadamente frente a datos fuera de él. Dicho comportamiento se asocia a que los modelos PGNN, en su mayoría, carecen de la suficiente robustez para garantizar una extrapolación fiable. A raíz de lo anterior es que en la literatura se han desarrollado enfoques más avanzados como los modelos PINN, sin embargo, dentro del presente estudio, por los datos disponibles se debió limitar a un modelo PGNN.

Pasando a la evolución del error durante el entrenamiento de los distintos modelos, si bien todos convergen a valores similares de pérdida tras las 50 épocas aproximadamente, el modelo del Caso 1 converge a una mayor velocidad al minimizar únicamente el error sobre los datos, pero, como se vio en la Tabla 6, sufre de sobreajuste. En cambio, los modelos con términos de regularización y pérdida física (Caso 2 y 3) tienen un proceso más complejo de entrenamiento, por lo que convergen más lento, pero conducen a soluciones más fiables frente a datos fuera del dominio, especialmente el modelo PGNN.

Al analizar cada componente del error durante el entrenamiento del modelo del Caso 3, se evidencia un aprendizaje coordinado entre ellos, donde en las primeras épocas los 3 términos disminuyen de manera simultánea y sostenida, indicando que el modelo es capaz de equilibrar adecuadamente el ajuste a los datos, a la regularización y a la física del problema. A partir de las 50 épocas aproximadamente, los tres errores se estabilizan cerca de 0, mostrando que se ha alcanzado una solución óptima sin dominancia de un componente sobre otro. Esto confirma la efectividad de las ponderaciones dadas a los términos en la función de pérdida, y respalda la capacidad del modelo para incorporar conocimiento físico, sin comprometer la calidad del ajuste sobre los datos experimentales.

Tras graficar los valores de voltaje experimentales y predichos para los datos fuera del dominio visualmente es notorio que el modelo PGNN es el que se aproxima más a los valores reales al tener una alineación más cercana a la diagonal, sin embargo, pese a que se trata de un modelo más exacto carece de precisión.

El análisis conjunto, de los histogramas de los errores residuales y la Tabla 7, permite caracterizar el comportamiento del error residual de los modelos evaluados, tanto dentro como fuera del dominio. Dentro del dominio se observa que los 3 modelos tienen sus errores concentrados alrededor de cero, aunque con diferencias relevantes. El Caso 1 pese a su buena precisión y baja varianza, tiene una ligera diferencia en la distribución del error entre ambos conjuntos, lo que podría anticipar una limitada capacidad de generalización. En el Caso 2, al incluir la regularización a la función de pérdida introduce un leve sesgo negativo y una mayor varianza, lo que refleja una penalización al ajuste para evitar el sobreajuste. Pasando al Caso 3, tiene varianzas similares a las del Caso 2, con un leve sesgo positivo, lo que también refleja un balance entre el ajuste y control del sobreajuste.

Fuera del dominio, el Caso 1 presenta un alto sesgo negativo (media de -0.4658) y una varianza más elevada (0.0252), lo que señala una tendencia sistemática a sobreestimar el voltaje y una alta dispersión en las predicciones. En el Caso 2 se observa una mejora parcial, el sesgo se reduce (media de -0.1591) y la varianza baja levemente (0.0214), aunque persiste una distribución amplia y sistemática del error como se demuestra en su histograma. Siguiendo con el Caso 3, el sesgo es aún más bajo (media de -0.0086) y la varianza también es menor (0.0113), además, su histograma muestra una distribución más centrada y compacta en comparación a los demás modelos, lo que evidencia que es el modelo más estable, con el menor sesgo sistemático y con una menor incertidumbre a la extrapolación.

Para cada modelo se generaron las curvas de polarización, densidad de potencia y rendimiento correspondientes a los distintos conjuntos de datos, con el objetivo de analizar su comportamiento global, especialmente en el caso de los datos fuera del dominio. Tal como se anticipaba a partir de los gráficos comparativos entre los valores de voltaje experimental y predicho, se confirmó que el modelo PGNN (Caso 3) presentó el mejor desempeño frente a los datos de validación, superando a los demás tanto en términos cuantitativos como en la fidelidad estructural de las curvas, reproduciendo de manera más realista el comportamiento del sistema.

Para poder comprobar la robustez del modelo, frente a la aleatoriedad en la inicialización de los pesos y un barajado de lotes distinto, se realizaron 1000 entrenamientos sin semillas por cada caso según su función de pérdida total. A través de los diagramas de cajas y bigotes se observa un patrón claro: el modelo del Caso 1 se ajusta con precisión a los datos dentro del dominio, pero esto hace que sufra de sobreajuste y pierda su capacidad predictiva para datos fuera de él, con errores altamente dispersos y sesgo evidente. El Caso 2 mejora en generalización gracias a la regularización, pero aún muestra limitaciones. Mientras que el Caso 3, demuestra el mejor equilibrio entre precisión y robustez, evidenciado por su reducido rango intercuartílico (IQR) y su mayor simetría. Además, al analizar la media de las métricas de evaluación para los modelos, en conjunto al IC, se observa que el Caso 1 falla completamente fuera del dominio, con R^2 dentro del IC negativos y altos errores, el Caso 2 mejora en comparación, pero aún tiene un R^2 negativo en su media, mientras que el Caso 3 termina siendo el más robusto fuera del dominio, con los menores errores promedio y R^2 positivo en media. Aunque, igualmente se debe mencionar que, dentro del dominio, el Caso 1 se mantiene con el mejor desempeño.

Siguiendo con la comparación entre el desempeño del modelo PGNN con un modelo de la MCFC desarrollado en Aspen HYSYS, se observa que ambos modelos presentan resultados favorables bajo distintos contextos. Dentro del dominio (subset), el modelo de redes neuronales logra un ajuste notablemente superior en términos de MSE y R^2 , lo que indica una mayor capacidad para capturar la relación no lineal específica de los datos entrenados. Sin embargo, el MAE es similar entre ambos modelos, lo que sugiere que, en términos del error absoluto medio, ambos modelos son comparables. Fuera del dominio, el modelo en Aspen HYSYS supera al PGNN en las tres métricas evaluadas, esto se debe a que es un modelo basado en ecuaciones determinísticas, lo cual haría que mantenga su validez incluso en condiciones no vistas, no así el de redes neuronales, que sigue limitado por su dependencia a los datos usados durante su entrenamiento.

Tomando en cuenta lo anterior, los modelos físicos, como el hecho en Aspen HYSYS, siguen siendo más robustos y confiables, no obstante, es crítico considerar el tiempo y la flexibilidad de desarrollo e iteración de cada modelo. Mientras que el modelo en Aspen HYSYS requiere de un conocimiento profundo del proceso físico, una formulación detallada de balances, y una selección correcta de paquetes termodinámicos, lo que podría resultar en un proceso más largo y menos flexible para ajustes rápidos, el modelo PGNN permite una iteración más ágil, ya que tras haber entrenado el modelo inicial, hacer nuevos entrenamientos, ajustar la arquitectura o probar nuevos conjuntos de datos, se vuelve algo significativamente más rápido.

En conclusión, si bien el modelo PGNN no logró enfrentar completamente el sobreajuste, si pudo reducirlo en comparación a los demás modelos (basado en datos o regularización), mejorando el desempeño sobre los datos fuera del dominio sin tener que sacrificar significativamente la precisión en los datos dentro de él. Lo anterior refuerza la utilidad de incorporar conocimiento físico en la función de pérdida para la red neuronal, aunque esto no significa que este enfoque no cuenta con limitaciones, especialmente en entornos que requieren de una alta robustez ante datos desconocidos. Además, al ser modelos de redes neuronales, es importante destacar que, pese a los obstáculos antes mencionados, son

algoritmos de bajo costo computacional en comparación a otros tipos de modelos (no de ML), lo que resulta un beneficio si se necesitan predicciones en poco tiempo.

Considerando además que ya se han utilizado herramientas de ML para escalar las predicciones de una celda a un sistema multicelda, los modelos que incorporan conocimiento físico podrían proyectarse como una herramienta viable en entornos industriales reales, tales como sistemas de cogeneración que empleen MCFC para generación eléctrica y térmica. La capacidad para realizar predicciones fuera del dominio de entrenamiento también los posiciona como modelos prometedores en plantas piloto, donde la variabilidad en la composición del gas o la degradación de componentes aún no está completamente caracterizada. Asimismo, su implementación en esquemas de captura de CO₂ acoplados a calderas industriales o turbinas de gas permitiría optimizar el rendimiento del sistema. Por tanto, el modelo PGNN no solo constituye una herramienta de predicción, sino también un componente potencial dentro de estrategias de control predictivo o gemelos digitales aplicados a sistemas energéticos híbridos.

En base a lo anterior, se sugiere como trabajo futuro evaluar la implementación de modelos PINN, los cuales son más sofisticados y entregan una integración más rigurosa de la física del sistema, a modo de mejorar tanto la precisión como la exactitud del modelo frente a escenarios de extrapolación más exigentes. No obstante, para optar por este enfoque, es necesario contar con datos temporales que representen adecuadamente la dinámica de las celdas.

Referencias

- [1] K. O. Yoro and M. O. Daramola, "CO₂ emission sources, greenhouse gases, and the global warming effect," in *Advances in Carbon Capture: Methods, Technologies and Applications*, Elsevier, 2020, pp. 3–28. doi: 10.1016/B978-0-12-819657-1.00001-3.
- [2] "Climate TRACE Releases February 2025 Emissions Data ," Climate TRACE. Accessed: Jun. 29, 2025. [Online]. Available: <https://climatetrace.org/news/climate-trace-releases-february-2025-emissions-data#:~:text=Greenhouse%20gas%20emissions%20increased%20year,February%202024>.
- [3] Ministerio de Energía, "Planificación Energética de Largo Plazo (PELP) Periodo 2023-2027 ," Santiago, 2024. Accessed: Mar. 25, 2025. [Online]. Available: <https://energia.gob.cl/pelp/repositorio>
- [4] "Inaguramos la planta de almacenamiento energético más grande de Latinoamérica," Gob.cl. Accessed: Apr. 29, 2025. [Online]. Available: <https://www.gob.cl/noticias/inaguramos-la-planta-la-planta-de-almacenamiento-energetico-mas-grande-de-latinoamerica/>
- [5] "Proyecto Celda Solar. 'Colbún y Tesla Impulsan Energía Sostenible en Camarones,'" Ministerio de Energía, Gobierno de Chile. Accessed: Apr. 29, 2025. [Online]. Available: <https://energia.gob.cl/noticias/arica-y-parinacota/proyecto-celda-solar-colbun-y-tesla-impulsan-energia-sostenible-en-camarones>
- [6] M. Maisch, "Greenergy, CATL seal 1.25 GWh battery supply deal for Oasis de Atacama," pv magazine energy storage. Accessed: Apr. 29, 2025. [Online]. Available: <https://www.ess-news.com/2024/10/29/greenergy-catl-seal-1-25-gwh-battery-supply-deal-for-oasis-deatacama/>
- [7] Ministerio de Energía, "Estrategia nacional de hidrógeno verde," Santiago, 2020. Accessed: Mar. 25, 2025. [Online]. Available: <https://energia.gob.cl/h2/Estrategia-nacional-de-hidrogeno-verde>
- [8] L. Fan, Z. Tu, and S. H. Chan, "Recent development of hydrogen and fuel cell technologies: A review," *Energy Reports*, vol. 7, pp. 8421–8446, Nov. 2021, doi: 10.1016/j.egy.2021.08.003.
- [9] C. Janiesch, P. Zschech, and K. Heinrich, "Machine learning and deep learning," *Electronic Markets*, vol. 31, no. 3, 2021, doi: 10.1007/s12525-021-00475-2.
- [10] Y. Wang, B. Seo, B. Wang, N. Zamel, K. Jiao, and X. C. Adroher, "Fundamentals, materials, and machine learning of polymer electrolyte membrane fuel cell technology," *Energy and AI*, vol. 1, p. 100014, Aug. 2020, doi: 10.1016/J.EGYAI.2020.100014.
- [11] L. Spampanato, M. C. Pera, D. Hissel, and G. Spagnuolo, "Performance parametric analysis of a PEMFC model," in *IEEE International Symposium on Industrial Electronics*, 2010. doi: 10.1109/ISIE.2010.5637736.

