Doctorado en Ciencia Aplicada



Jose Laureano Cruz Cardozo

Sistemas Dinámicos No Lineales a Partir de Series de Tiempo para el Análisis y Control de Pilas de Combustible

Sistemas dinámicos no lineales a partir de series de tiempo para el análisis y control de pilas de combustible

Jose Laureano Cruz Cardozo

Documento presentado como requisito para optar por el título de Doctor en Ciencia Aplicada

Directores: Codirector Temático: Rafael María Gutiérrez Salamanca Codirector Metodológico: Andrés Ignacio Hernández Duarte

Doctorado en Ciencia Aplicada Universidad Antonio Nariño Bogotá D.C. 2023

Prefacio

El caos determinista es un comportamiento dinámico que se manifiesta en sistemas no lineales bajo ciertas condiciones. Un sistema exhibe comportamiento caótico cuando es altamente sensible a las condiciones iniciales y su trayectoria en el espacio de fase forma un atractor extraño. Este fenómeno se encuentra en diversos sistemas complejos del mundo real, como el clima, la economía, los circuitos eléctricos, la medicina y los comportamientos sociales. A pesar de que pueda parecer estocástico y errático, en realidad es determinista y surge de interacciones complejas entre múltiples variables.

Actualmente, contamos con poderosas herramientas científicas y técnicas que nos permiten construir modelos sencillos a partir de la información compleja y limitada que se encuentra en las series de tiempo reales. Los sistemas dinámicos no lineales pueden representar la diversidad y complejidad de sistemas reales mediante modelos deterministas con soluciones caóticas relativamente simples, incluso cuando la información de entrada es limitada. En este contexto, se ha desarrollado un procedimiento que aprovecha el aumento de las capacidades digitales para capturar, procesar y modelar sistemas complejos a partir de series de tiempo.

Este procedimiento se basa en teoremas matemáticos, como la densidad espectral de potencia, los falsos vecinos cercanos, el máximo exponente de Lyapunov y la dimensión de correlación, que permiten determinar si una serie de tiempo tiene contenido caótico. Además, se utilizan el teorema de reconstrucción de Takens-Mañé, el método de mínimos cuadrados y el método de Adams-Moulton para reconstruir la trayectoria de la serie de tiempo en un espacio de fase tridimensional y generar un modelo de dicha trayectoria.

Para validar la efectividad del método y del software desarrollados, se han empleado tanto series de tiempo artificiales obtenidas a partir de la integración numérica del sistema de Lorenz, como series de tiempo reales provenientes de mediciones del voltaje de celdas de combustible. Estas últimas son de especial interés debido al creciente uso y aplicaciones de las celdas de combustible en los últimos años, ya que representan una de las fuentes más limpias para la generación de energía eléctrica. Además, se ha demostrado que las celdas de combustible pueden exhibir comportamientos caóticos, lo cual aún no ha sido aprovechado como una forma de mejorar su desempeño y aprovechar las características inherentes de este tipo de comportamiento.

Resumen

En este trabajo se presenta un procedimiento para construir, a partir de series de tiempo, modelos de sistemas dinámicos no lineales que exhiben comportamientos de caos determinista. El procedimiento consiste en extraer información contenida en la serie de tiempo para reconstruir el sistema dinámico en el espacio de fase, utilizando ecuaciones de segundo orden y tres variables. Este procedimiento fue implementado en un software programado en Python y probado con el conocido sistema de Lorenz, el cual ha sido ampliamente estudiado en la teoría del caos.

En primer lugar, se integra el sistema de Lorenz utilizando el método de Runge-Kutta de cuarto orden, con el fin de probar si es posible recuperar el sistema de Lorenz aplicando el procedimiento a las tres variables del sistema (x, y, z). Además, se evalúa cómo la contaminación por ruido blanco afecta la recuperación de la trayectoria en el espacio de fase.

Después se utiliza el método de reconstrucción de Takens-Mañé para reconstruir las variables y y z a partir de la serie de tiempo de la variable x del sistema de Lorenz. En este caso no se recupera el modelo de Lorenz con exactitud, pero si se logra recuperar su dinámica en el espacio de fase. Luego, se evalúa si es posible recuperar la dinámica del sistema en el espacio de fase utilizando solo la variable x del sistema contaminada con ruido blanco de distintas amplitudes.

Finalmente, para comprobar la utilidad del procedimiento en series de tiempo reales, se aplica a mediciones del voltaje de celdas de combustible de membrana de intercambio protónico (PEMFC por sus siglas en inglés). Las PEMFC son las celdas de combustible más utilizadas y con mayor proyección de aplicaciones debido a sus características de funcionamiento, como temperaturas menores a los $80 \,^{\circ}C$, rápido arranque y cero producción de contaminantes. Se ha demostrado que el voltaje de las PEMFC presenta un comportamiento caótico en condiciones de operación de mayor eficiencia. Aplicando este procedimiento a las PEMFC se puede reducir su gasto energético, disminuyendo la cantidad de sensores que implementa para su buen funcionamiento, aumentando así su eficiencia y durabilidad.

Abstract

This work presents a procedure for constructing models of nonlinear dynamic systems that exhibit deterministic chaos behaviors based on time series data. The procedure involves extracting information from the time series to reconstruct the dynamic system in phase space, using second-order equations and three variables. We implemented this procedure in Python as a software and tested it on the well-known Lorenz system, extensively studied in chaos theory.

Firstly, we integrate the Lorenz system using the fourth-order Runge-Kutta method to verify if it is possible to recover the Lorenz system by applying the procedure to the three variables of the system (x, y, z). Additionally, we evaluate how contamination by white noise affects the recovery of the trajectory in phase space.

Next, we use the Takens-Mañé reconstruction method to reconstruct the variables y and z from the time series of the x variable of the Lorenz system. In this case, we do not achieve an exact recovery of the Lorenz model, but we successfully recover its dynamics in phase space. Then, we evaluate the possibility of recovering the system's dynamics in phase space using only the x variable of the system contaminated with white noise of different amplitudes.

Finally, to validate the utility of the procedure on real-time series data, we apply it to measurements of the voltage of proton exchange membrane fuel cells (PEMFC). PEMFC are widely used and have extensive applications due to their operational characteristics, such as temperatures below 80°C, rapid startup, and zero production of pollutants. It has been demonstrated that the voltage of PEMFC exhibits chaotic behavior under conditions of higher efficiency operation. By applying this procedure to PEMFC, we can reduce their energy consumption, decrease the number of sensors required for their proper functioning, thus enhancing their efficiency and durability.

Agradecimientos

Principalmente agradezco al Dr. Rafael Gutiérrez y a todo el equipo del DCA por su asesoría, guía y paciencia, quienes han sido una parte fundamental para llevar la presente investigación a los términos presentes. A la Dra. Marie-Cecile Pera por su hospitalidad, asesoría y colaboración en la obtención de los datos de las celdas de combustible utilizados en este trabajo, durante la pasantía que se realizó en el FCLAB, en Francia. Al ministerio de ciencia tecnología e innovación (Minciencias de Colombia), por la financiación del doctorado en rubros de matrícula, sostenimiento, proyecto y pasantía, mediante la convocatoria No. 727. Finalmente, un agradecimiento especial para mi tío Helio Cardozo Q.E.P.D. Quién fue un apoyo constante e incondicional durante este proceso y gran parte de mi vida, también un agradecimiento para mi familia y amigos quienes fueron un apoyo constante para culminar el doctorado.

Tabla de Contenido

Título	ii
Capítulo 1. Introducción	1
Capítulo 2. Estado del Arte	4
Capítulo 3: Metodología	6
Capítulo 4. Resultados y Análisis	7
Capítulo 5. Producción	8
Capítulo 6. Conclusiones	10
Bibliografía	11
Anexos	12

Lista de Abreviaturas y acrónimos

CMRTS:	Chaotic Models Reconstruction from Time Series
	Reconstruccion de modelos caóticos a partir de series de tiempo
DCA:	Doctorado en Ciencia Aplicada
FCLAB:	Fuel Cell Laboratory
	Laboratorio de celdas de combustible
FNN:	False Nearest Neighbours
	Falsos vecinos cercanos
H ₂ :	Molécula de Hidrógeno
H_2O :	Molécula de Agua
HR:	Humedad Relativa
J:	Densidad de corriente
O ₂ :	Molécula de Oxígeno
P:	Presión
P _{H2} :	Presión parcial del Hidrógeno
P _{H2O} :	Presión parcial del vapor de agua
P ₀₂ :	Presión parcial del Oxígeno
PEMFC:	Proton Exchange Membrane Fuel Cell
	Celda de combustible de membrana de intercambio protónico
R:	Constante de los gases ideales
T:	Temperatura

Lista de tablas

Tabla 1: Sistema de Lorenz representando los valores de sus 30 coeficientes cuando tiene solucióncaótica. Un término constante c, tres términos lineales x, y z, y los seis términos no lineales hastasegundo orden
Tabla 2: Diseño de experimentos para detectar caos determinista en el voltaje de las PEMFC. Se variaron la temperatura del agua de refrigeración T, la estequiometría del hidrógeno Sto y la densidad de corriente J, cada una en tres valores diferentes, obteniendo 27 combinaciones de valores de parámetros
Tabla 3: Diferencia entre los coeficientes originales del sistema de Lorenz y los que se recuperan cuandose suma ruido blanco de tipo gaussiano con amplitud de 1%, 5% y 10%
Tabla 4: Coeficientes que se recuperan cuando se filtra el ruido agregado a los datos del sistema deLorenz. Se observa la mejora en la recuperación de los coeficientes originales
Tabla 5: Comparación entre las medidas de caos del sistema de Lorenz y las obtenidas para losatractores reconstruidos. Donde RSR = Reconstruido Sin Ruido, RR= Reconstruido con Ruido, RRF =Reconstruido con Ruido Filtrado, FNN = Falsos vecinos cercanos, Lyap = Máximo exponente deLyapunov y DC = Dimensión de Correlación
Tabla 6: series de tiempo de los 19 experimentos, con sus correspondientes valores de parámetros deoperación y medidas de caos. Las líneas en gris indican las series de tiempo con indicadores de posiblecaos
Tabla 7: Medidas de caos de las dos series de tiempo correspondientes a los experimentos $N_{Test}=3$ y 8, antes y después de los procesos de quitar tendencia y filtrado indicados
Tabla 8: Medidas de caos τ , Lyap y CD de la variable x obtenidas por integración numérica de los modelos dinámicos que se forman a partir de los experimentos $N_{Test}=3$ y 8, y sus respectivas series de tiempo filtadas y/o sin tendencia
Tabla 9: Coeficientes del sistema dinámico no lineal autónomo 3D obtenidos de la serie de tiempo correspondiente al experimento N_{Test} =3, utilizando un tiempo de retardo τ_r = 120
Tabla 10: Coeficientes del sistema dinámico no lineal autónomo 3D obtenidos de la serie de tiempo correspondiente al experimento $N_{Test}=8$, utilizando un tiempo de retardo $\tau_r = 113$