- [12] S. Huang, C. Yang, H. Chen, N. Zhou, and D. Tucker, "Coupling impacts of SOFC operating temperature and fuel utilization on system net efficiency in natural gas hybrid SOFC/GT system," *Case Studies in Thermal Engineering*, vol. 31, p. 101868, Mar. 2022, doi: 10.1016/J.CSITE.2022.101868.
- [13] L. Caprile, B. Passalacqua, and A. Torazza, "Carbon capture: Energy wasting technologies or the MCFCs challenge?," *Int J Hydrogen Energy*, vol. 36, no. 16, pp. 10269–10277, Aug. 2011, doi: 10.1016/J.IJHYDENE.2010.10.028.
- [14] A. Hilmi, C. Yuh, and M. Farooque, "FUEL CELLS – MOLTEN CARBONATE FUEL CELLS | Anodes," *Encyclopedia of Electrochemical Power Sources*, pp. 454–461, Jan. 2009, doi: 10.1016/B978-044452745-5.00264-1.
- [15] T. Y. Kim, B. S. Kim, T. C. Park, and Y. K. Yeo, "Development of Predictive Model based Control Scheme for a Molten Carbonate Fuel Cell (MCFC) Process," *Int J Control Autom Syst*, vol. 16, no. 2, 2018, doi: 10.1007/s12555-016-0234-0.
- [16] J. Milewski, W. Bujalski, M. Wołowicz, K. Futyma, J. Kucowski, and R. Bernat, "Experimental investigation of CO₂ separation from lignite flue gases by 100 cm² single Molten Carbonate Fuel Cell," *Int J Hydrogen Energy*, vol. 39, no. 3, pp. 1558–1563, Jan. 2014, doi: 10.1016/J.IJHYDENE.2013.08.144.
- [17] L. Duan, L. Yue, T. Feng, H. Lu, and J. Bian, "Study on a novel pressurized MCFC hybrid system with CO₂ capture," *Energy*, vol. 109, pp. 737–750, Aug. 2016, doi: 10.1016/J.ENERGY.2016.05.074.
- [18] J. L. Silveira, E. Martins Leal, and L. F. Ragonha, "Analysis of a molten carbonate fuel cell: cogeneration to produce electricity and cold water," *Energy*, vol. 26, no. 10, pp. 891–904, Oct. 2001, doi: 10.1016/S0360-5442(01)00038-X.
- [19] A. A. Sheikh, F. R. Bianchi, D. Bove, and B. Bosio, "A review on MCFC matrix: State-of-the-art, degradation mechanisms and technological improvements," 2024. doi: 10.1016/j.heliyon.2024.e25847.
- [20] H. Morita, M. Kawase, Y. Mugikura, and K. Asano, "Degradation mechanism of molten carbonate fuel cell based on long-term performance: Long-term operation by using bench-scale cell and post-test analysis of the cell," *J Power Sources*, vol. 195, no. 20, 2010, doi: 10.1016/j.jpowsour.2010.04.084.
- [21] T. A. Barckholtz *et al.*, "Experimental and Modeling Investigation of CO₃⁼/OH⁻ Equilibrium Effects on Molten Carbonate Fuel Cell Performance in Carbon Capture Applications," *Front Energy Res*, vol. 9, 2021, doi: 10.3389/fenrg.2021.669761.
- [22] S. Song, X. Xiong, X. Wu, and Z. Xue, "Modeling the SOFC by BP neural network algorithm," *Int J Hydrogen Energy*, vol. 46, no. 38, pp. 20065–20077, Jun. 2021, doi: 10.1016/J.IJHYDENE.2021.03.132.
- [23] W. Huo, W. Li, Z. Zhang, C. Sun, F. Zhou, and G. Gong, "Performance prediction of proton-exchange membrane fuel cell based on convolutional neural network and random forest feature selection," *Energy Convers Manag*, vol. 243, 2021, doi: 10.1016/j.enconman.2021.114367.

- [24] A. A. Shah, F. Yu, W. W. Xing, and P. K. Leung, "Machine learning for predicting fuel cell and battery polarisation and charge–discharge curves," *Energy Reports*, vol. 8, 2022, doi: 10.1016/j.egy.2022.03.191.
- [25] H. Chen *et al.*, "Online voltage consistency prediction of proton exchange membrane fuel cells using a machine learning method," *Int J Hydrogen Energy*, vol. 46, no. 69, pp. 34399–34412, Oct. 2021, doi: 10.1016/J.IJHYDENE.2021.08.003.
- [26] G. Xu, Z. Yu, L. Xia, C. Wang, and S. Ji, "Performance improvement of solid oxide fuel cells by combining three-dimensional CFD modeling, artificial neural network and genetic algorithm," *Energy Convers Manag*, vol. 268, 2022, doi: 10.1016/j.enconman.2022.116026.
- [27] A. Martsinchyk, J. Milewski, O. Dybiński, A. Szczeńniak, M. Siekierski, and K. Świrski, "Experimental investigation of novel molten borate fuel cell supported by an artificial neural network for electrolyte composition selection," *Energy*, vol. 279, 2023, doi: 10.1016/j.energy.2023.127921.
- [28] V. Subotić, M. Eibl, and C. Hochenauer, "Artificial intelligence for time-efficient prediction and optimization of solid oxide fuel cell performances," *Energy Convers Manag*, vol. 230, 2021, doi: 10.1016/j.enconman.2020.113764.
- [29] K. Chen, S. Laghrouche, and A. Djerdir, "Proton Exchange Membrane Fuel Cell Prognostics Using Genetic Algorithm and Extreme Learning Machine," *Fuel Cells*, vol. 20, no. 3, 2020, doi: 10.1002/fuce.201900085.
- [30] J. Milewski, A. Szczeńniak, Ł. Szablowski, O. Dybiński, and A. Miller, "Artificial neural network model of molten carbonate fuel cells: Validation on experimental data," *Int J Energy Res*, vol. 43, no. 13, 2019, doi: 10.1002/er.4608.
- [31] A. Legala, J. Zhao, and X. Li, "Machine learning modeling for proton exchange membrane fuel cell performance," *Energy and AI*, vol. 10, 2022, doi: 10.1016/j.egyai.2022.100183.
- [32] H. W. Li, J. N. Liu, Y. Yang, G. L. Lu, and B. X. Qiao, "Coupling flow channel optimization and Bagging neural network to achieve performance prediction for proton exchange membrane fuel cells with varying imitated water-drop block channel," *Int J Hydrogen Energy*, vol. 47, no. 94, 2022, doi: 10.1016/j.ijhydene.2022.09.164.
- [33] T. Ko, D. Kim, J. Park, and S. H. Lee, "Physics-informed neural network for long-term prognostics of proton exchange membrane fuel cells," *Appl Energy*, vol. 382, p. 125318, Mar. 2025, doi: 10.1016/J.APENERGY.2025.125318.
- [34] I. Zerrougui, Z. Li, and D. Hissel, "Physics-Informed Neural Network for modeling and predicting temperature fluctuations in proton exchange membrane electrolysis," *Energy and AI*, vol. 20, p. 100474, May 2025, doi: 10.1016/J.EGYAI.2025.100474.
- [35] J. L. Valverde, V. R. Ferro, and A. Giroir-Fendler, "Automation in the simulation of processes with Aspen HYSYS: An academic approach," *Computer Applications in Engineering Education*, vol. 31, no. 2, 2023, doi: 10.1002/cae.22589.

- [36] J. Milewski, A. Szczyński, and Ł. Szablowski, "A proton conducting solid oxide fuel cell—implementation of the reduced order model in available software and verification based on experimental data," *J Power Sources*, vol. 502, 2021, doi: 10.1016/j.jpowsour.2021.229948.
- [37] A. Szczyński, J. Milewski, Ł. Szablowski, W. Bujalski, and O. Dybiński, "Dynamic model of a molten carbonate fuel cell 1 kW stack," *Energy*, vol. 200, 2020, doi: 10.1016/j.energy.2020.117442.
- [38] F. Wang *et al.*, "A comprehensive review on high-temperature fuel cells with carbon capture," *Appl Energy*, vol. 275, 2020, doi: 10.1016/j.apenergy.2020.115342.
- [39] J. Milewski, K. Świrski, M. Santarelli, and P. Leone, "Advanced methods of solid oxide fuel cell modeling," *Green Energy and Technology*, vol. 40, 2014, doi: 10.1007/978-0-85729-262-9.
- [40] C. Anderson, "How to predict fuel cell performance," Fuel Cell Store. Accessed: Apr. 27, 2025. [Online]. Available: <https://www.fuelcellstore.com/blog-section/fuel-cell-information/how-to-predict-fuel-cell-performance>
- [41] Y. chen Wu and J. wen Feng, "Development and Application of Artificial Neural Network," *Wirel Pers Commun*, vol. 102, no. 2, 2018, doi: 10.1007/s11277-017-5224-x.
- [42] Aurélien Géron, *Hands-on machine learning with Scikit-Learn, Keras and TensorFlow: concepts, tools, and techniques to build intelligent systems*. 2019.
- [43] "Keras documentation: GridSearch Tuner," Keras. Accessed: Apr. 27, 2025. [Online]. Available: https://keras.io/keras_tuner/api/tuners/grid/
- [44] D. Passos and P. Mishra, "A tutorial on automatic hyperparameter tuning of deep spectral modelling for regression and classification tasks," *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, vol. 223, p. 104520, Apr. 2022, doi: 10.1016/J.CHEMOLAB.2022.104520.
- [45] S. Cuomo, V. S. Di Cola, F. Giampaolo, G. Rozza, M. Raissi, and F. Piccialli, "Scientific Machine Learning Through Physics-Informed Neural Networks: Where we are and What's Next," *J Sci Comput*, vol. 92, 2022, doi: 10.1007/s10915-022-01939-z.
- [46] S. A. Faroughi *et al.*, "Physics-Guided, Physics-Informed, and Physics-Encoded Neural Networks and Operators in Scientific Computing: Fluid and Solid Mechanics," *J Comput Inf Sci Eng*, vol. 24, no. 4, 2024, doi: 10.1115/1.4064449.
- [47] E. Gallup, T. Gallup, and K. Powell, "Physics-guided neural networks with engineering domain knowledge for hybrid process modeling," *Comput Chem Eng*, vol. 170, 2023, doi: 10.1016/j.compchemeng.2022.108111.
- [48] "train_test_split," scikit-learn. Accessed: Apr. 25, 2025. [Online]. Available: https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.model_selection.train_test_split.html

- [49] H. Anysz, A. Zbiciak, and N. Ibadov, "The Influence of Input Data Standardization Method on Prediction Accuracy of Artificial Neural Networks," in *Procedia Engineering*, 2016. doi: 10.1016/j.proeng.2016.08.081.
- [50] D. Chanal, N. Y. Steiner, D. Chamagne, and M. C. Pera, "Impact of standardization applied to the diagnosis of LT-PEMFC by Fuzzy C-Means clustering," in *2021 IEEE Vehicle Power and Propulsion Conference, VPPC 2021 - Proceedings*, 2021. doi: 10.1109/VPPC53923.2021.9699234.
- [51] J. Milewski, W. Bujalski, M. Wołowicz, K. Futyma, J. Kucowski, and R. Bernat, "Experimental investigation of CO₂ separation from hard coal flue gases by 100 cm² molten carbonate fuel cell," in *Applied Mechanics and Materials*, 2013. doi: 10.4028/www.scientific.net/AMM.302.97.

Anexos

Anexo 1: Modelo para datos experimento 1

Tras la obtención del modelo de SVC para la clasificación de los datos del experimento 1, siendo la clase 0 la de temperatura de 550°C llegando hasta la clase 4 que es la de temperatura a los 650°C, se obtuvo que la precisión para los datos de entrenamiento fue de 0.8, mientras que para los datos de prueba fue de 0.89, y en la Figura 34 se muestra una gráfica de las curvas de polarización por clase para los valores experimentales y los predichos.