Lista de figuras

Figura 1: Preproceso que se aplica a las series de tiempo para detectar y resaltar con filtros digitales el contenido de información caótica
Figura 2: Contraste entre la densidad espectral de potencia de tres series de tiempo distintas: una periódica (negro), una estocástica (rojo) y una caótica (azul)
Figura 3: Comportamientos de los FNN de diferentes series tiempo. En la periódica y la caótica los FNN tienden a cero en 2D y 3D respectivamente, en la caótica con ruido tienden a cero en una dimensión mayor que la caótica sin ruido y en la estocástica no presentan tendencia a cero
Figura 4: Interfaz gráfica de usuario del CMRTS, con sus diferentes funcionalidades divididas en las secciones correspondientes a las etapas del método, haciendo su aplicación más intuitiva, ágil y sencilla.
Figura 5: Esquema del funcionamiento básico de las PEMFC. Donde se ilustra la entrada y salida de los gases y la generación de corriente a partir de la división del hidrógeno en electrones y protones (Zhang et al., 2013)
Figura 6: Procedimiento a seguir para reconstruir el modelo del sistema dinámico utilizando los datos de la serie de tiempo
Figura 7: Atractores obtenidos al integrar los modelos que se presentan en la Tabla 3. Para las contaminaciones con ruido %5 y 10% se pierde la estructura del atractor
Figura 8: Densidad espectral de potencia de las trayectorias mostradas en la Figura 7 en donde se evidencia la pérdida de características caóticas en los casos de ruido 5% y 10%23
Figura 9: Atractores obtenidos al integrar los modelos que se presentan en la Tabla 4. En todos los casos se recupera el atractor, evidencia de la importancia del proceso de filtrado en las series de tiempo. 24
Figura 10: Densidad espectral de potencia de las trayectorias mostradas en la Figura 9 en donde se puede ver que la recuperación de los coeficientes mejora sustancialmente con el proceso de filtrado25
Figura 11: FNN de las trayectorias mostradas en la Figura 9. Los FNN son idénticos para todas las trayectorias, otra prueba de la eficacia del proceso de filtrado25
Figura 12: Atractores recuperados empleando el método de reconstrucción de Takens-Mañé, (a) utilizando $\tau_r = 16 y$ (b) utilizando $\tau_r = 69$
Figura 13: Atractor recuperado a partir de una serie de tiempo contaminada con ruido de amplitud 1%, utilizando $\tau_r = 68$ para la reconstrucción
Figura 14: Atractores recuperados a partir de la reconstrucción, después de aplicar un filtro de media móvil central al ruido previamente adicionado. (a) ruido de 1%, (b) ruido de 5% y (c) ruido de 10%. En los 3 casos se usó $\tau_r = 68$. Es importante considerar que la recuperación de un atractor es en sus propiedades topológicas, no en la precisión de cada punto de su trayectoria
Figura 15: Series de tiempo del voltaje de los experimentos 3 y 8, (a) y (b) respectivamente

Figura 16: Densidad espectral de potencia del voltaje de las series de tiempo 3 y 8, (a) y (b) respectivamente
Figura 17: Vecinos más cercanos falsos, FNN, para las dos series de tiempo de experimentos $N_{Test} = 3 y$ 8
Figura 18: Series de tiempo correspondientes a los experimentos $N_{Test}=3$ y 8, (a) y (b) respectivamente, tras los procesos de remoción de tendencia y filtrado, baja y alta frecuencia
Figura 19: Atractores obtenidos de la integración de los modelos presentados en las tablas 3 (a) y 4 (b). La integración numérica de los modelos correspondientes se realizó mediante el método de Runge-Kutta

con pasos h=0.01 y N=10000 iteraciones......37

xi

Capítulo 1. Introducción

Se presenta un procedimiento innovador para reconstruir sistemas dinámicos autónomos no lineales a partir de series de tiempo caóticas. El procedimiento consta de dos etapas que utilizan herramientas de análisis de series de tiempo para generar una retroalimentación de información y obtener un modelo óptimo de la serie. En la primera etapa se realiza una selección cualitativa y cuantitativa de las series de tiempo, utilizando medidas como la densidad espectral de potencia, los falsos vecinos cercanos, el máximo exponente de Lyapunov y la dimensión de correlación para determinar su contenido caótico. Además, se pueden aplicar procesos de filtrado para eliminar el ruido de bajas y altas frecuencias y lograr una mejor identificación del comportamiento caótico.

En la segunda etapa se reconstruye la dinámica del sistema utilizando el teorema de reconstrucción de Takens-Mañé para encontrar la trayectoria del atractor en un espacio de fase 3D a partir de la serie de tiempo 1D. Se implementa el proceso de ortonormalización de Gram-Schmidt para garantizar la independencia lineal de las variables utilizadas en la reconstrucción del modelo. Los coeficientes que asignan peso a cada variable de la base ortonormal se obtienen mediante el método predictor-corrector de Adams-Moulton y el método de mínimos cuadrados. El modelo resultante es una reconstrucción de un sistema dinámico de ecuaciones diferenciales no lineales acopladas en 3D.

Teniendo en cuenta las etapas del procedimiento, se ha desarrollado una herramienta de software llamada CMRTS (Chaotic Models Reconstruction from Time Series), implementada en lenguaje Python (Cruz et al., 2021). Este software permite una identificación secuencial y ordenada del caos, así como la reconstrucción de modelos dinámicos no lineales. Para validar el procedimiento y el software, se utilizó el sistema de Lorenz, ampliamente conocido en la teoría del caos (Lorenz, 1963; Pinsky, 2017). Los resultados obtenidos demostraron la eficiencia del procedimiento y del software en la reconstrucción de dinámicas caóticas, brindando mayor certeza en su aplicación.

Para evaluar la aplicabilidad del procedimiento propuesto en series de tiempo reales, se aplicó a muestras de voltajes de salida de celdas de combustible de membrana de intercambio protónico (PEMFC). Estos dispositivos electroquímicos son transformadores de energía química a eléctrica y

representan una alternativa limpia de generación de energía utilizando hidrógeno y oxígeno como reactivos y produciendo vapor de agua y electricidad como productos (Abdelkareem et al., 2021).

La optimización de la eficiencia y vida útil de las PEMFC es crucial, ya que parte de la energía que generan se consume en los actuadores que controlan las variables del sistema (Peighambardoust et al., 2010). En este trabajo, se utiliza el procedimiento propuesto e implementado en el software CMRTS para reconstruir modelos dinámicos no lineales a partir de las series de tiempo de los voltajes de las PEMFC. Estos modelos son necesarios para buscar que la celda de combustible permanezca en un estado de funcionamiento caótico.

Los sistemas que presentan dinámicas caóticas, como las PEMFC, pueden estabilizarse durante largos períodos de tiempo dentro de un atractor extraño en el espacio de fase, incluso frente a perturbaciones externas. Este puede ser aprovechado en las PEMFC para reducir la cantidad de actuadores necesarios y la energía consumida en ellos, lo que contribuiría a una mayor eficiencia de las mismas, reduciendo los gastos energéticos de su propio funcionamiento.

Capítulo 2. Estado del Arte

Se ha desarrollado un procedimiento que utiliza herramientas del análisis no lineal de series de tiempo para identificar, resaltar, verificar y modelar la presencia de caos determinista en las series de tiempo. Inicialmente se emplean técnicas como la densidad espectral de potencia, los falsos vecinos cercanos, el máximo exponente de Lyapunov y la dimensión de correlación, para veerificar el contenido caótico de las series de tiempo. Con esta información, se construyen modelos dinámicos tridimensionales que incluyen términos no lineales hasta orden 2. Utilizando un procedimiento que originalmente fue desarrollado para la construcción de modelos climáticos (Gutiérrez, 2004). Este procedimiento permite capturar de manera efectiva las características caóticas de las series de tiempo y modelarlas. Aplicando este procedimiento para modelar series de tiempo de varias muestras del voltaje de las PEMFC, se puede comprender y controlar el comportamiento caótico de las PEMFC.

Procedimiento para la identificación del comportamiento caótico en series de tiempo.

La mayoría de los sistemas complejos exhiben no linealidades que pueden generar retroalimentaciones y una amplia gama de dinámicas, incluyendo comportamientos caóticos. Sin embargo, en sistemas reales que involucran tres o más variables continuas, puede resultar difícil detectar este comportamiento debido a la presencia de múltiples fuentes de ruido. Por lo tanto, identificar y destacar el contenido caótico en una serie de tiempo que registra mediciones de una o varias variables de estado, tomadas y ordenadas en intervalos cronológicos constantes, se convierte en un desafío crucial. Este enfoque permite obtener una comprensión más profunda de la información dinámica y las propiedades del sistema en estudio.

Para determinar si una serie de tiempo contiene un comportamiento caótico y distinguirlo de las fuentes de ruido, se utilizan diversas herramientas de análisis de series de tiempo. Estas herramientas incluyen la densidad espectral de potencia, la información mutua, los falsos vecinos

cercanos, el máximo exponente de Lyapunov y la dimensión de correlación. Estas técnicas se aplican y organizan de acuerdo con un esquema que se muestra en la Figura 1.



Figura 1: Preproceso que se aplica a las series de tiempo para detectar y resaltar con filtros digitales el contenido de información caótica.

Al utilizar este conjunto de herramientas de análisis, se puede realizar una evaluación exhaustiva de la serie de tiempo y determinar la presencia y magnitud del comportamiento caótico. Esto brinda una base sólida para el estudio de la dinámica del sistema y facilita la identificación de patrones, tendencias y propiedades que pueden ser relevantes en diversas áreas de investigación.

Densidad Espectral de Potencia como indicador de caos.

La densidad espectral de potencia es una herramienta poderosa de análisis de series de tiempo que nos permite observar las características importantes de la dinámica del sistema. Si una serie de tiempo es completamente estocástica, su densidad espectral de potencia se caracteriza por una distribución continua en un amplio rango de frecuencias, sin distinguir preferencia particular en alguna frecuencia o rango reducido de frecuencias. Por otro lado, si la serie de tiempo corresponde a un sistema determinista lineal, sus soluciones son periódicas y la densidad espectral de potencia muestra picos bien definidos en frecuencias específicas y sus armónicos. Si una serie de tiempo contiene información determinista del caos, la densidad espectral de potencia muestra una distribución de energía en varias frecuencias, casi continua y rápidamente decreciente en un rango definido y con cierta estructura. Además, para una correcta interpretación, la amplitud de la densidad espectral de potencia debe ser muy baja tanto en frecuencias muy bajas, que representan

tendencias y no estacionalidad, como en frecuencias altas, que representan ruido de alta frecuencia, como se observa en la Figura 2.

De esta manera, la densidad espectral de potencia se convierte en un método de análisis cualitativo para determinar el potencial de contenido caótico en una serie de tiempo. Cuando la densidad espectral de potencia indica un contenido caótico débil pero interesante, junto con ruido de baja y/o alta frecuencia, es posible aplicar diversos filtros de pasa bajo, pasa alto o pasa banda como primer proceso de realimentación para resaltar y verificar el contenido caótico de la serie de tiempo (Li, 2008; Vozikis et al., 2018).



Figura 2: Contraste entre la densidad espectral de potencia de tres series de tiempo distintas: una periódica (negro), una estocástica (rojo) y una caótica (azul).

Falsos Vecinos cercanos como indicador de la dimensión de representación de atractores caóticos

Por otro lado, el método de los falsos vecinos cercanos (FNN) utiliza la correlación de los datos de la serie de tiempo en dimensiones crecientes para identificar la dimensión mínima que debe tener el atractor, según la información determinista del caos que contiene. El número de falsos vecinos debe reducirse a medida que aumenta la dimensión hasta que tiende a cero en la dimensión adecuada, para una serie de tiempo ideal, o a una asíntota baja cuando permanece una contaminación de ruido aceptable, como se muestra en la Figura 3. Los FNN son un buen indicador de la contaminación por ruido, ya que las series de tiempo que se contaminan con ruido tienden a aumentar su dimensión

mínima, como el caso del modelo de Lorenz contaminado con ruido. De este modo, los FNN pueden servir para entender cómo aplicar mejor los filtros que permitan resaltar el contenido caótico de la serie de tiempo (Ramdani et al., 2006; Rhodes & Morari, 1997).



Figura 3: Comportamientos de los FNN de diferentes series tiempo. En la periódica y la caótica los FNN tienden a cero en 2D y 3D respectivamente, en la caótica con ruido tienden a cero en una dimensión mayor que la caótica sin ruido y en la estocástica no presentan tendencia a cero.

Máximo exponente de Lyapunov como indicador de caos, midiendo la divergencia de trayectorias inicialmente cercanas.

Los exponentes de Lyapunov, y específicamente el máximo exponente de Lyapunov, miden la sensibilidad del sistema a las condiciones iniciales. Esta medida se obtiene midiendo la divergencia entre trayectorias cercanas en el espacio de fase, la cual aumenta exponencialmente para el comportamiento caótico. El máximo exponente de Lyapunov se puede estimar con alta precisión para una serie de tiempo, dependiendo de la calidad de los datos. Un exponente positivo es un buen indicador de comportamiento caótico en el sistema dinámico de n dimensiones. En un sistema dinámico 3D, se produce el caos cuando hay un exponente positivo, uno cero y uno negativo (Wilkinson, 2017; Wolf et al., 1985).

Medida de la dimensión fractal de atractores extraños.

En los sistemas dinámicos caóticos, la trayectoria se define mediante un atractor extraño que tiene una dimensión fractal o no entera en el espacio de fase. La dimensión del espacio de fase en la que existe el atractor es la dimensión entera inmediatamente mayor que la dimensión del atractor. Existen diferentes métodos numéricos y medidas para estimar la dimensión del atractor en una serie de tiempo, pero la medida de la dimensión de correlación es la más representativa y utilizada para este propósito (Fan et al., 2018).

Ninguno de los cuatro indicadores mencionados anteriormente, ni cualquier otro indicador individual de contenido caótico en una serie de tiempo, es suficiente para establecer de manera definitiva la presencia de caos. Sin embargo, en conjunto, estos indicadores pueden proporcionar resultados más confiables. Debido al ruido generado por el muestreo en series de tiempo reales, a menudo no es posible aislar claramente su posible contenido caótico. Por lo tanto, se requiere un proceso de filtrado inicial para resaltar el posible contenido caótico y mejorar los resultados del modelado. Hay diferentes técnicas para el filtrado de series de tiempo, que dependen de las características del ruido y las fuentes de contaminación presentes en la serie de tiempo. En general, es recomendable tener un conocimiento previo del comportamiento del sistema dinámico en estudio para evitar la eliminación de datos relevantes o la adición de información artificial durante el proceso de filtrado (Kantz & Schreiber, 2004).

Construcción de Modelos en 3D a partir de series de tiempo con comportamiento caótico.

El método de modelado se fundamenta en el proceso presentado en (Brown et al., 1994) y ampliado posteriormente para mediciones climáticas en (Gutiérrez, 2004). Los modelos resultantes describen sistemas dinámicos autónomos no lineales a través de ecuaciones diferenciales de segundo grado de polinomios en tres variables del espacio de fase, como se ilustra en la ecuación 1.

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = F_{\vec{x}}(\vec{x}) = C_{\vec{x}} \cdot \Pi^{I}(\vec{x})$$
(1)

El vector de estado en 3D, $\vec{x} = (x, y, z)$, es el vector de estado en 3D que define la trayectoria como solución del sistema dinámico. Se utilizan solo tres variables del espacio de fase porque, según Robinson (Robinson, 1998), cualquier trayectoria que represente un comportamiento caótico se puede aproximar a un espacio 3D. $\Pi^{I}(\vec{x})$ es la base polinómica ortonormal en tres variables que incluye todas las no linealidades hasta el

orden dos, como se muestra en la ecuación (2). La matriz $C_{\bar{x}}$ es de 3×10 , con treinta elementos, que determinan la contribución de cada término de la base polinómica ortonormal al sistema dinámico. Por lo tanto, el producto del lado derecho de la ecuación (1) genera una matriz de coeficientes con 30 elementos: diez para cada variable, correspondientes a un término constante, tres términos lineales y seis términos no lineales que representan todas las no linealidades hasta el orden dos, que pueden presentar las tres variables (x, y, z). El vector índice de los polinomios, I = (i, j, k), varía desde (i, j, k) = (0, 0, 0) hasta (i, j, k) = (2, 2, 2), con la restricción $k \le j \le i$:

$$\Pi^{(i,j,k)}(\vec{x}) = \sum_{h=0}^{i-1} \sum_{g=0}^{h} \sum_{f=0}^{g} \alpha_{fgh}^{(i,j,k)} x^{h-g} y^{g-f} z^{f} + \sum_{g=0}^{k} \sum_{h=0}^{j-g} \eta_{gh}^{(i,j,k)} x^{i-h-g} y^{h} z^{g}$$
(2)

Para evitar la superposición de datos entre los términos de la base polinómica $\Pi^{I}(\vec{x})$ y garantizar la eficiencia en la representación de la trayectoria, es necesario que los polinomios de la base sean linealmente independientes y normalizados sobre la medida discreta definida en el espacio de fase, es decir, una base ortonormal. Para lograrlo, se utiliza inicialmente el método de reconstrucción de Takens-Mañe (Mane, 1980; Takens, 1981), que convierte la serie de tiempo 1D en una trayectoria 3D en el espacio de fase, representando cada punto de la trayectoria por el vector $(x, y, z) = (x_n, x_{n+\tau}, x_{n+2\tau})$, donde x_n son los *n* datos de la serie de tiempo 1D original y τ es el tiempo de retardo utilizado en el método de Takens-Mañe para la reconstrucción.

El valor óptimo del tiempo de retardo no es fácil de estimar, sin embargo, para evitar el ensayo y error, se recomienda utilizar la teoría de la información mutua (Abarbanel, 1996; Sprott, 2003). Una vez que se realiza la reconstrucción en 3D, se aplica el proceso de ortonormalización de Gram-Schmidt para obtener los coeficientes α y η de la base ortonormal de la ecuación (2).

Se estiman los coeficientes $C_{\bar{x}}$ utilizando el método de predictor-corrector de Adams-Moulton y el método de mínimos cuadrados, junto con un proceso de optimización de la información que permite maximizar la captura del contenido caótico de la serie de tiempo y minimizar las fuentes de contaminación. Con el método de Adams-Moulton, se realiza una integración numérica como predictor de la función que representa la dinámica del vector reconstruido, utilizando la información previa, como se muestra en la ecuación (3):

$$\vec{x}_{n+l} = \vec{x}_n + \Delta t \cdot \sum_{i=0}^{M} \alpha_j^{(M)} F_{\vec{x}} (\vec{x}_{n+l-j})$$
(3)

Donde \vec{x}_n es el término n-ésimo del vector reconstruido, Δt es el tiempo transcurrido entre dos mediciones sucesivas de la serie de tiempo, M es el número de pasos previos utilizados para realizar la corrección de la predicción y $\alpha_j^{(M)}$ son los coeficientes de Adams, los cuales ya se encuentran definidos para varios valores de M (Orvay et al., 2012). Reemplazando $F_{\vec{x}}$ de la ecuación (1) en la ecuación (3) obtenemos la ecuación (4):

$$\left(\sum_{j=0}^{M} \alpha_{j}^{(M)} \Pi^{I}(\vec{x}_{n+I-j})\right) \cdot C_{\vec{x}} = \frac{\varDelta \vec{x}_{n}}{\varDelta t}$$

$$\tag{4}$$

El sistema presentado en la ecuación (4) puede ser expresado como $A\vec{x}=b$, donde \vec{x} representa al vector de coeficientes $C_{\vec{x}}$, A representa a la matriz de la suma de los coeficientes de la base polinómica y \vec{b} representa el vector de la razón de cambio de la serie tiempo. La solución de este sistema se puede obtener como $\vec{x} = A^{\dagger}\vec{b}$, donde A^{\dagger} es la pseudoinversa de la matriz A, la cual se puede obtener a partir de la descomposición en valores singulares. Al aplicar esta técnica, podemos obtener la ecuación (5) donde los coeficientes quedan unívocamente determinados. Esto nos permite utilizar la base polinómica para representar la dinámica del sistema de manera eficiente y precisa.

$$C_{\vec{x}} = \left(\sum_{j=0}^{M} \alpha_{j}^{(M)} \Pi^{I}(\vec{x}_{n+I-j})\right)^{\dagger} \cdot \frac{\varDelta \vec{x}_{n}}{\varDelta t}$$
(5)

El modelo descrito por la ecuación (1) se considera completamente definido una vez que los polinomios de la base $\Pi^{I}(\vec{x})$ han sido determinados y los coeficientes $C_{\vec{x}}$ tienen valores numéricos únicos y bien definidos para una serie de tiempo específica. Una vez que el modelo ha sido construido, se utiliza el método numérico de Runge-Kutta para integrarlo, con una resolución de pasos de 0,01 entre iteraciones sucesivas y un total de 10000 iteraciones para evaluar las soluciones de los sistemas dinámicos resultantes. El resultado final es la trayectoria del sistema en el espacio de estado 3D correspondiente a una serie de tiempo particular, definida por las variables (x, y, z).

Implementación del proceso mediante el software CMRTS.

CMRTS (Chaotic Models Reconstruction from Time Series) es un software desarrollado por el Grupo de Investigación en Sistemas Complejos de la Universidad Antonio Nariño, junto con el Doctorado en Ciencia Aplicada. Este software sirve para la reconstrucción de modelos no lineales con comportamiento caótico a partir de una serie de tiempo (Cruz et al., 2021). Escrito en lenguaje Python, CMRTS cubre los métodos de reconstrucción y análisis de modelos descritos previamente. La interfaz gráfica de usuario se divide en tres partes principales: Modelo, preproceso y proceso, como se muestra en la Figura 4.

La sección "Model" de CMRTS permite al usuario interactuar con los modelos obtenidos para una serie de tiempo específica. En esta sección, es posible integrar los modelos mediante el método de Runge-Kutta de cuarto orden, ajustar los parámetros, como el paso de integración y el número deseado de iteraciones en cada integración. Además, cuenta con diversas herramientas de visualización para una inspección visual y análisis detallado de las trayectorias generadas por la integración de los modelos.

	c	x y	z	x^2	ху	xz	y^2	yz	z^2
dx/dt	0	0	0	0 0	0	0	0	0	0
dy/dt	0	0	0	0 0	0	0	0	0	0
dz/dt	0	0	0	0 0	0	0	0	0	0
Lorenz	Gen ST	Plot x	Plot y	Plot z	Plot 3D	Plot y	vs x Plo	ot z vs x	Plot z vs y
Clear	N= 10000	dt= 0.01	Tau= 0	Load Test	ST.dat	Save Tes	tST.dat	Save=l	oad
cale 1									
e Process									

Figura 4: Interfaz gráfica de usuario del CMRTS, con sus diferentes funcionalidades divididas en las secciones correspondientes a las etapas del método, haciendo su aplicación más intuitiva, ágil y sencilla.