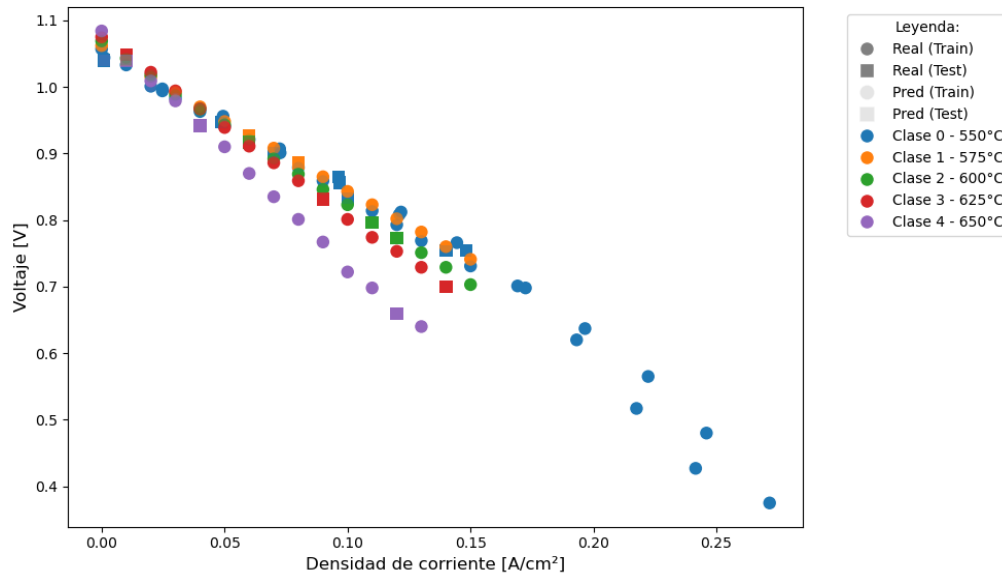


Figura 34: Curvas de polarización clases reales y predichas

Siguiendo con la parte del modelo ANN para los datos, que queda con la arquitectura de la Tabla 11, en la Tabla 12 se presentan los valores sus errores, y en la Figura 35 se muestran las curvas de polarización para los datos experimentales y predichos.

Tabla 11:Arquitectura modelo ANN para datos experimento 1

| | Tipo | Función de activación | de | Cantidad de neuronas |
|----------------|---------|-----------------------|----|----------------------|
| Capa oculta #1 | Densa | ReLU | | 16 |
| Capa oculta #2 | Densa | ReLU | | 8 |
| Capa de salida | Densa | - | | 1 |
| Optimizador | rmsprop | - | | - |

Tabla 12: Errores del modelo ANN (experimento 1) bajo diferentes métricas de evaluación

| Tipo de dato | MSE | MAE | R ² |
|---------------|--------|--------|----------------|
| Entrenamiento | 0.0001 | 0.0061 | 0.9936 |
| Prueba | 0.0001 | 0.0063 | 0.9952 |

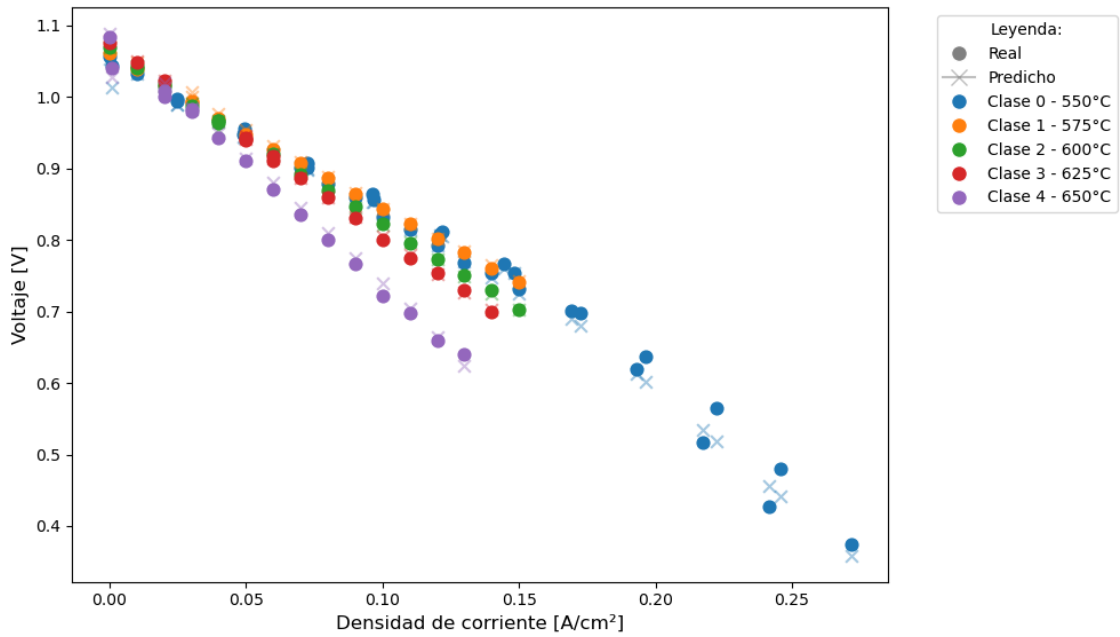


Figura 35: Curvas de polarización por clase para datos reales y predichos

Anexo 2: Modelo para datos de todos los experimentos

Para la obtención del modelo ANN de todos los datos, que cuenta con la arquitectura mostrada en la Tabla 13, el tiempo que tomo hacer la búsqueda de malla fue de 8 minutos con 20 segundos, con un uso de RAM inicial de 58.3% y final de 57.4%.

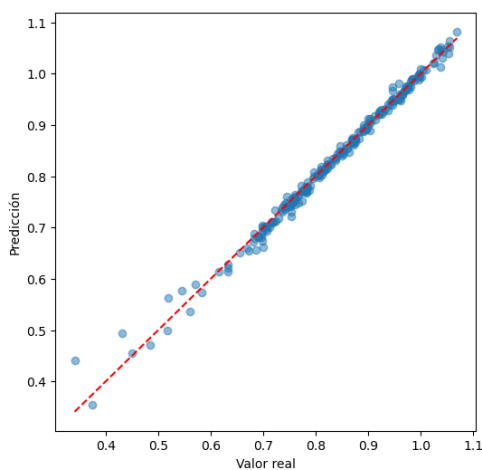
Tabla 13: Arquitectura modelo ANN para datos de todos los experimentos

| | Tipo | Función de activación | Cantidad de neuronas |
|----------------|-------|-----------------------|----------------------|
| Capa oculta #1 | Densa | ReLU | 160 |
| Capa oculta #2 | Densa | Tanh | 32 |
| Capa de salida | Densa | - | 1 |
| Optimizador | Adam | - | - |

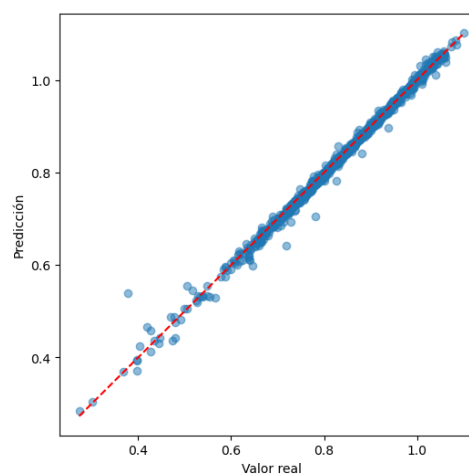
Los errores del modelo con los datos de entrenamiento y prueba se pueden observar en la Tabla 14, y en la Figura 36 se presenta una gráfica comparativa entre los voltajes experimentales y los predichos.

Tabla 14: Errores del modelo ANN (todos los datos) bajo diferentes métricas de evaluación

| Tipo de dato | MSE | MAE | R ² |
|---------------|--------|--------|----------------|
| Entrenamiento | 0.0002 | 0.0077 | 0.9912 |
| Prueba | 0.0001 | 0.0056 | 0.9942 |



a) Datos de entrenamiento



b) Datos de prueba

Figura 36: Comparativa entre los valores de voltaje experimentales y predichos

En las Figura 37, Figura 38, y Figura 39 se presentas las curvas de polarización, potencia y rendimiento de la celda respectivamente, para los valores experimentales y predichos.

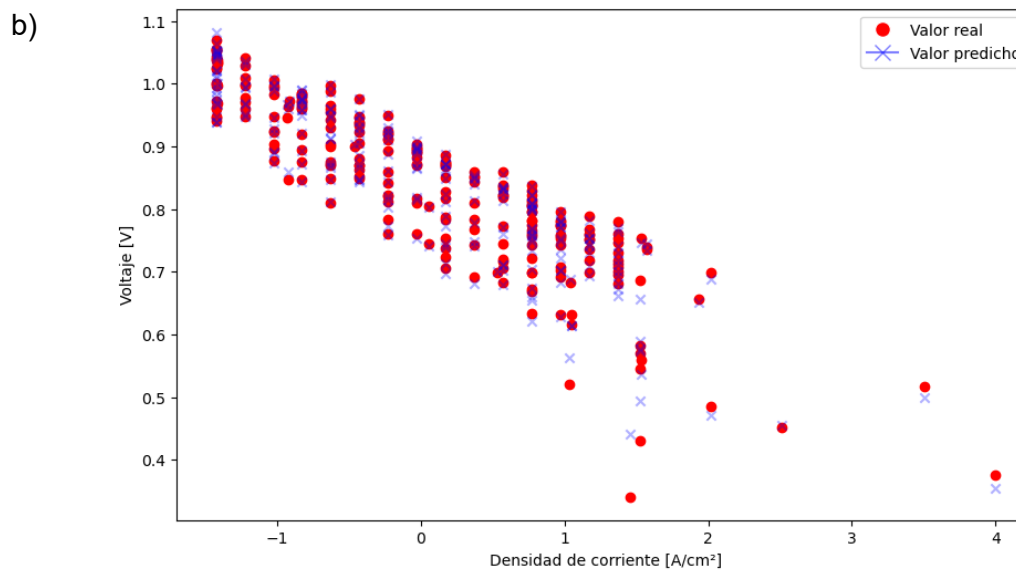
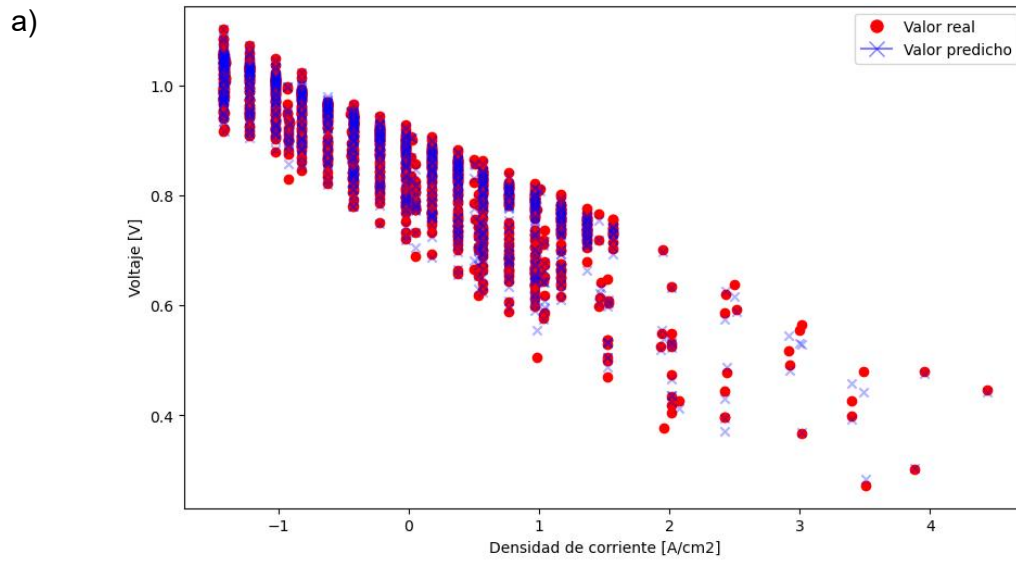


Figura 37: Curvas de polarización para valores experimentales y predichos de los datos de a) entrenamiento y b) prueba

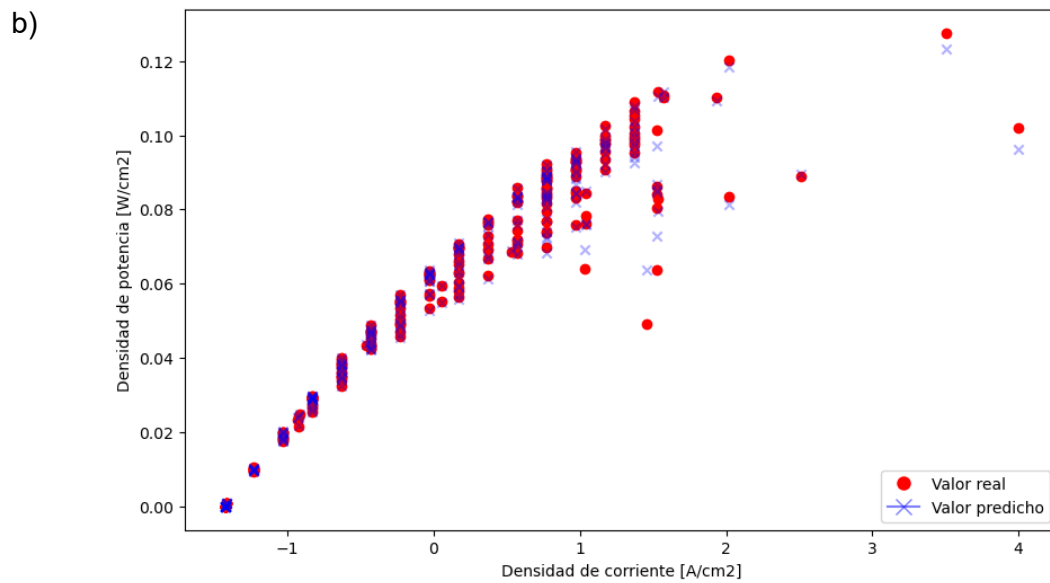
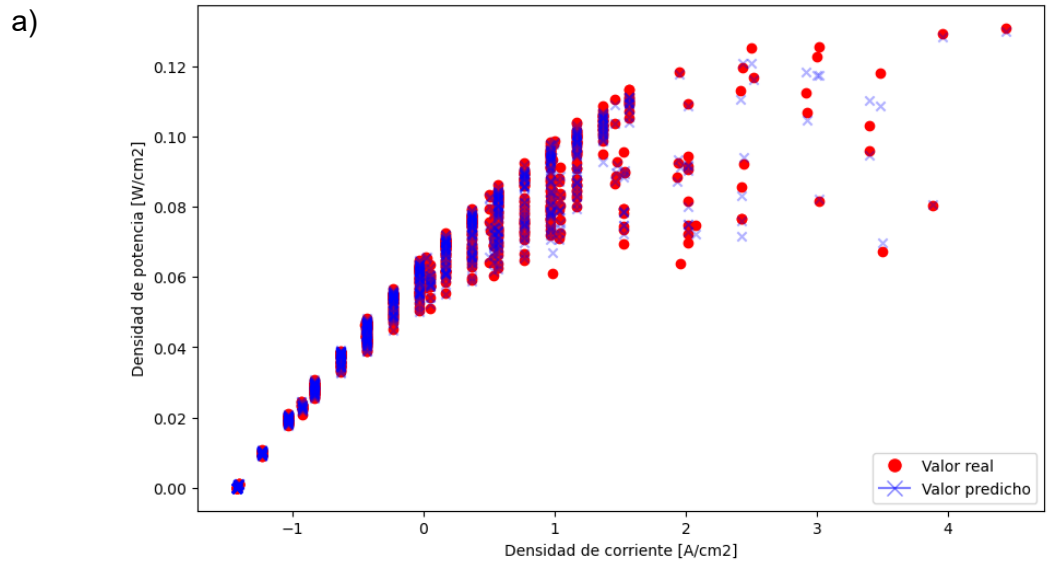


Figura 38: Curvas de potencia para valores experimentales y predichos de los datos de a) entrenamiento y b) prueba

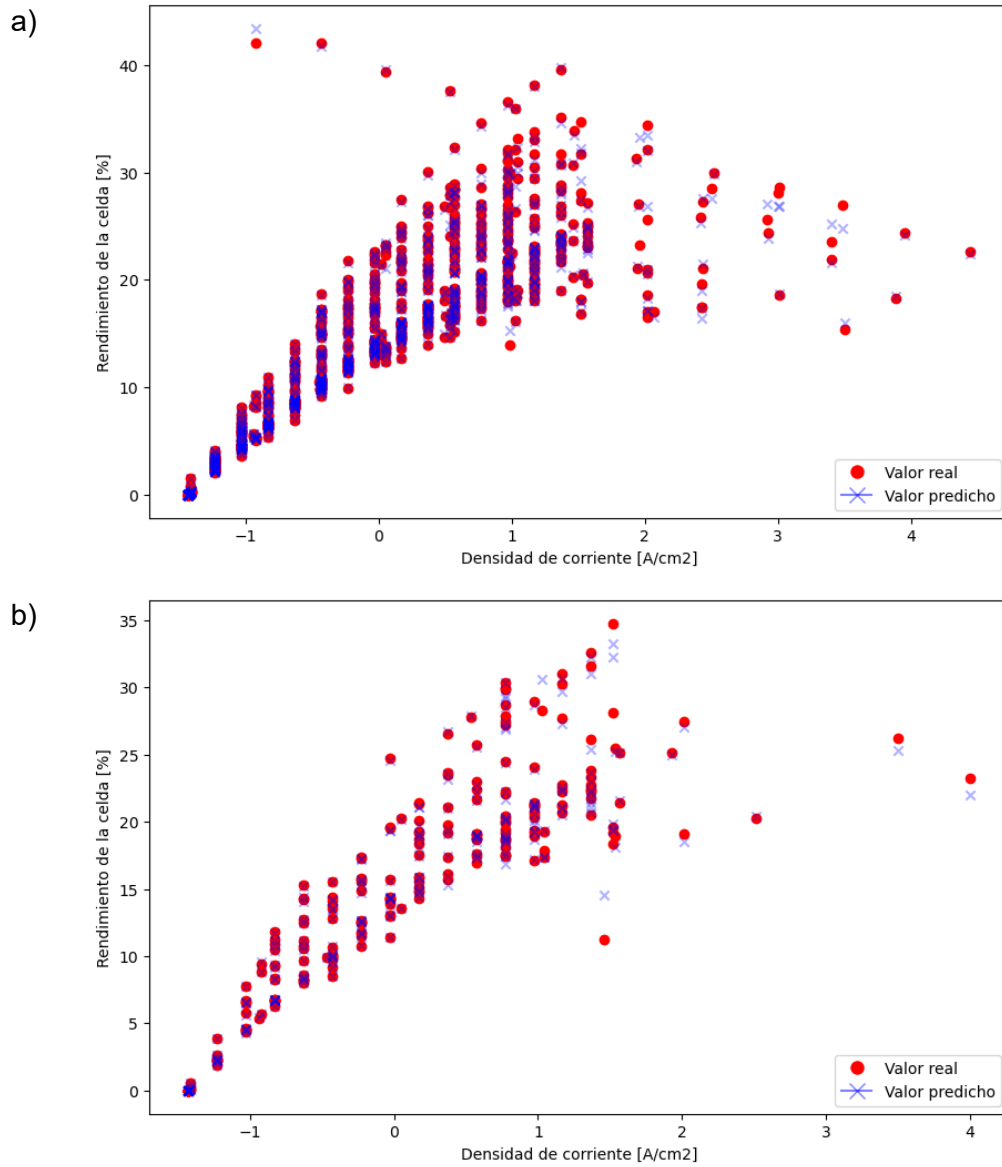


Figura 39: Curvas rendimiento de la celda para valores experimentales y predichos de los datos de a) entrenamiento y b) prueba

Luego de lo anterior, se validó el modelo con un set de datos fuera del dominio, donde se obtuvieron los siguientes valores para los errores mostrados en la Tabla 15. La Figura 40 expone una gráfica de los valores de voltaje experimentales y predichos con este nuevo set de datos, y la Figura 41 las curvas de polarización.

Tabla 15: Errores del modelo ANN (todos los datos) para un set de datos fuera del dominio

| Tipo de dato | MSE | MAE | R ² |
|-------------------|--------|--------|----------------|
| Fuera del dominio | 0.4584 | 0.6186 | -7.5921 |

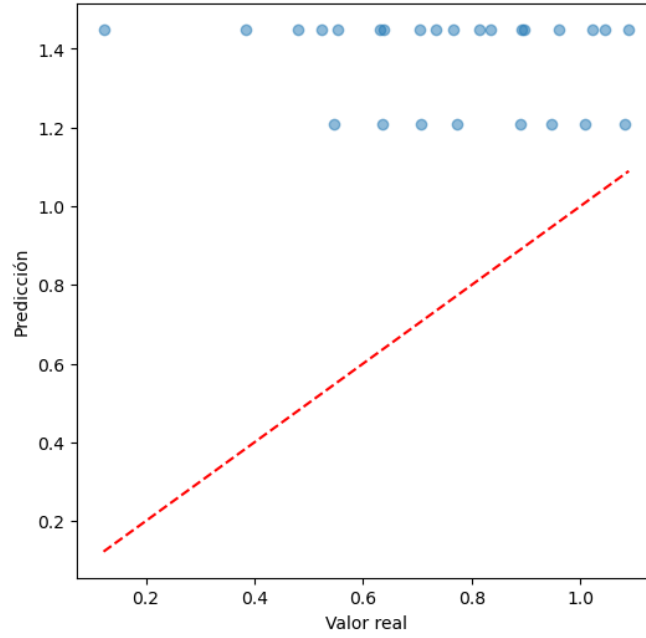


Figura 40: Valores de voltaje experimentales y predichos para los datos fuera del dominio

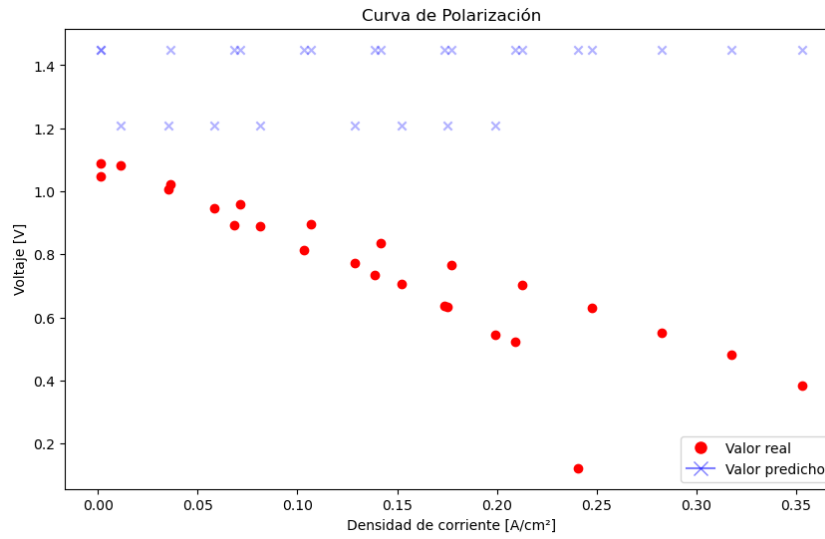


Figura 41: Curvas de polarización para valores experimentales y predichos de los datos fuera del dominio

Anexo 3: Gráficas obtenidas con los distintos modelos según su función de pérdida total para los datos de entrenamiento y prueba

En la Figura 42 y Figura 43 se presentan gráficas comparativas entre los voltajes experimentales y predichos de los datos de entrenamiento y prueba respectivamente.