La sección "*Pre-process*" de CMRTS se enfoca en verificar la presencia de comportamiento caótico en la serie de tiempo mediante el uso de las medidas de caos presentadas previamente. En esta sección, la herramienta de software realiza cálculos numéricos y gráficos de información mutua,

densidad espectral de potencia, falsos vecinos cercanos, máximo exponente de Lyapunov y dimensión de correlación. Estas medidas son necesarias y suficientes para evaluar la presencia de comportamiento caótico en la serie de tiempo. Además, esta sección ofrece la posibilidad de aplicar filtros digitales, técnicas para eliminar tendencias y procedimientos de suavizado con el fin de resaltar el contenido caótico de la serie de tiempo.

La sección "*Process*" es donde se realiza la construcción de los modelos de forma transparente para el usuario. Aquí se implementa el teorema de reconstrucción de Takens-Mañe, el proceso de ortonormalización de Gram-Schmidt, el método predictor-corrector de Adams-Moulton y el método de mínimos cuadrados para obtener la reconstrucción del modelo. Además, se puede variar el tiempo de reconstrucción τ para construir varios modelos a partir de una única serie de tiempo y evaluarlos posteriormente utilizando la sección "*Model*".

El objetivo de CMRTS es proporcionar una herramienta ágil y fácil de usar que permita la ejecución del método de reconstrucción de modelos caóticos descrito aquí, incluso de manera transparente al usuario, lo que lo hace aplicable en varias áreas y disciplinas de las ciencias, sin necesidad de ser un experto en teoría del caos. Para esto, se realizaron pruebas en series de tiempo artificiales utilizando el sistema de Lorenz para demostrar la capacidad de reconstruir las dinámicas caóticas de los sistemas a partir de una serie de tiempo escalar finita y relativamente corta. Además, se evaluó la funcionalidad y utilidad de CMRTS en series de tiempo reales del voltaje de las PEMFC.

Validación del procedimiento usando el Sistema de Lorenz.

El sistema de Lorenz fue propuesto por Edward Lorenz en sus estudios para simplificar los modelos climáticos (Lorenz, 1963). Se trata de un sistema dinámico no lineal en tres dimensiones, representado por la ecuación (6), que presenta soluciones caóticas cuando sus parámetros toman valores específicos: $\sigma = 10$, $\rho = 28$ y $\beta = 8/3$.

$$\dot{x} = \alpha(y-x)$$

$$\dot{y} = x(\beta-z)-y$$

$$\dot{z} = xy-\rho z$$
(6)

Los puntos sobre las variables del sistema de Lorenz representan su variación en función del tiempo, lo que lo convierte en un sistema dinámico y no lineal debido a los términos no lineales *xz*

en la variación de y y xy en la variación de z. Este sistema es un caso particular de los sistemas dinámicos en 3D hasta segundo orden en sus tres variables, los cuales tienen 30 términos y sus correspondientes coeficientes (uno constante c, tres lineales x, y, z y seis no lineales xx, yy, zz, xy, xz, yz, por cada una de las variaciones de las tres variables). En el sistema de Lorenz, 23 coeficientes son cero, y los siete coeficientes distintos de cero, indicados en la ecuación (6) y en la Tabla 1, deben tener valores precisos para que el sistema tenga solución caótica. La representación gráfica de la trayectoria resultante de la integración de este sistema de ecuaciones diferenciales en el espacio de fase muestra un atractor extraño de dimensión fractal igual a 2.06, conocido como el atractor de Lorenz. (Munmuangsaen & Srisuchinwong, 2018; Sprott, 2003).

Tabla 1: Sistema de Lorenz representando los valores de sus 30 coeficientes cuando tiene solución caótica. Un término constante c, tres términos lineales x, y z, y los seis términos no lineales hasta segundo orden.

	с	x	у	Z	x^2	xy	xz	y^2	yz	z^2
ż	0	-10	10	0	0	0	0	0	0	0
ÿ	0	28	-1	0	0	0	-1	0	0	0
ż	0	0	0	-8/3	0	1	0	0	0	0

Caos determinista en el funcionamiento de las PEMFC.

La operación de las PEMFC se puede entender de manera sencilla. Cuando una molécula de hidrógeno gaseoso es alimentada en el ánodo, se descompone en 2 electrones y 2 protones. Los electrones viajan a través de un circuito, mientras que los protones pasan a través de la membrana de la PEMFC. En el cátodo, los electrones, protones y el oxígeno (ya sea puro o del aire) reaccionan para formar agua y calor, tal como se muestra en la Figura 5. Las reacciones electroquímicas en las PEMFC suceden simultáneamente en el ánodo y el cátodo, como se ve en la ecuación (7). (Barbir, 2013).



Figura 5: Esquema del funcionamiento básico de las PEMFC. Donde se ilustra la entrada y salida de los gases y la generación de corriente a partir de la división del hidrógeno en electrones y protones (Zhang et al., 2013).

Reacción en el ánodo Reacción en el Cátodo Reacción Completa

$$2H_2 \rightarrow 4H^+ + 4e^ O_2 + 4H^+ + 4e^- \rightarrow 2H_2O + calor$$
 $2H_2 + O_2 \rightarrow 2H_2O + calor$ (7)

Aunque el funcionamiento básico de las PEMFC es sencillo, alcanzar y mantener las condiciones ideales de operación durante largos períodos de tiempo es difícil de lograr (Peighambardoust et al., 2010). Esto se debe a que las pérdidas disminuyen en la medida que la relación entre las presiones parciales de los reactivos H_2 , O_2 y las presiones parciales del producto H_2O es menor, de acuerdo con la ecuación (8). En esta ecuación, V_0 es el potencial teórico de la celda dado por la energía libre de Gibbs, R es la constante de los gases, T es la temperatura de la celda, α es el coeficiente de transferencia, *i* es la densidad de corriente, *n* es el número de electrones por molécula de H_2 , F es la constante de Faraday y R_i es la resistencia interna total de la celda (Barbir, 2013; Musio et al., 2011).

$$V = V_0 - \frac{RT}{\alpha F} ln \left(\frac{i}{i_0}\right) - \frac{RT}{nF} ln \left(\frac{P_{H_2} P_{O_2}^{1/2}}{P_{H_2 O}}\right) - iR_i$$
(8)

La resistencia R_i está directamente relacionada con la humedad de la membrana. Una membrana con niveles altos de humedad relativa se hace más conductora, lo que reduce la resistencia. Sin embargo, es importante no inundar la membrana, ya que esto puede tapar los canales por donde pasan los protones y afectar el funcionamiento de la celda. Si la membrana está completamente

humedecida, puede derivar en un cátodo inundado, que afecta las presiones parciales de los reactivos en el cátodo y degrada el rendimiento de la celda de combustible. Por otro lado, ligeras variaciones en la temperatura, el flujo de gas del cátodo y el contenido de humedad pueden inundar el cátodo o secar la membrana, lo que se considera una condición de operación no óptima (Wang et al., 2021).

En la mayoría de las condiciones de operación, los transientes de potencia y los sistemas de control provocarán variaciones en la corriente, el voltaje, la temperatura, el flujo y las presiones parciales de los gases, lo que hace muy difícil que el sistema se mantenga en las condiciones óptimas de operación para cada demanda de potencia (Herrera Vega et al., 2014). Por lo tanto, es necesario tener un control óptimo de estos parámetros mediante técnicas de monitorización y diagnóstico (Bressel et al., 2015; Sinha & Mondal, 2018; Zheng et al., 2013; Ziogou et al., 2013). Entre las técnicas más utilizadas para el diagnóstico de PEMFC se encuentran aquellas que se basan en la construcción de modelos de su funcionamiento para optimizar su vida útil y detectar fallos.

Los modelos utilizados en el diagnóstico de PEMFC se pueden dividir en tres ramas principales: modelos analíticos o de caja blanca, modelos de caja negra y modelos de caja gris, que son una combinación de los dos primeros (Petrone et al., 2013). Los modelos de caja blanca se basan en ecuaciones diferenciales que describen el comportamiento ideal de las PEMFC y son muy efectivos para detectar fallos en su funcionamiento (Qin et al., 2020). Sin embargo, debido a la complejidad del comportamiento de las PEMFC, estos modelos son computacionalmente costosos y no son adecuados para el diagnóstico en línea (Petrone et al., 2013). Por otro lado, los modelos de caja negra se crean a partir de correlaciones entre los datos de entrada y salida, lo que los hace más eficientes en términos de tiempo de ejecución y adecuados para el diagnóstico en línea de las celdas de combustible. Las redes neuronales y la lógica difusa son los métodos más utilizados en este tipo de modelos (Ibrahim et al., 2015; Pereira et al., 2017; Yuan et al., 2020; Benchouia et al., 2015; Harrag & Messalti, 2018). Finalmente, los modelos de caja gris intentan resolver el problema del tiempo de cálculo que presentan los modelos de caja blanca al reducir el número de variables consideradas. Esto se logra mediante la identificación de correlaciones entre las variables, lo que implica una pérdida de generalidad del modelo a medida que se reducen las variables (Ibrahim et al., 2016).

Este trabajo presenta un método para combinar modelos de caja blanca y caja negra de las PEMFC en situaciones particulares en las que la celda presenta un comportamiento caótico. Este comportamiento caótico se caracteriza por la presencia de un atractor extraño en el espacio de fase, lo que proporciona estabilidad y robustez a la celda, manteniéndose en un estado de estabilidad no lineal durante largos periodos de tiempo. Si se puede confirmar que la PEMFC está en este estado caótico, se espera que permanezca en este estado de autorregulación, lo que permitiría reducir el costo energético del control activo de la PEMFC, aumentando su eficiencia y vida útil. En resumen, este método puede ofrecer una estrategia eficaz para mejorar el rendimiento y la vida útil de las PEMFC.

Capítulo 3: Metodología

Se propone un método que consta de dos etapas para analizar y modelar una serie de tiempo. En la primera etapa, se emplean herramientas de análisis de series de tiempo para determinar si la serie tiene un comportamiento caótico, como se muestra en la Figura 1. En la segunda etapa, se utilizan herramientas de cálculo numérico y el teorema de reconstrucción de Takens-Mañe, como se muestra en la Figura 6, para construir modelos tridimensionales de orden 2 que se ajusten mejor a los datos de la serie de tiempo. El método se probó inicialmente con series de tiempo artificiales generadas a partir del modelo de Lorenz y luego se aplicó a datos reales del voltaje de las PEMFC para demostrar su potencial aplicación en sistemas reales. Con este enfoque, se busca reducir el costo energético del control activo de las PEMFC, aumentando así su eficiencia y vida útil en un estado de autorregulación caótico y estable.

Uso del Sistema de Lorenz para validación y calibración del procedimiento.

Para iniciar, se llevaron a cabo pruebas con series de tiempo ideales obtenidas a través de la integración del sistema de Lorenz. Para esto, se empleó el método de Runge-Kutta de cuarto orden con un paso de tiempo $\Delta t = 0.01$ y se realizaron N = 10000 iteraciones. Luego, se utilizó CMRTS con los valores obtenidos de la integración como serie de tiempo de estudio. Este proceso se muestra de forma gráfica en la Figura 6.



Figura 6: Procedimiento a seguir para reconstruir el modelo del sistema dinámico utilizando los datos de la serie de tiempo.