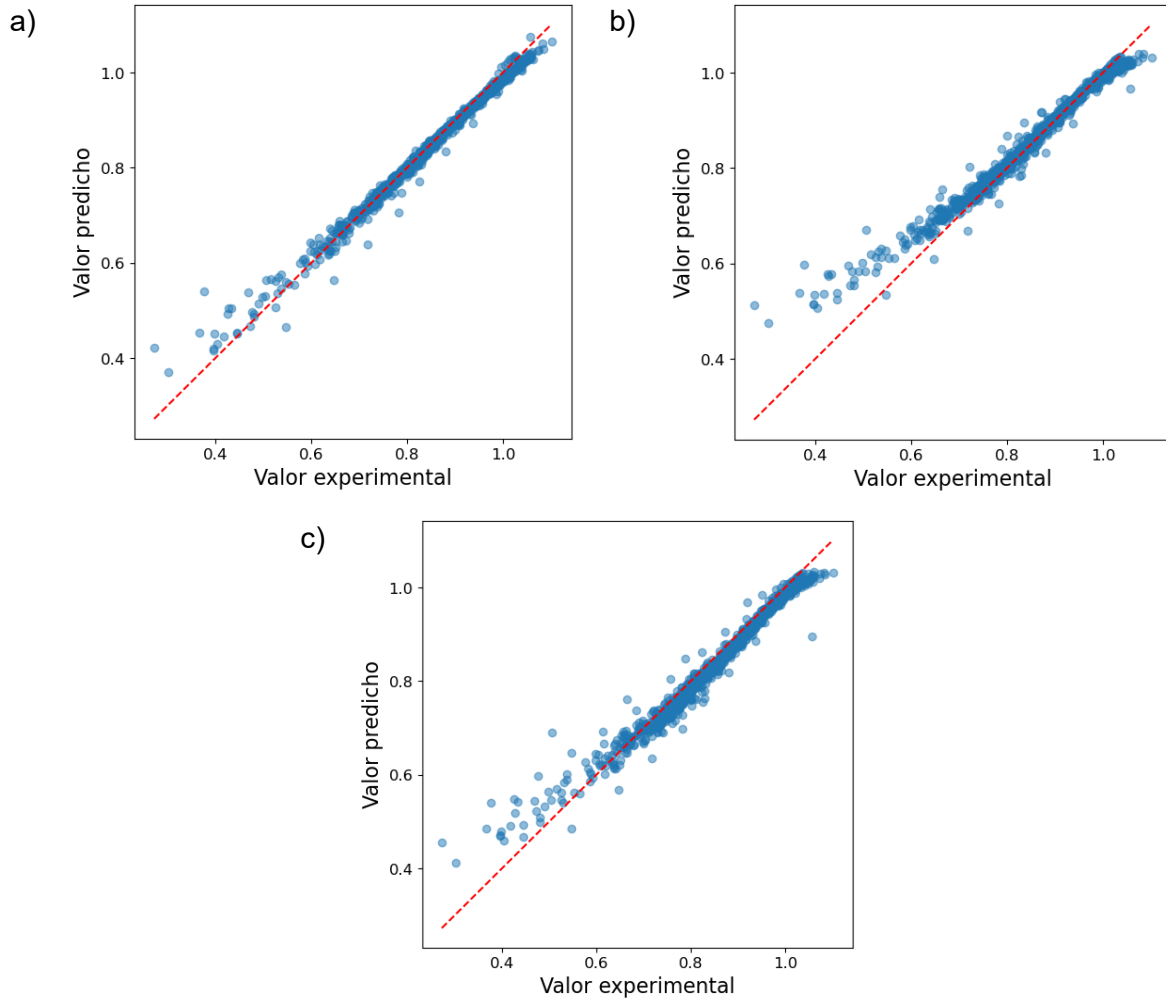


Figura 42: Comparativa entre los valores de voltaje experimentales y predichos para los datos de entrenamiento con el modelo de a) Caso 1, b) Caso 2, y c) Caso 3

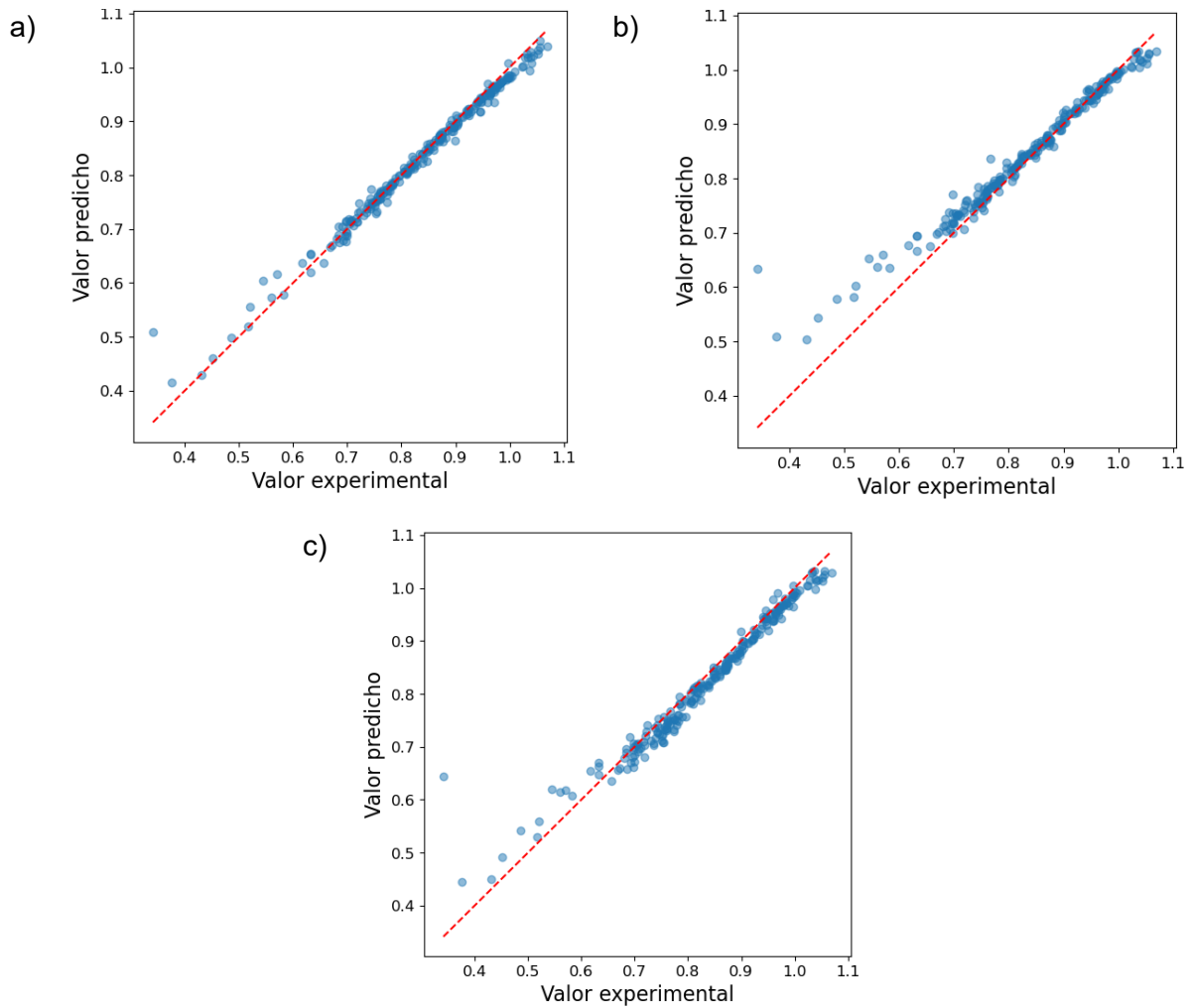


Figura 43: Comparativa entre los valores de voltaje experimentales y predichos para los datos de prueba con el modelo de a) Caso 1, b) Caso 2, y c) Caso 3

A continuación, en la Figura 44 y Figura 45 se encuentran los histogramas del error residual obtenido, para los datos de entrenamiento y prueba respectivamente, bajo los diferentes modelos.

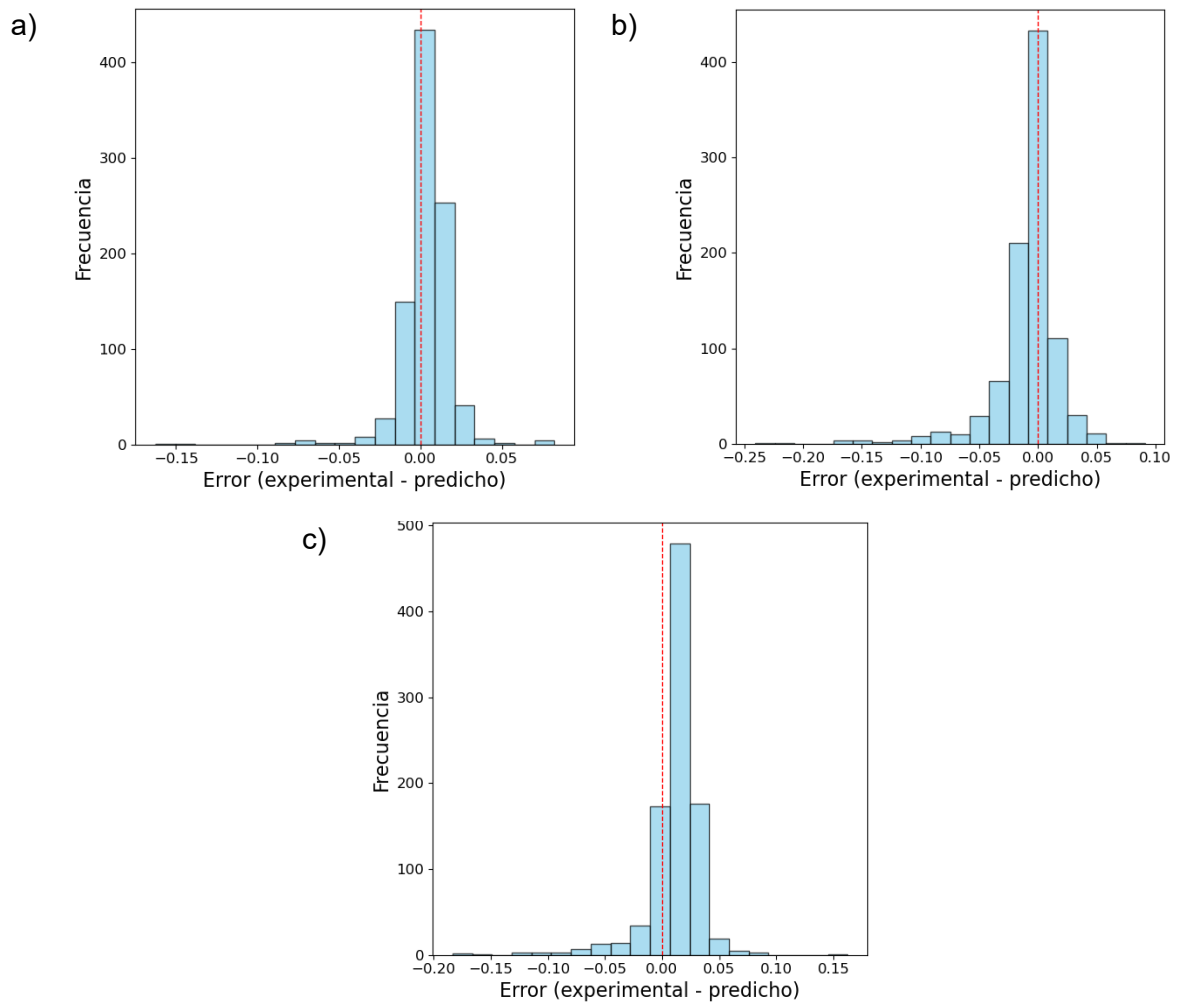


Figura 44: Histogramas del error residual para los datos de entrenamiento con el modelo de a) Caso 1, b) Caso 2, y c) Caso 3