Inicialmente para demostrar la capacidad de construir modelos dinámicos con precisión, se hace el procedimiento de modelado utilizando las tres variables integradas del modelo de Lorenz $\vec{x_n} = (x_n, y_n, z_n)$. En este caso, no es necesario aplicar el proceso de reconstrucción de Takens-Mañe,

ya que se está utilizando la información de las tres variables. Al comprobar que sí es posible obtener el mismo modelo mostrado en la Tabla 1, se aplica el proceso de reconstrucción utilizando solamente la información contenida en la variable x, en este caso $\vec{x_n} = (x_n, x_{n+\tau}, x_{n+2\tau})$ y se construyen modelos a partir de esta serie de tiempo. Después, para simular una serie de tiempo real se contamina con ruido blanco tipo gaussiano. La amplitud de este ruido blanco se calcula con el promedio entre los valores máximo y mínimo de la variable x integrada del sistema de Lorenz, $A = (x_{min} + x_{max})/2$. Se contamina la serie de tiempo con tres niveles distintos de amplitud del ruido blanco, 1%, 5% y 10% que corresponden a amplitudes de A/100, A/20 y A/10, respectivamente. A continuación se evalúa si la dinámica del sistema se recupera mejor aplicando un filtro digital a la serie de tiempo de fácil implementación y efectivo para reducir la contaminación con ruido blanco, como es el filtro de media móvil, a los datos contaminados con las amplitudes de ruido mencionadas, con el fin de verificar la utilidad del filtrado en el preprocesamiento de series de tiempo reales. Finalmente, después de comprobar que el método logra la reconstrucción apropiada de la dinámica caótica del sistema de Lorenz, se aplica este método a las series de tiempo del voltaje de las PEMFC, con el fin de entender mejor la dinámica de su funcionamiento en regímenes de operación caóticos que permita reducir la cantidad de actuadores necesarios y de este modo mejorar dos aspectos muy importantes de esta celda de combustible, su eficiencia y tiempo de vida.

Obtención de series de tiempo del voltaje de las PEMFC con posible comportamiento caótico.

Los experimentos que generaron las series de tiempo utilizadas en este estudio fueron realizados en el laboratorio especializado FCLAB, un centro de recursos técnicos y científicos dedicado a los sistemas en el sector de la Energía del Hidrógeno en Francia (*https://www.fclab.fr/*). Se utilizó un banco de pruebas con entrada controlada de gases, válvulas de purga, control de presiones parciales, temperatura y humedad relativa *HR*. Se empleó una celda de combustible de la marca ZSW compuesta por cinco celdas cuadradas, cada una con un área efectiva de 100 cm^2 para obtener las series de tiempo de medidas del voltaje con las características que se muestran en la Tabla 2. Debido a la dificultad de controlar y conservar estable la humedad relativa *HR* de la membrana, esta se mantuvo alrededor del 70 % para todos los experimentos.

Los valores para las variables fueron elegidos considerando que el comportamiento caótico de las PEMFC tiende a ocurrir en condiciones donde la presión de vapor es cercana a la presión de saturación y la humedad de la membrana está cercana a la saturación, donde el riesgo de inundación es más elevado (Barbir, 2013; Burkholder, 2015; Zhang et al., 2013). Esta situación puede suceder para una variedad de combinaciones de las variables de la celda. En este estudio se utilizaron las condiciones que se muestran en la Tabla 2, debido a que estas condiciones ya se han reportado en la literatura como condiciones de posible comportamiento caótico (Burkholder et al., 2014). Los experimentos se realizaron para las 27 combinaciones de los valores de las variables, mostrados en la Tabla 2, con una tasa de muestreo de 5 observaciones cada 3 segundos, por un período de tiempo de 15 minutos. con este procedimiento se obtuvieron 27 series de tiempo del voltaje de la celda de combustible, cada una con *1500* datos. Las series de tiempo obtenidas se probaron para determinar cuáles presentaban un posible comportamiento caótico, como se describió en la sección 2.1. El procedimiento fue ejecutado por el software CMRTS descrito en la sección 2.3. Se seleccionaron las series de tiempo de voltaje que mostraron mayores indicios de un posible comportamiento caótico.

Tabla 2: Diseño de experimentos para detectar caos determinista en el voltaje de las PEMFC. Se variaron la temperatura del agua de refrigeración T, la estequiometría del hidrógeno Sto y la densidad de corriente J, cada una en tres valores diferentes, obteniendo 27 combinaciones de valores de parámetros.

HR (%)	T ℃	Sto	J (Acm ⁻²)
	50	1.1	0.8
~70	55	1.3	0.9
	60	1.5	1

Aplicación del proceso a las series de tiempo obtenidas del voltaje de las PEMFC.

Después de aplicar medidas de caos a 27 series de tiempo, se seleccionan aquellas que cumplen con los criterios previamente mencionados. Se procede a eliminar posibles tendencias y contaminaciones de ruido. Para eliminar las tendencias, se ajusta la serie de tiempo a una línea recta mediante el método de mínimos cuadrados y se resta el valor de la línea recta de cada punto de

datos de la serie de tiempo. Para eliminar la contaminación por ruido de alta frecuencia, cada punto de datos de la serie de tiempo se reemplaza por el valor medio de sus cuatro puntos de datos vecinos más cercanos, ponderados por los coeficientes del triángulo de Pascal, lo que se conoce como filtro binomial: $x_i^f = \frac{1}{16} (x_{i-2} + 4x_{i-1} + 6x_i + 4x_{i+1} + x_{i+2})$, donde x_i^f es el i-ésimo punto de datos filtrados de la serie de tiempo. Luego se procede a construir modelos de los sistemas correspondientes a cada serie de tiempo, sin tendencias y sin ruido de alta frecuencia. Este procedimiento también se ejecuta en el software CMRTS, comenzando con la reconstrucción 3D en el espacio de fase de cada una de las series de tiempo del voltaje, utilizando el teorema de Takens-Mañe, previamente mencionado. Como no existe una fórmula para calcular el τ óptimo para la reconstrucción de modelos, se varía el tiempo de retardo τ de 1 a 200, obteniendo el mismo número de reconstrucciones y modelos para cada serie de tiempo. La base polinómica ortonormal se obtiene aplicando el proceso de Gram-Schmidt a la trayectoria 3D reconstruida. Los coeficientes $C_{\vec{x}}$ del modelo se obtienen mediante el método predictor corrector de Adams-Moulton y la pseudoinversa de Moore-Penrose. Para corregir la predicción de los valores de $F(\vec{x})$, se emplea el método de Adams-Moulton con un número de pasos previos recomendados para este método, M=3, considerando el vector reconstruido x_n , tal como se muestra en la ecuación (4). Luego se utiliza la pseudoinversa de Moore-Penrose como se muestra en la ecuación (5). Finalmente, con la base polinómica ortonormalizada y los coeficientes $C_{\bar{x}}$ determinados, se multiplican estos dos factores para obtener un modelo de la forma que se muestra en la ecuación (1). Es importante destacar que este método permite construir modelos exclusivamente a partir de datos experimentales, sin necesidad de ninguna otra información aparte de la contenida en las series de tiempo de la señal del voltaje de la celda de combustible en las condiciones de cada caso.

Finalmente, se aplica el método de Runge-Kutta de cuarto orden para integrar los modelos obtenidos y obtener la trayectoria en el espacio de fase correspondiente a cada caso. Para lograr esto, se utiliza un paso de integración h=0.01 y se realizan un total de N=10000 iteraciones, con condiciones iniciales $(x_0, y_0, z_0)=(x_1, x_{1+\tau}, x_{1+2\tau})$, donde x_1 representa el primer dato de la serie de tiempo del voltaje que se está modelando.

Los modelos integrados se evalúan inicialmente por observación, seleccionando aquellos que puedan presentar cualitativamente una solución caótica y describan un atractor extraño. Adicionalmente, se emplean las medidas de caos descritas en la sección 2.1 para seleccionar los modelos más prometedores. El uso de CMRTS facilita probar diferentes series de tiempo, valores de parámetros y modelos, lo que permite realizar ensayos y errores de manera ágil para encontrar las mejores condiciones y converger hacia el modelo óptimo para una serie de tiempo determinada.

Capítulo 4. Resultados y Análisis

Para verificar el buen funcionamiento del método y su implementación en CMRTS, se aplicó el procedimiento mostrado en la Figura 6 a series de tiempo numéricas obtenidas de la integración del sistema de Lorenz, utilizando $\vec{x_n} = (x_n, y_n, z_n)$. De este modo, se obtuvieron los mismos coeficientes que aparecen en la Tabla 1, los cuales corresponden exactamente a los valores de los coeficientes del sistema de Lorenz cuando presenta comportamiento caótico. Con esto se demuestra que el método funciona adecuadamente para recuperar el modelo de Lorenz al utilizar los datos de las 3 variables integradas. Es importante destacar que estas series de tiempo son ideales por su alta resolución, frecuencia de muestreo, ausencia de contaminación y tamaño suficientemente grande.

Aplicación del procedimiento a las variables (x, y, z) del Sistema de Lorenz.

	С	x	у	Ζ	<i>x</i> ²	xy	xz	y^2	yz	z^2	Modelo
	0	-10	10	0	0	0	0	0	0	0	Original
ż	2,901	-11,245	10,745	-0,373	-0,053	0,043	0,033	-0,007	-0,019	0,011	Ruido 1%
	9,191	-27,662	20,057	-0,984	-0,165	0,152	0,459	-0,04	-0,244	0,031	Ruido 5%
	1,114	-40,406	25,816	-0,1344	-0,154	0,129	0,76	-0,033	-0,348	0,015	Ruido 10%
	0	28	-1	0	0	0	-1	0	0	0	Original
<i>i</i> v	-0,831	28,706	-1,429	0,09	0,011	-0,012	-1,018	0,003	0,009	-0,002	Ruido 1%
2	-5,124	36,075	-6,137	0,479	0,049	-0,048	-1,191	0,009	0,1	-0,012	Ruido 5%
	-1,513	45,009	-12,651	0,477	0,138	-0,123	-1,355	0,012	0,178	-0,02	Ruido 10%
	0	0	0	-2,666	0	1	0	0	0	0	Original
ż	-4,146	-0,085	0,041	-2,052	0,104	0,915	0,003	0,013	-0,001	-0,02	Ruido 1%
	-14,309	1,471	-0,999	0,257	0,651	0,367	-0,04	0,156	0,027	-0,109	Ruido 5%
	15,285	1,3	-0,392	-1,107	0,82	0,134	-0,031	0,235	0,003	-0,114	Ruido 10%

Tabla 3: Diferencia entre los coeficientes originales del sistema de Lorenz y los que se recuperan cuando se suma ruido blanco de tipo gaussiano con amplitud de 1%, 5% y 10%.

La Tabla 3 muestra la comparación de los coeficientes recuperados mediante la aplicación del procedimiento a los datos obtenidos al integrar el sistema de Lorenz utilizando las tres variables, pero adicionando ruido blanco con amplitudes del 1%, 5% y 10%. En este caso, se puede observar que la presencia de ruido no permite obtener los valores exactos de los coeficientes del modelo de Lorenz. A medida que aumenta la amplitud del ruido, los coeficientes tienden a alejarse más de los valores originales. Sin embargo, se mantiene una fuerte correlación entre ellos.



Figura 7: Atractores obtenidos al integrar los modelos que se presentan en la Tabla 3. Para las contaminaciones con ruido %5 y 10% se pierde la estructura del atractor.

La Figura 7 ilustra los atractores obtenidos al integrar los modelos presentados en la Tabla 3. Se puede observar que, para el ruido de baja amplitud, se puede recuperar la dinámica del sistema, aunque los coeficientes no tengan los valores exactos del modelo de Lorenz. Esto proporciona una forma de medir la robustez del atractor ante la contaminación. En cambio, para los casos con ruido de amplitud 5% y 10%, se presentan atractores de punto fijo, donde la evolución del sistema en el espacio de fase converge hacia un punto y tienen una dimensión entera, es decir, no son fractales. Esto indica que en estos casos no se está recuperando la dinámica caótica del sistema de Lorenz.



Figura 8: Densidad espectral de potencia de las trayectorias mostradas en la Figura 7 en donde se evidencia la pérdida de características caóticas, especialmente en los casos de ruido 5% y 10%.

La Figura 8 muestra la densidad espectral de potencia, resultado de integrar los coeficientes presentados en la Tabla 3. Aquí se revela la pérdida gradual de las características caóticas a medida que aumenta el nivel de ruido en las series de tiempo. De hecho, esta pérdida es tan significativa que otras medidas de caos no pueden ser realizadas o proporcionan resultados espurios.

	С	x	у	Z	x^2	xy	xz	y^2	yz	z^2	Modelo
	0	-10	10	0	0	0	0	0	0	0	Original
<i>x</i>	0,620	-10,026	10,031	-0,071	-0,008	0,009	0,001	-0,002	-0,001	0,002	Ruido 1%
	-0,540	-8,642	9,145	0,162	0,045	-0,034	-0,040	0,001	0,024	-0,007	Ruido 5%
	-1,010	-6,664	7,959	0,204	0,048	-0,039	-0,098	0,001	0,058	-0,007	Ruido 10%
	0	28	-1	0	0	0	-1	0	0	0	Original
ý	-3,110	24,931	-0,536	0,391	0,062	-0,077	-1,005	0,027	0,015	-0,011	Ruido 1%
	-3,900	24,256	-0,196	0,442	0,067	-0,089	-0,986	0,033	0,009	-0,012	Ruido 5%
	1,660	22,731	0,729	-0,127	-0,006	-0,009	-0,934	0,006	-0,024	0,004	Ruido 10%
	0	0	0	-2,67	0	1	0	0	0	0	Original
ż	-3,100	0,146	-0,097	-1,545	0,708	0,204	-0,005	0,291	0,003	-0,054	Ruido 1%
	4,000	0,315	-0,244	-2,633	0,496	0,387	-0,011	0,263	0,008	-0,017	Ruido 5%
	12,600	0,591	-0,531	-3,869	0,263	0,601	-0,018	0,216	0,018	0,025	Ruido 10%

Tabla 4: Coeficientes que se recuperan cuando se filtra el ruido agregado a los datos del sistema de Lorenz.Se observa la mejora en la recuperación de los coeficientes originales.

En la Tabla 4 se presentan los coeficientes obtenidos después de aplicar el método a las mismas series de tiempo, pero filtradas. Al comparar los resultados de cada coeficiente de la Tabla 3 con su respectivo coeficiente en la Tabla 4, se observa una clara mejora en los coeficientes recuperados. Esta mejora se refleja en la Figura 9, donde se muestran los atractores resultantes al integrar los modelos con los valores de los coeficientes de la Tabla 4. Se puede apreciar que, aunque los coeficientes no coinciden exactamente con los del modelo original de Lorenz, se logra recuperar la dinámica del sistema en todos los casos, algo que no se conseguía con los coeficientes de la Tabla 3.

Las medidas de caos también reflejan una mejor reconstrucción del modelo del sistema caótico tras filtrar las series de tiempo. En la Figura 10 se muestra cómo las densidades espectrales de potencia de las series de tiempo con ruido filtrado mantienen las características de caos en todos los casos. Además, en la Figura 11, los FNN de las series de tiempo filtradas no difieren de los FNN de la serie de tiempo del sistema recuperado sin ruido. Estas mismas similitudes se observan en las demás medidas de caos, lo que indica que, mediante el proceso de filtrado, se logró recuperar la dinámica del sistema, incluso cuando las series de tiempo estaban inicialmente contaminadas con ruido blanco.



Figura 9: Atractores obtenidos al integrar los modelos que se presentan en la Tabla 4. En todos los casos se recupera el atractor, evidencia de la importancia del proceso de filtrado en las series de tiempo.



Figura 10: Densidad espectral de potencia de las trayectorias mostradas en la Figura 9 en donde se puede ver que la recuperación de los coeficientes mejora con el proceso de filtrado.



Figura 11: FNN de las trayectorias mostradas en la Figura 9. Los FNN son idénticos para todas las trayectorias, otra prueba de la eficacia del proceso de filtrado.

Aplicación del procedimiento a la variable x del Sistema de Lorenz, utilizando la reconstrucción de Takens-Mañe.

Para demostrar que el método también funciona con series de tiempo escalares de una dimensión (1D), se aplicará el teorema de reconstrucción de Takens-Mañé para reconstruir la trayectoria en tres dimensiones $\vec{x_n} = (x_n, x_{n+\tau}, x_{n+2\tau})$. Para ello, se utiliza el método de la información mutua en la serie de tiempo de la variable x del modelo de Lorenz, de este modo, se encontró que el tiempo de retardo sugerido para la reconstrucción es de $\tau = 16$.

Se obtuvo el atractor mostrado en la Figura 12(a) al utilizar $\tau = 16$ para la reconstrucción y cálculo de los coeficientes del modelo. Este atractor presenta un comportamiento toroidal (Faust et al., 2015), propio de un sistema periódico en 3D, lo que no representa la dinámica caótica del sistema de Lorenz. Para obtener un atractor más representativo, se realizó una exploración extensa de posibles valores de τ , desde *1* hasta *100*, y se encontró que con $\tau_r = 69$ se recupera de manera más eficiente la dinámica del sistema, como se muestra en la Figura 12(b). A partir de ahora, para evitar confusiones, se utilizará τ para el tiempo de retardo calculado con la información mutua y utilizado para estimar las medidas de caos, y τ_r para el tiempo de retardo utilizado en la reconstrucción de los modelos.

Se utilizó el valor de $\tau_r = 69$ como referencia para verificar si la dinámica del sistema podría ser recuperada al aplicar ruido a la serie de tiempo. Sin embargo, los resultados obtenidos no fueron satisfactorios, por lo que se probaron valores cercanos a τ_r , desde 65 hasta 75. Después de realizar diversas pruebas, se logró recuperar el atractor que se muestra en la Figura 13 con un valor de $\tau_r = 68$, pero solo para la serie de tiempo contaminada con un ruido de amplitud del 1%. Lamentablemente, para las series de tiempo contaminadas con ruidos del 5% y 10%, no se logró recuperar la dinámica del sistema con ningún valor de τ_r . De este modo se encontró que en los casos de contaminación con ruido de baja amplitud, se reconstruye la dinámica, pero con un valor distinto de τ_r .



Figura 12: Atractores recuperados empleando el método de reconstrucción de Takens-Mañé, (a) utilizando $\tau_r = 16 y$ (b) utilizando $\tau_r = 69$.



Figura 13: Atractor recuperado a partir de una serie de tiempo contaminada con ruido de amplitud 1%, utilizando $\tau_r = 68$ para la reconstrucción.

Se aplicó el proceso de filtrado a las series de tiempo contaminadas con ruido de 1%, 5% y 10% utilizando un filtro de media móvil central. Teniendo en cuenta que estas series de tiempo estaban contaminadas con ruido, se tomó como referencia el valor $\tau_r = 68$ para realizar la reconstrucción. En la Figura 14 se presentan los atractores obtenidos al reconstruir los modelos después de filtrar los ruidos. Como se puede ver, se logró recuperar los atractores para las tres series de tiempo filtradas.



Figura 14: Atractores recuperados a partir de la reconstrucción, después de aplicar un filtro de media móvil central al ruido previamente adicionado. (a) ruido de 1%, (b) ruido de 5% y (c) ruido de 10%. En los 3 casos se usó $\tau_r = 68$. Es importante considerar que la recuperación de un atractor es en sus propiedades topológicas, no en la precisión de cada punto de su trayectoria.

Para verificar la similitud entre los atractores reconstruidos y el atractor de Lorenz, se utilizaron varias medidas de caos y se presentan los resultados en la Tabla 5. Las medidas incluyen RSR (Reconstruido Sin Ruido), RR (Reconstruido con Ruido), RRF (Reconstruido con Ruido), FNN (Falsos vecinos cercanos), Lyap (Máximo exponente de Lyapunov) y DC (Dimensión de

correlación). El valor de τ_r se refiere al tiempo de retardo utilizado en la reconstrucción del modelo. Es importante mencionar que el valor FNN de aproximadamente 4 se debe al ruido residual presente en la reconstrucción y afecta el cálculo de los FNN, mientras que los exponentes de Lyapunov y la dimensión de correlación tienen valores que corresponden a atractores caóticos. A pesar de las limitaciones al trabajar con una sola serie de tiempo real, los resultados indican una gran similitud entre los atractores reconstruidos y el atractor de Lorenz en términos de las medidas de caos y la forma del atractor en el espacio de fase.

Tabla 5: Comparación entre las medidas de caos del sistema de Lorenz y las obtenidas para los atractores reconstruidos. Donde RSR = Reconstruido Sin Ruido, RR = Reconstruido con Ruido, RRF = Reconstruido con Ruido, FNN = Falsos vecinos cercanos, Lyap = Máximo exponente de Lyapunov y DC = Dimensión de Correlación

	Lorenz	RSR	RR 1%	RRF 1%	RRF 5%	RRF 10%
	N/A	N/A 69		68	68	68
FNN	3	~ 4	~ 4	~ 4	~ 4	~ 4
Lyap	0,95	0,62	0,71	0,71	0,68	0,84
DC	2,11	2,09	2,11	2,2	2,22	1,88

Con los resultados positivos obtenidos al aplicar el método al atractor de Lorenz, es posible extender el método a las series de tiempo reales del voltaje de la PEMFC. Sin embargo, de los 27 experimentos propuestos en la Tabla 2, solo fue posible obtener series de tiempo de datos de voltaje para 19 de ellos, debido a que en los otros 8 experimentos se activó automáticamente el sistema de control, lo que detuvo la operación por motivos de seguridad de la pila de combustible. Las correspondientes series de tiempo del voltaje de los 19 experimentos se analizaron utilizando las medidas de caos descritas anteriormente. Es importante tener en cuenta que las medidas de caos no tienen valores específicos, sino que son indicadores de la dinámica representada por las series de tiempo.

Selección de las series de tiempo, para construir los modelos del comportamiento caótico de las PEMFC.

La Tabla 6 presenta los resultados de las 19 series de tiempo del voltaje de la PEMFC, junto con los valores de los parámetros de operación correspondientes. El identificador de cada experimento se registra en la columna " N_{Test} ", mientras que "T" se refiere a la temperatura de la pila, "*Sto*" a la estequiometría del hidrógeno, "J" a la densidad de corriente y "HR" a la humedad relativa de la membrana. En la columna "PS" se muestra la densidad espectral de potencia como una medida cualitativa visual, en la que "Y" indica un claro potencial de contenido caótico de la serie de tiempo, y "N" en caso contrario. El valor de τ es el tiempo de retardo obtenido a partir de la información mutua, mientras que "FNN" es la estimación de la dimensión mínima necesaria para representar el atractor en el espacio de fase. El máximo exponente de Lyapunov "Lyap" indica la sensibilidad a las condiciones iniciales cuando es positivo, y la dimensión de correlación "CD" indica un atractor extraño cuando su valor no es entero.