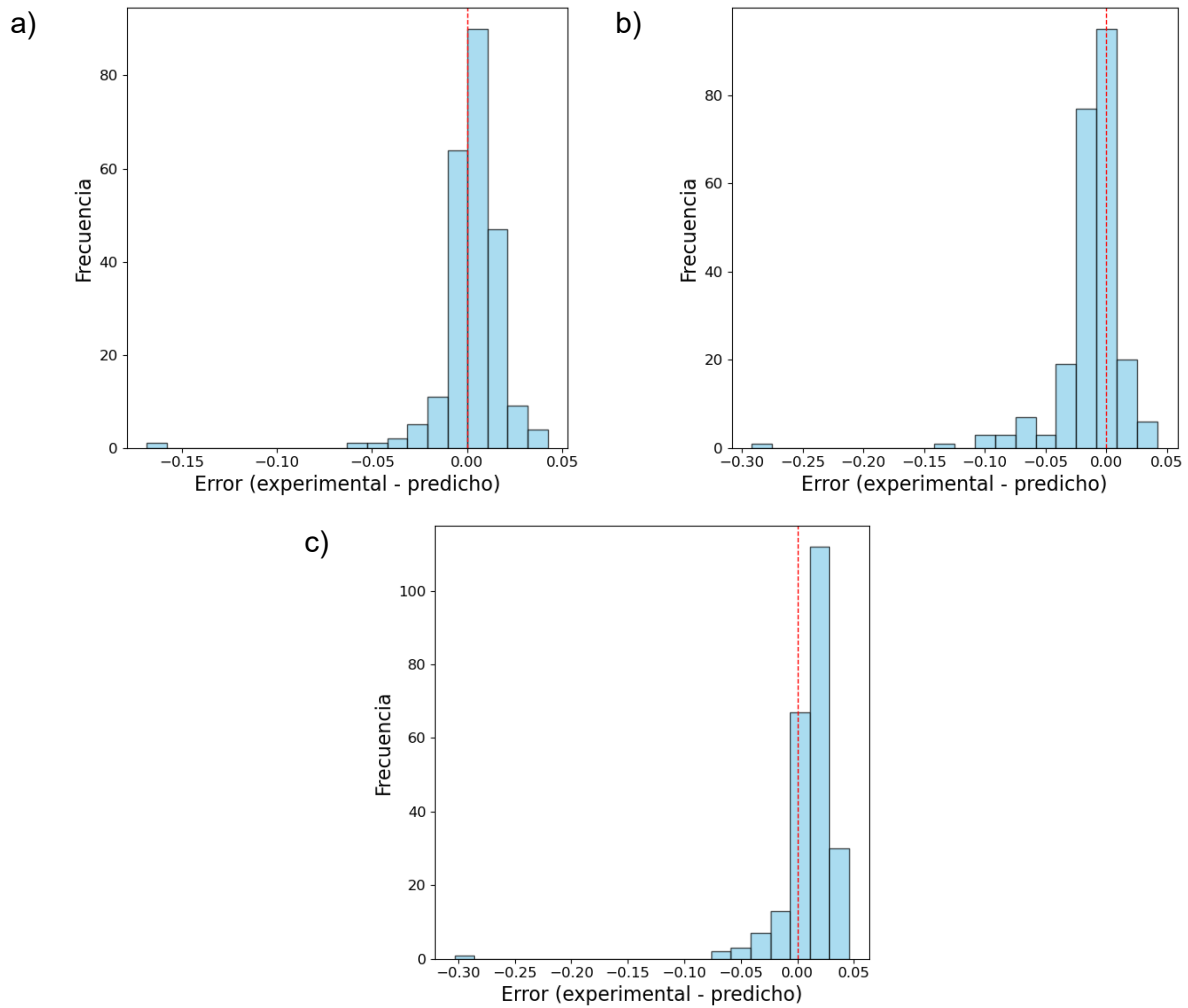


Figura 45: Histogramas del error residual para los datos de prueba con el modelo de a) Caso 1, b) Caso 2, y c) Caso 3

En la Figura 46 y la Figura 47 se encuentran las curvas de polarización para los datos dados y predichos de entrenamiento y prueba respectivamente bajo los diferentes casos de modelo. De la misma forma, en la Figura 48 y Figura 49 están las curvas de potencia, y en la Figura 50 y Figura 51 están las de rendimiento.

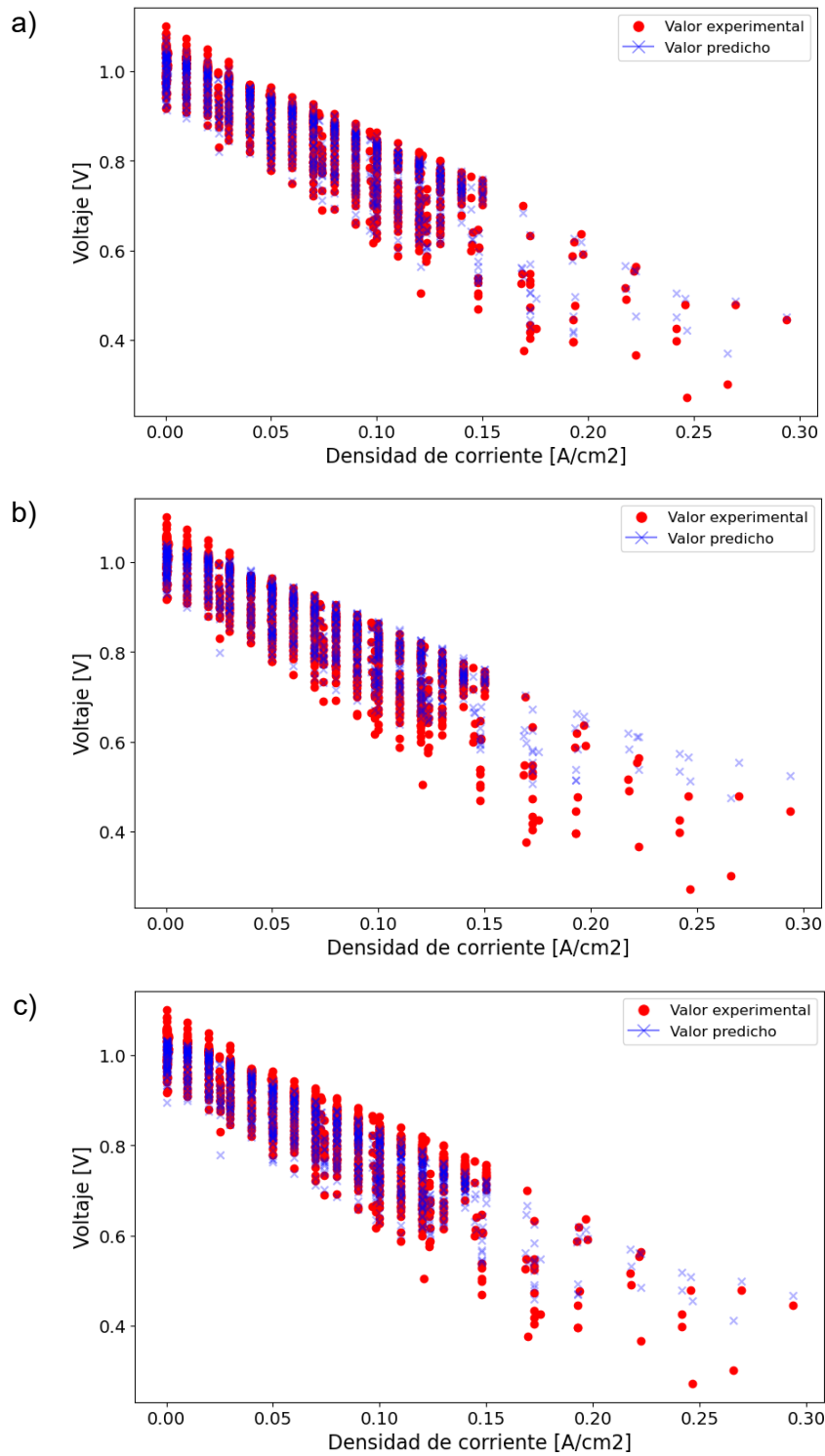


Figura 46: Curvas de polarización para valores experimentales y predichos de los datos de entrenamiento con el modelo de a) Caso 1, b) Caso 2, y c) Caso 3

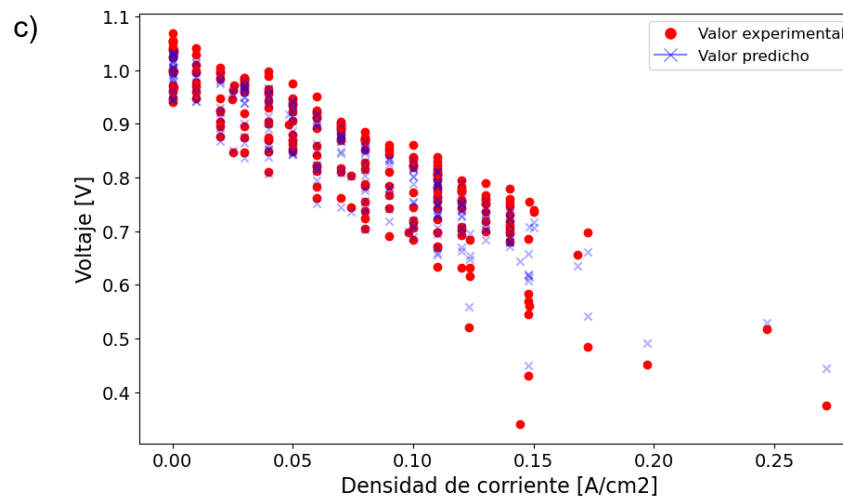
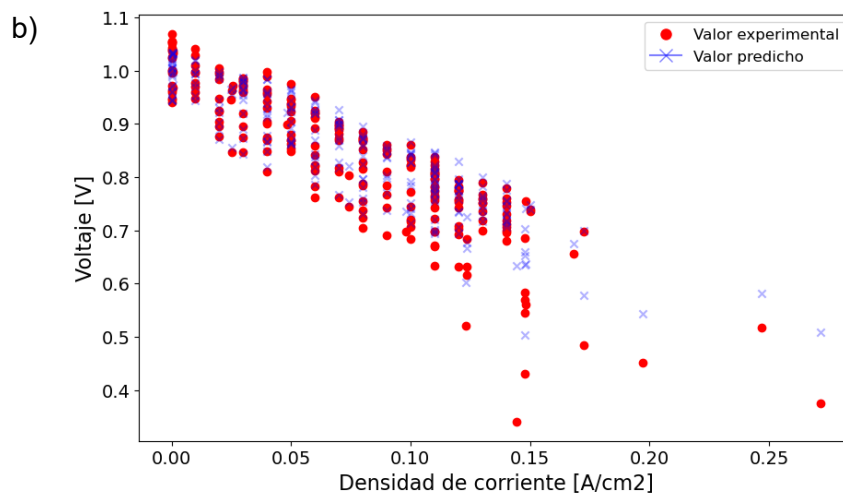
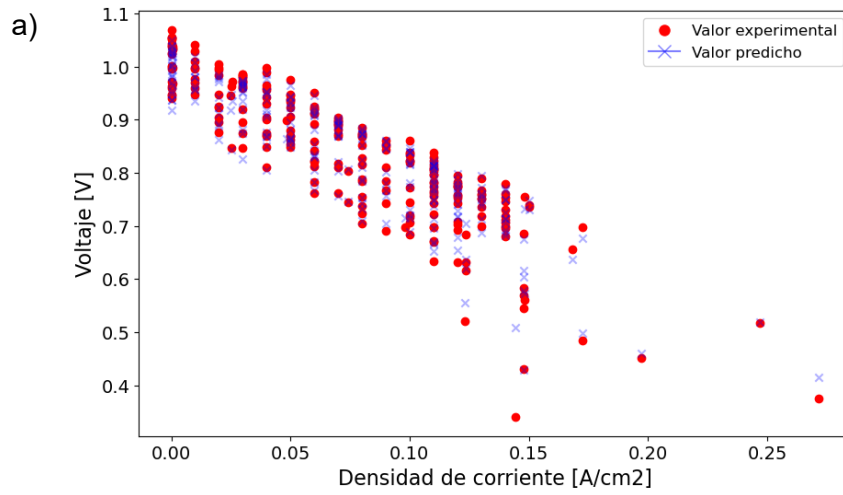


Figura 47: Curvas de polarización para valores experimentales y predichos de los datos de prueba con el modelo de a) Caso 1, b) Caso 2, y c) Caso 3