Es importante tener en cuenta que estas medidas se utilizan como indicadores del posible contenido de caos en la serie de tiempo, pero no se espera que sean tan precisas como en el modelo de Lorenz debido a las limitaciones que se tienen en un entorno de experimentación real. Sin embargo, se espera que la densidad espectral de potencia tenga una forma definida, que los FNN sean cercanos a *3*, que el máximo exponente de Lyapunov sea positivo y que la dimensión de correlación no sea un número entero.

Los experimentos $N_{Test}=3$, 6, 8, 14 y 15 se destacan en la Tabla 6 con líneas grises para indicar que presentan medidas más prometedoras de un comportamiento caótico. Además, en estos experimentos, se obtuvo un valor de FNN igual a 3. En particular, el tiempo de retardo τ en estos experimentos es el más pequeño, lo que indica que las correlaciones no lineales son de corta persistencia en el tiempo (Wallot & Mønster, 2018). Asimismo, los máximos exponentes de Lyapunov son positivos, lo que indica la presencia de sensibilidad a las condiciones iniciales y un atractor (Kantz & Schreiber, 2004). Finalmente, los resultados de la dimensión de correlación CD no son enteros, lo que sugiere un potencial contenido caótico en estas series de tiempo.

N _{Test}	Т	Sto	J	RH	PS	τ	FNN	Lyap	CD
1	50	1,3	0,8	75	N	24	4	0	6,23
2	50	1,3	0,9	73	N	25	4	0	9,11
3	50	1,3	1	76	Y	4	3	0,11	6,63
4	50	1,5	0,9	80	N	18	4	0	1,17
5	50	1,5	1	76	N	16	4	0,07	8,29
6	55	1,1	0,8	74	Y	12	3	0,31	7,49
7	55	1,3	0,8	70	N	29	4	0,06	7,60
8	55	1,3	0,9	65	Y	8	3	0,10	6,80
9	55	1,3	1	60	N	21	5	0	7,93
10	55	1,5	0,8	68	N	39	5	0	8,62
11	55	1,5	0,9	82	N	18	4	0	6.00
12	55	1,5	1	75	N	17	4	0,09	4,15
13	60	1,1	0,8	65	N	4	4	0,06	5,73
14	60	1,3	0,8	67	Y	4	3	0,06	5,62
15	60	1,3	0,9	69	Y	5	3	0,04	5,91
16	60	1,3	1	67	Ν	20	3	0,22	2,71
17	60	1,5	0,8	72	N	x	x	x	X
18	60	1,5	0,9	57	N	7	4	0,05	7,36
19	60	1,5	1	73	N	7	4	0,07	4,39

Tabla 6: series de tiempo de los 19 experimentos, con sus correspondientes valores de parámetros de operación y medidas de caos. Las líneas en gris indican las series de tiempo con indicadores de posible caos.

Cuando se trabaja con series de tiempo reales, es importante realizar una inspección visual de su comportamiento para detectar posibles saltos abruptos en los datos. En el caso de las medidas de voltaje de las PEMFC, se observaron saltos en varios experimentos debido a la activación del sistema de protección de la pila de combustible. En particular, los experimentos *6, 14 y 15* mostraron este comportamiento, por lo que se descartaron para continuar con el proceso de modelado.



Figura 15: Series de tiempo del voltaje de los experimentos 3 y 8, (a) y (b) respectivamente.

Por tanto, se decidió centrar el análisis y modelado en las series de tiempo correspondientes a los experimentos $N_{Test}=3$ y 8 debido a que presentan resultados más prometedores en términos de contenido caótico. No obstante, se realizaron cálculos y pruebas para todas las 19 series de tiempo para fines comparativos y explicativos. La Figura 16 muestra las dos densidades espectrales de potencia de los experimentos 3 y 8, estos tienen un rango de frecuencias alrededor de los 200 Hz y una amplitud que decrece continuamente a medida que aumenta la frecuencia, lo cual es una buena señal inicial de contenido caótico en las series de tiempo. Sin embargo, para $N_{Test}=3$, se observan dos picos, uno cerca de 0 y otro alrededor de los 180 Hz, que sugieren dos tipos de contaminación: una señal periódica y ruido de media a alta frecuencia. Estas fuentes de contaminación pueden ocultar el contenido caótico de la serie de tiempo. En el caso de $N_{Test}=8$, solo se aprecia el pico de frecuencia cercano a 0.



Figura 16: Densidad espectral de potencia del voltaje de las series de tiempo 3 y 8, (a) y (b) respectivamente.



Figura 17: Vecinos más cercanos falsos, FNN, para las dos series de tiempo de experimentos $N_{Test} = 3 y 8$.

Para las series de tiempo correspondientes a los experimentos $N_{Test}=3$ y 8, se ha observado la presencia de tendencias lineales que necesitan ser eliminadas. Con el objetivo de hacerlo, se han aplicado los procesos de filtrado mencionados previamente. Dado que los procesos de filtrado son lineales, pueden ser aplicados en cualquier orden y arrojar los mismos resultados, a excepción de pequeñas variaciones en la precisión numérica, como se puede ver en la Tabla 7. En esta tabla se presentan los resultados de las medidas no lineales para las series de tiempo de los experimentos $N_{Test}=3$ y 8, antes y después de los procesos de eliminación de la tendencia y el filtrado del ruido de alta frecuencia. La Figura 18 muestra las series de tiempo correspondientes a los experimentos 3 y 8 después de aplicar dichos procesos. Si se comparan las Figuras 15 y 18, se pueden observar

algunos cambios, como la suavización de las curvas. Sin embargo, es importante tener en cuenta que estos cambios pueden tener implicaciones en cuanto a la captura y modelado del potencial contenido caótico de las series de tiempo.



Figura 18: Series de tiempo correspondientes a los experimentos $N_{Test}=3$ y 8, (a) y (b) respectivamente, tras los procesos de remoción de tendencia y filtrado, baja y alta frecuencia.

Tabla	7: Medidas	de caos a	de las dos	series de	e tiempo	correspondient	es a los ex	perimentos l	$V_{Test}=3y8$,	antes y
despu	és de los pro	ocesos de	quitar ter	idencia y	, filtrado	indicados.				

	Serie o	es de tio riginal	empo es	Serie	es de tio filtrada	de tiempo ltradas		Series de tiempo sin tendencia y filtradas			Series de tiempo filtradas y sin tendencia		
N _{Test}	τ	Lyap	CD	τ	Lyap	CD	τ	Lyap	CD	τ	Lyap	CD	
3	4	0.09	6.51	4	0.13	7.54	4	0.11	7.80	4	0.11	7.75	
8	8	0.10	6.80	10	0.13	5.97	9	0.12	7.03	9	0.12	6.77	

Modelado de las series de tiempo del voltaje de las PEMFC que presentan comportamiento caótico.

Para el modelado de las series de tiempo correspondientes a los experimentos $N_{Test}=3$ y 8, se aplica el proceso de modelado para varios valores de τ_r , dado que este es un valor de prescripción para el que no existe todavía una forma de saber cuál es el valor óptimo, como se mostró anteriormente cuando se reconstruyó el modelo de Lorenz a partir de una serie de tiempo, entonces se utilizó inicialmente el rango $1 \le \tau_r \le 100$, sin resultados favorables, luego se amplió el rango de búsqueda a $1 \le \tau_r \le 200$, obteniendo resultados favorables en los casos de $\tau_r=120$ para $N_{Test}=3$ y $\tau_r=113$ para $N_{Test}=8$. Entendiendo como resultados favorables los casos en los que se evidenció la presencia de un atractor en el espacio de fase. Con los mismos valores de τ_r se aplicó el proceso de modelado a las series de tiempo después del proceso de filtrado y remoción de tendencia, donde también se obtuvieron resultados favorables, parecidos a los obtenidos para las series originales, como se puede ver en la Tabla 8, donde se muestran las medidas de caos para los casos de las series de tiempo originales, filtradas y/o sin tendencia.

Para el modelado de las series de tiempo correspondientes a los experimentos $N_{Test}=3$ y 8, se aplicó el proceso de modelado para varios valores de τ_r , ya que no existe un valor óptimo prescrito para este parámetro. En un principio, se probó un rango de $1 \le \tau_r \le 100$, pero no se obtuvieron resultados favorables. Posteriormente, se amplió el rango de búsqueda a $1 \le \tau_r \le 200$, lo que permitió encontrar valores de τ_r que resultaron en la presencia de un atractor en el espacio de fase. Concretamente, se encontró que $\tau_r=120$ para $N_{Test}=3$ y $\tau_r=113$ para $N_{Test}=8$, produjeron resultados favorables. Cabe destacar que se consideró como resultados favorables aquellos en los que se evidenció la presencia de un atractor en el espacio de fase.

Se aplicó el proceso de modelado con los mismos valores de τ_r a las series de tiempo después del proceso de filtrado y remoción de tendencia, obteniéndose resultados favorables similares a los obtenidos para las series originales. La Tabla 8 muestra las medidas de caos para los casos de las series de tiempo originales, filtradas y/o sin tendencia.

	Seri	es de tier originales	npo S	Seri	es de tie filtradas	тро	Series tende	s de tiem ncia y fil	po sin tradas	Seri filtrada	es de tie s y sin te	mpo ndencia
N _{Test}	τ	Lyap	CD	τ	Lyap	CD	τ	Lyap	CD	τ	Lyap	CD
3	23	0.30	2.38	5	0.21	2.52	5	0.19	2.14	5	0.18	2.14
8	25	0.22	2.05	10	0.30	2.60	8	0.23	2.40	8	0.23	2.42

Tabla 8: Medidas de caos τ , Lyap y CD de la variable x obtenidas por integración numérica de los modelos dinámicos que se forman a partir de los experimentos $N_{Test}=3$ y 8, y sus respectivas series de tiempo filtadas y/o sin tendencia.

La Tabla 8 muestra que los valores del máximo exponente de Lyapunov son positivos, lo que indica una sensibilidad a las condiciones iniciales, un rasgo distintivo del caos. Las estimaciones de la dimensión de correlación están claramente en el rango fractal entre 2 y 3, lo que indica la presencia de un atractor caótico. Las medidas de caos de los modelos obtenidos después de filtrar para reducir las tendencias (contaminación de baja frecuencia) y el ruido blanco (contaminación de alta frecuencia) no difieren significativamente de las medidas de caos de los modelos obtenidos a partir de las series de tiempo originales, independientemente del orden de aplicación de los procesos de filtrado. Este resultado es similar al que se mostró anteriormente en la reconstrucción del sistema de Lorenz a partir de una serie de tiempo contaminada con ruido de amplitud del 1%, donde se obtuvo un atractor al aplicar el método a la serie de tiempo sin la necesidad de filtrarla. Por lo tanto, en adelante solo se presentarán los resultados obtenidos con la serie de tiempo original.

El proceso de reconstrucción arroja como resultado los 30 coeficientes del modelo, tal como se ilustró con el sistema de Lorenz. En las Tablas 9 y 10 se presentan los 30 coeficientes correspondientes a los modelos obtenidos a partir de las series de tiempo $N_{Test}=3$ y $N_{Test}=8$, respectivamente, utilizando tiempos de retardo de $\tau_r = 120$ y $\tau_r = 113$.