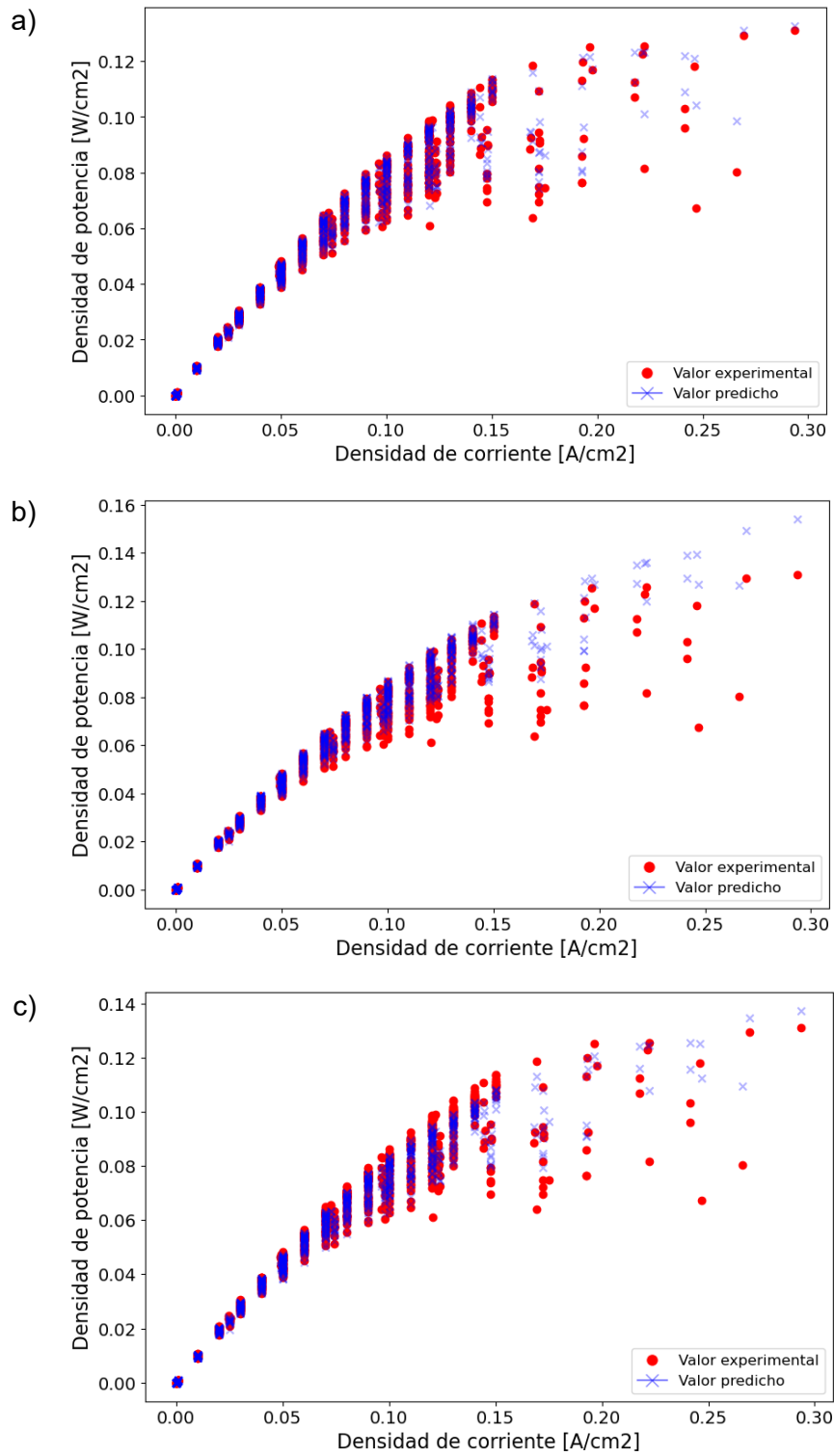


Figura 48: Curvas de potencia para valores experimentales y predichos de los datos de entrenamiento con el modelo de a) Caso 1, b) Caso 2, y c) Caso 3

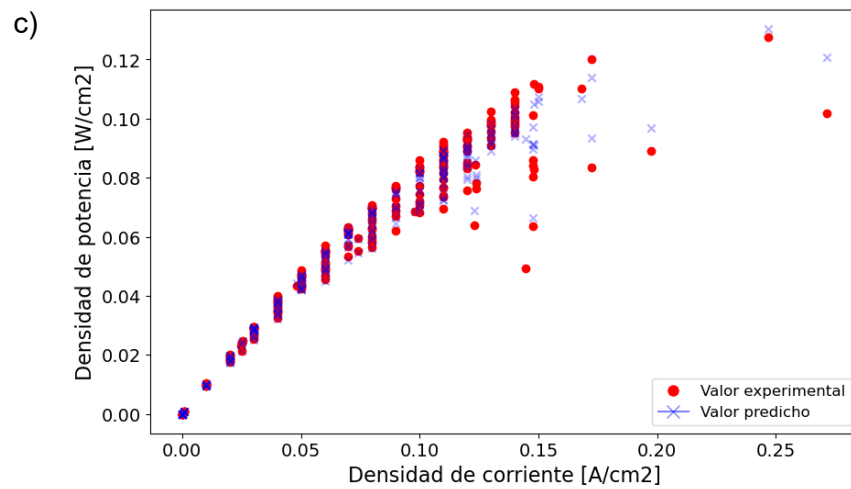
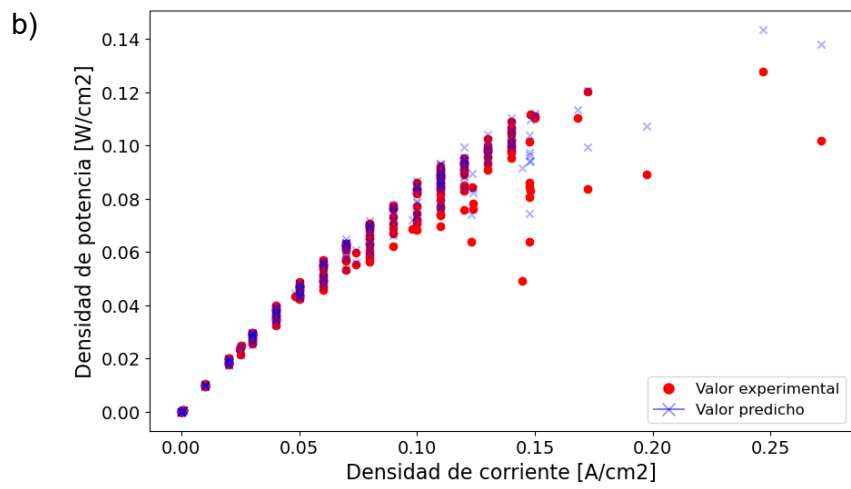
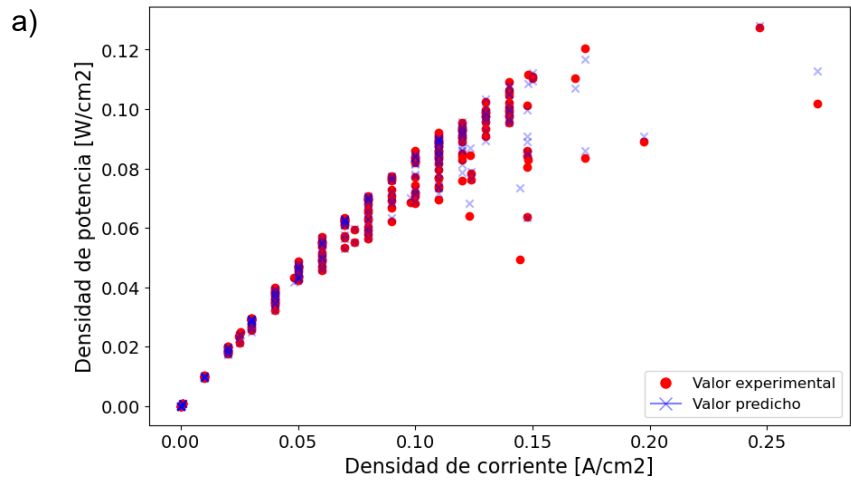


Figura 49: Curvas de potencia para valores experimentales y predichos de los datos de prueba con el modelo de a) Caso 1, b) Caso 2, y c) Caso 3

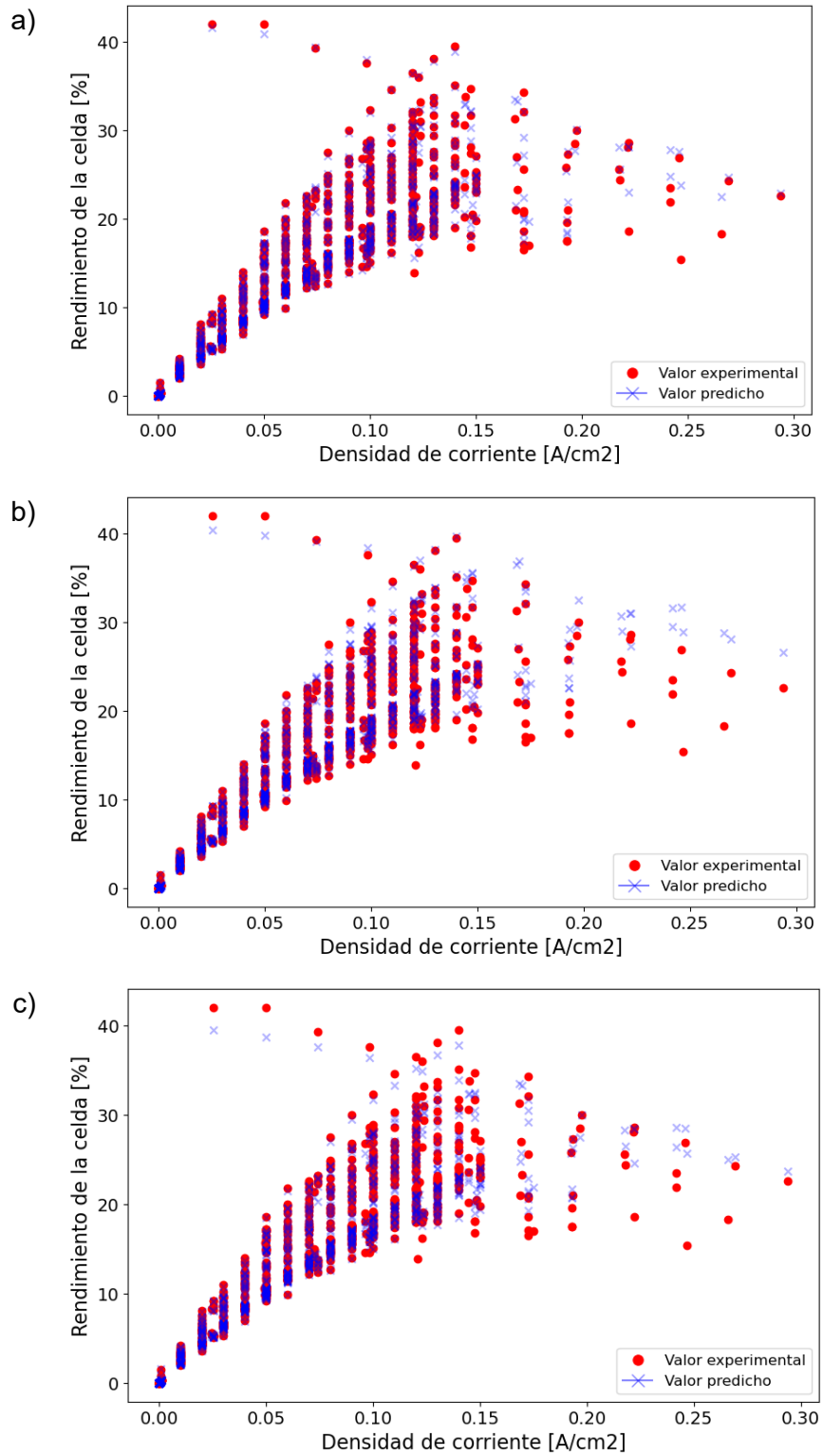


Figura 50: Curvas de rendimiento para valores experimentales y predichos de los datos de entrenamiento con el modelo de a) Caso 1, b) Caso 2, y c) Caso 3

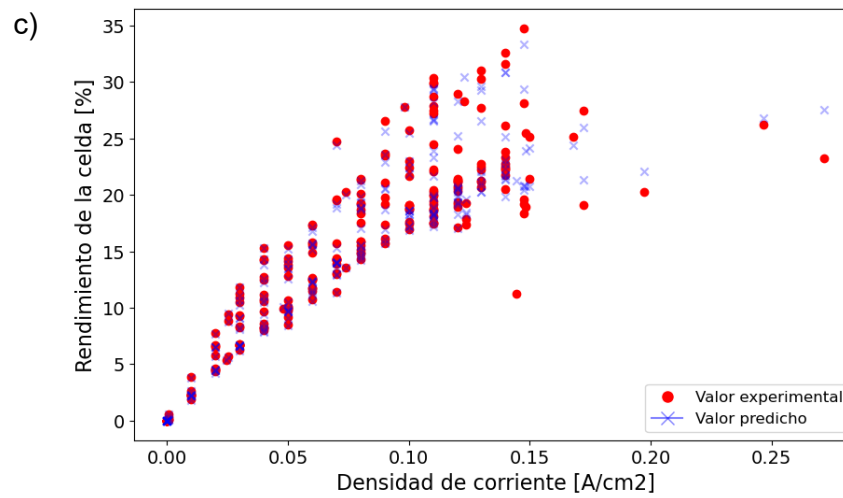
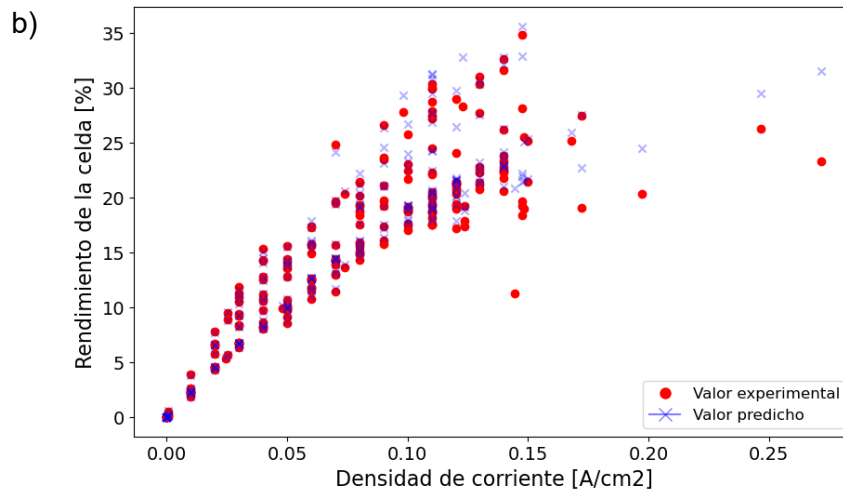
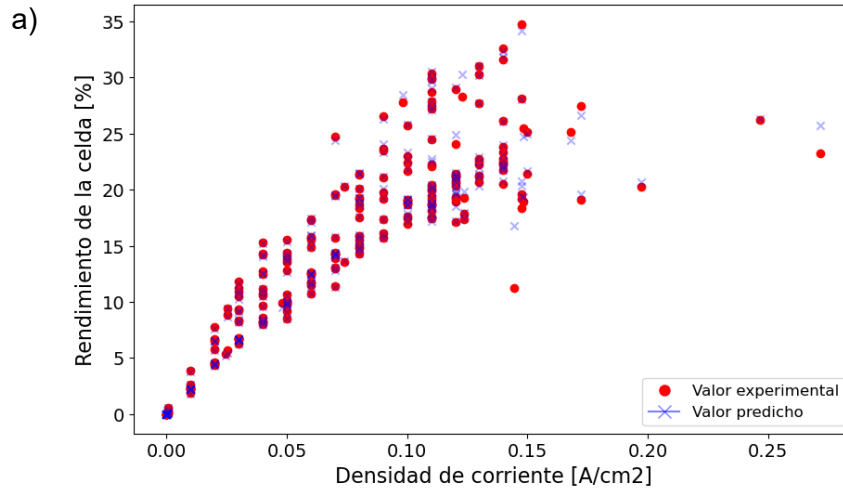


Figura 51: Curvas de rendimiento para valores experimentales y predichos de los datos de prueba con el modelo de a) Caso 1, b) Caso 2, y c) Caso 3

Anexo 4: Evaluación estadística de desempeño y robustez

En la Figura 52 se presentan los diagramas de cajas y bigotes para los datos dentro del dominio, mientras que en la Figura 53 son para los datos fuera del dominio, específicamente con los modelos de los casos 2 y 3.

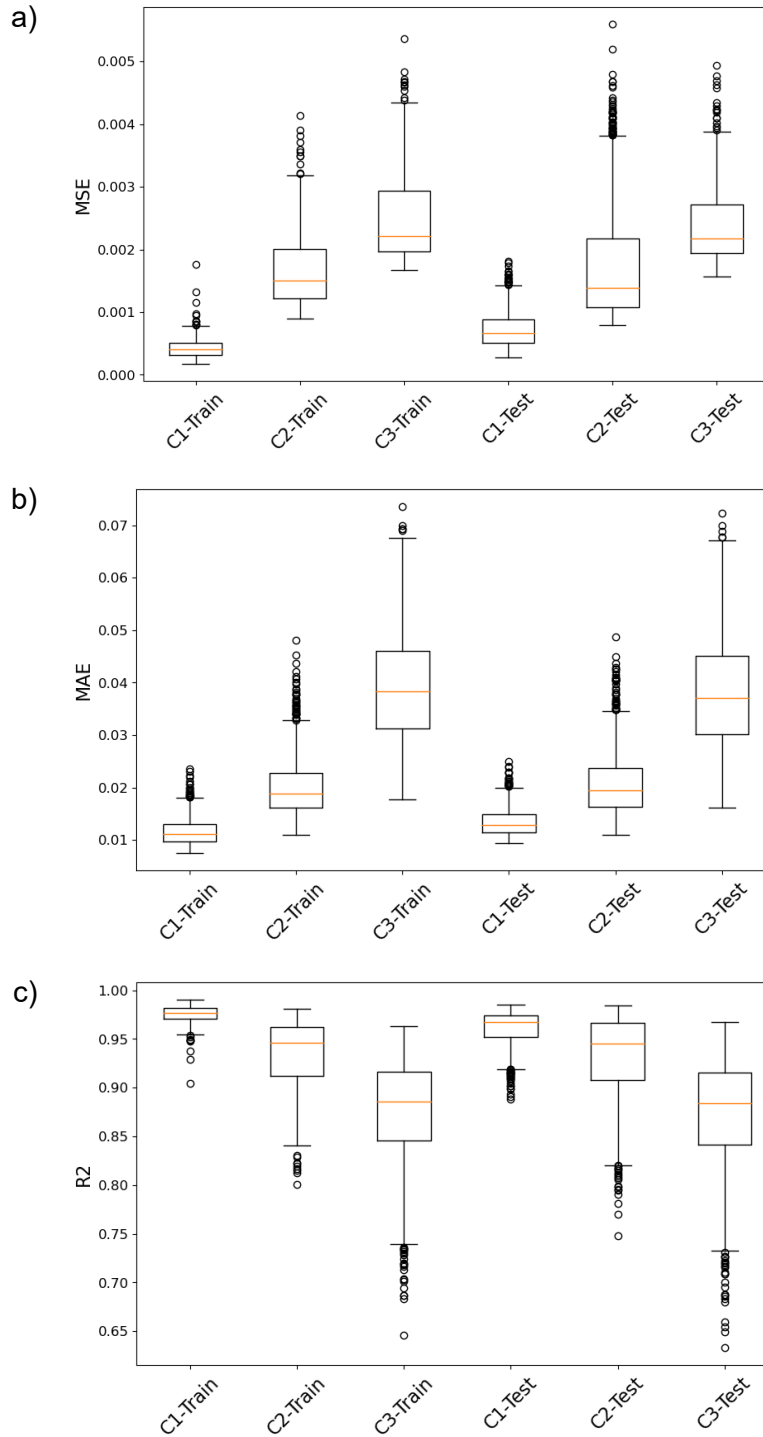


Figura 52: Diagramas de cajas y bigotes de las métricas a) MSE, b) MAE, y c) R2 para los datos dentro del dominio

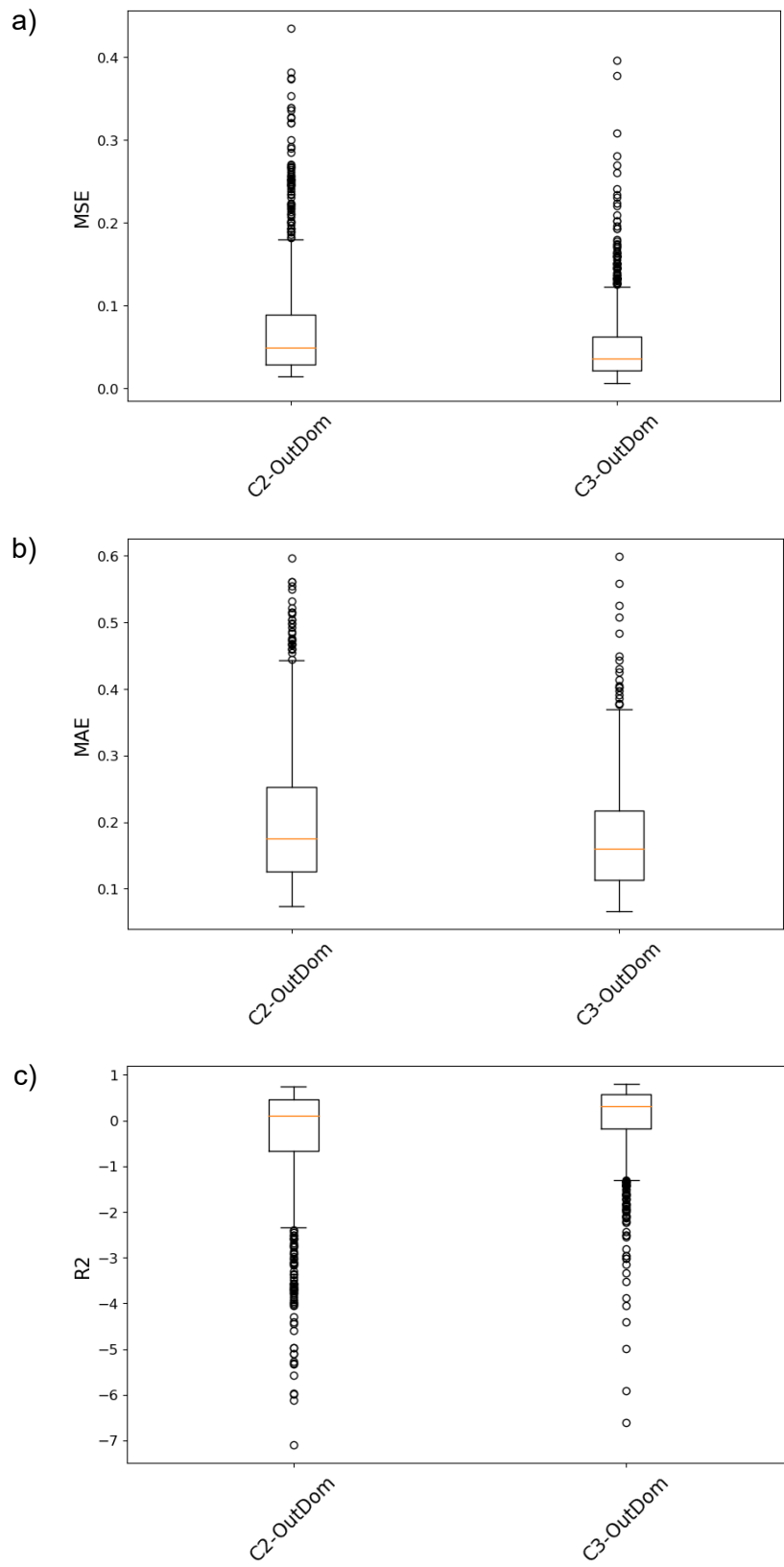


Figura 53: Diagramas de cajas y bigotes de las métricas a) MSE, b) MAE, y c) R2 para los datos fuera del dominio con los modelos del Caso 2 y Caso 3

Y, a continuación, en la Tabla 16 y Tabla 17 se presentan las medias y los intervalos de confianza para las métricas de evaluación de los distintos modelos para los datos dentro del dominio (entrenamiento y prueba respectivamente)

Tabla 16: Medias e intervalos de confianza (95%) para las métricas de evaluación de los distintos modelos para los datos de entrenamiento

| Función de pérdida | Métrica | Media | IC 95% inferior | IC 95% superior |
|--------------------|---------|--------|-----------------|-----------------|
| Caso 1 | MSE | 0.0004 | 0.0002 | 0.0007 |
| | MAE | 0.0117 | 0.0081 | 0.0179 |
| | R2 | 0.9757 | 0.9595 | 0.9880 |
| Caso 2 | MSE | 0.0017 | 0.0010 | 0.0028 |
| | MAE | 0.0201 | 0.0129 | 0.0349 |
| | R2 | 0.9350 | 0.8653 | 0.9745 |
| Caso 3 | MSE | 0.0025 | 0.0018 | 0.0039 |
| | MAE | 0.0394 | 0.0221 | 0.0618 |
| | R2 | 0.8753 | 0.7416 | 0.9487 |

Tabla 17: Medias e intervalos de confianza (95%) para las métricas de evaluación de los distintos modelos para los datos de prueba

| Función de pérdida | Métrica | Media | IC 95% inferior | IC 95% superior |
|--------------------|---------|--------|-----------------|-----------------|
| Caso 1 | MSE | 0.0007 | 0.0003 | 0.0014 |
| | MAE | 0.0135 | 0.0099 | 0.0199 |
| | R2 | 0.9617 | 0.9182 | 0.9818 |
| Caso 2 | MSE | 0.0018 | 0.0009 | 0.0041 |
| | MAE | 0.0207 | 0.00122 | 0.0365 |
| | R2 | 0.9299 | 0.8227 | 0.9789 |
| Caso 3 | MSE | 0.0024 | 0.0017 | 0.0038 |
| | MAE | 0.0381 | 0.0208 | 0.0598 |
| | R2 | 0.8728 | 0.7332 | 0.9527 |