	с	x	у	Z	x^2	xy	xz	y^2	yz	z^2
ż	12,99	-8,95	0,71	-2,17	0,59	2,27	0,12	-1	-0,56	0,66
ý	14,07	5,12	-10,25	-6,13	-1,99	0,5	1,43	0,55	2,51	-0,73
ż	-13,01	0,41	10,24	-0,12	0,29	-0,4	-0,35	-2	0,27	0,06

Tabla 9: Coeficientes del sistema dinámico no lineal autónomo 3D obtenidos de la serie de tiempo correspondiente al experimento N_{Test} =3, utilizando un tiempo de retardo τ_r = 120.

Tabla 10: Coeficientes del sistema dinámico no lineal autónomo 3D obtenidos de la serie de tiempo correspondiente al experimento N_{Test} =8, utilizando un tiempo de retardo τ_r = 113.

	с	x	у	Z	x^2	xy	xz	y^2	yz	z^2
ż	-3.53	9.54	5.18	-12.23	0.31	-3.67	-0.34	0.95	-0.07	2.37
ÿ	-1.13	-16.41	8.61	8.65	2.87	-0.08	0.15	0.5	-3.98	0.39
ż	2.94	9.37	-12.49	1.06	0.06	-0.57	-2.87	2.56	-0.12	1.3

La Figura 19 ilustra los atractores obtenidos a partir de la integración de los modelos representados en la Tabla 9 y la Tabla 10, mediante el método de Runge-Kutta con un paso h=0.01 y N=10000 iteraciones. Estos atractores sugieren que el comportamiento de la PEMFC se encuentra limitado dentro de los confines del espacio de fase definidos por su atractor. En términos de control, estos resultados sugieren que la celda podría adquirir una alta estabilidad y robustez ante perturbaciones y mantenerse en las condiciones de operación $N_{Test}=3$ y/o $N_{Test}=8$.



Figura 19: Atractores obtenidos de la integración de los modelos presentados en las tablas 3 (a) y 4 (b). La integración numérica de los modelos correspondientes se realizó mediante el método de Runge-Kutta con pasos h=0.01 y N=10000 iteraciones.

Capítulo 5. Producción

En esta sección se presentan los resultados de una investigación exhaustiva, que incluyen artículos científicos de alto impacto y una patente, centrados en el estudio de sistemas caóticos y celdas de combustible. Estos trabajos reflejan los avances y la innovación alcanzados durante el proceso de investigación en ambas áreas.

Productos

Clase de Producto	Título	Medio de publicación	Clasificación	Fecha	Estado
Artículo de Congreso	Modelos no lineales con soluciones caóticas de variables dinámicas de celdas de combustible	Memorias, XI Congreso Colombiano de Métodos Numéricos		17-12- 2018	Publicado
Pasantía	Pasantía de Investigación en el Fuel Cell Laboratory (FCLAB), Belfort - Francia			4/09-30/11 de 2019	Realizada
Artículo de Congreso	Searching for deterministic chaos in fuel cell voltage variability	International Journal of Industrial Electronics and Electrical Engineering IJIEEE		Diciembre 2020	Publicado
Artículo de Revista	Software to building dynamical systems models from time series with chaotic behavior	International Journal of Physics: Conference Series	Q3	Marzo 2021	Publicado
Artículo de Revista	On the reconstruction of a chaotic dynamical system from a time series	DYNA	Q3		Revisión
Artículo de Revista	Nonlinear models of the chaotic behaviour in fuel cells voltage	Journal of Power Sources	Q1		Revisión
Patente de Invención	Método y sistema para el diagnóstico y control de celdas de combustible controlando el caos	Superintendencia de Industria y Comercio - Colombia		31/07/2019 - 31/07/2039	Concedida

determinista de s variables dinámicas	sus		

Participación en proyectos de investigación

Nombre del proyecto	Entidad	Año	Valor (Especie y contrapartida)
Sistemas DinámicosMNo Lineales a PartirTode Series de TiempoInpara el Análisis yCoControl de Pilas dedoCombustibleIn	Ainisterio de Ciencia, Fecnología e nnovación: Convocatoria 727, loctorados nacionales	2016	\$50'000.000

Capítulo 6. Conclusiones

Se ha demostrado que el procedimiento presentado en este trabajo tiene un gran potencial para aplicarse en series de tiempo reales, lo que permite su uso en la modelización y predicción de sistemas caóticos, en los que solo se puede medir un observable. En este estudio, se aplicó este método a las series de tiempo del voltaje medido de las PEMFC. Con el análisis cualitativo, cuantitativo y el modelado de las series de tiempo experimentales de las PEMFC se demostró que existe un importante potencial de caos determinista en las series de tiempo del voltaje de las PEMFC para condiciones de operación especificas. Los modelos dinámicos desarrollados con este proceso podrían proporcionar una nueva forma de controlar las PEMFC, aprovechando el hecho de que un sistema caótico tiende a mantener su funcionamiento dentro de un atractor. Permitiendo la cantidad de actuadores necesarios para su correcto funcionamiento, aumentando la cantidad de energía aprovechable y de este modo mejorando su estabilidad, durabilidad y eficiencia. Este procedimiento ha sido patentado debido a su aplicabilidad industrial, inventividad y novedad.

Utilizando el sistema de Lorenz se demostró la pertinencia que tiene procedimiento propuesto para ser aplicado a series de tiempo con contenido caótico. Debido a que se logró recuperar la dinámica caótica del modelo con precisión cualitativa, aunque pueden existir imprecisiones cuantitativas, en los coeficientes, debido al ruido en las series de tiempo originales y al ruido introducido por el proceso de reconstrucción. Las medidas de caos obtenidas son similares a las del sistema de Lorenz. Esto es un indicador de que el procedimiento propuesto es efectivo para caracterizar y modelar sistemas caóticos a partir de series de tiempo.

Por otro lado se logró evidenciar que el valor de τ obtenido a partir de la información mutua, sirve como guía para calcular las medidas de caos la densidad espectral de potencia, los falsos vecinos cercanos, el máximo exponente de Lyapunov y la dimensión de correlación. Sin embargo, se observó que este valor no es el más apropiado para el proceso de modelado, para este proceso el valor de τ puede depender de características propias de cada serie de tiempo. La ventaja del procedimiento, implementado en CMRTS, es su rapidez para obtener resultados, lo que permite probar varios valores de manera eficiente y encontrar el τ más apropiado para la construcción de los modelos. No obstante, sería deseable contar con un método que permita alcanzar un rango de τ más preciso para el modelado, evitando depender de ensayo y error. El uso de filtros apropiados permitió recuperar la información con mayor precisión, reduciendo la diferencia entre los coeficientes originales del sistema de Lorenz y los obtenidos con la reconstrucción. Esto sugiere que la herramienta de reconstrucción de modelos a partir de series de tiempo puede ser aplicada a series de tiempo reales con cierto grado de confianza en los resultados obtenidos.

Se aplicó el procedimiento a las series de tiempo del voltaje de las PEMFC, demostrando que las PEMFC muestran un comportamiento caótico para ciertas condiciones de operación; además, este comportamiento se puede modelar. El comportamiento caótico en sistemas dinámicos complejos es robusto debido a su tendencia a mantener la trayectoria del sistema confinada dentro de un atractor durante largos períodos de tiempo, resistente a perturbaciones externas fuertes y persistentes. Esta característica puede ser aprovechada para controlar las PEMFC a través de los parámetros operativos y lograr estabilidad dinámica sin la necesidad de control externo adicional. Aunque se ha demostrado el potencial de este enfoque, es necesario seguir mejorando los modelos dinámicos no lineales para considerar la sensibilidad de los parámetros operativos y permitir una mayor precisión en la predicción del comportamiento de las PEMFC.

Tanto el procedimiento como el software CMRTS desarrollados en este trabajo son genéricos y se pueden aplicar a diversos sistemas dinámicos complejos. Esto abre nuevas posibilidades para el modelado y control, no sólo de las PEMFC, sino de cualquier sistema con comportamiento caótico, a través de la reconstrucción de modelos dinámicos a partir de un solo observable.

Bibliografía

- Abarbanel, H. (1996). Analysis of observed chaotic data. In *Physics Today* (Vol. 39). https://doi.org/10.2307/1271140
- Abdelkareem, M. A., Elsaid, K., Wilberforce, T., Kamil, M., Sayed, E. T., & Olabi, A. (2021). Environmental aspects of fuel cells: {A} review. *Science of The Total Environment*, 752, 141803. https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2020.141803
- Barbir, F. (2013). {PEM} fuel cells: theory and practice (2nd ed). Elsevier/Academic Press.
- Benchouia, N. E., Derghal, A., Mahmah, B., Madi, B., Khochemane, L., & Hadjadj Aoul, E. (2015). An adaptive fuzzy logic controller (AFLC) for PEMFC fuel cell. *International Journal of Hydrogen Energy*, 40(39), 13806–13819. https://doi.org/10.1016/J.IJHYDENE.2015.05.189
- Bressel, M., Ould Bouamama, B., Hissel, D., & Hilairet, M. (2015). A {Review} on {Graphical} {Methods} for {Modeling} a {Proton} {Exchange} {Membrane} {Fuel} {Cell}. Journal of Fuel Cell Science and Technology, 12(6), 60801. https://doi.org/10.1115/1.4032336
- Brown, R., Rulkov, N. F., & Tracy, E. R. (1994). Modeling and synchronizing chaotic systems from time-series data. In *Physical Review E* (Vol. 49, Issue 5, pp. 3784–3800). https://doi.org/10.1103/PhysRevE.49.3784
- Burkholder, M. B. (2015). Nonlinear Analysis, Control, and Modeling of the Two-Phase Flow Dynamics in Polymer Electrolyte Fuel Cells.
- Burkholder, M. B., Siefert, N. S., & Litster, S. (2014). Nonlinear analysis of voltage dynamics in a polymer electrolyte fuel cell due to two-phase channel flow. *Journal of Power Sources*, 267, 243–254. https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2014.04.156
- Cruz, J. L., Gutiérrez, R. M., & Pastrán, C. G. (2021). Software to build dynamical systems models from time series with chaotic behavior. *Journal of Physics: Conference Series*, 1938(1). https://doi.org/10.1088/1742-6596/1938/1/012023
- Fan, Z., Dong, S., Chi, J., Zhuang, X., & Mastorakis, N. E. (2018). A fast algorithm of correlation dimension estimation for nonlinear time series. *Proceedings - 2018 2nd European Conference* on Electrical Engineering and Computer Science, EECS 2018, 595–597. https://doi.org/10.1109/EECS.2018.00115
- Faust, G., Argyris, J., Faust, G., Haase, M., & Friedrich, R. (2015). *An Exploration of Dynamical Systems and Chaos*.
- Gutiérrez, R. M. (2004). Optimal nonlinear models from empirical time series: An application to climate. *International Journal of Bifurcation and Chaos in Applied Sciences and Engineering*, 14(6), 2041–2052. https://doi.org/10.1142/S0218127404010400

- Harrag, A., & Messalti, S. (2018). How fuzzy logic can improve PEM fuel cell MPPT performances? *International Journal of Hydrogen Energy*, *43*(1), 537–550. https://doi.org/10.1016/J.IJHYDENE.2017.04.093
- Hateley, J. (n.d.). The Lorenz system. 1-25.
- Hegger, R., Kantz, H., & Schreiber, T. (1999). Practical implementation of nonlinear time series methods: The TISEAN package. *Chaos*, 9(2), 413–435. https://doi.org/10.1063/1.166424

Herrera Vega, D., Marx, N., Boulon, L., & Hernandez, A. (2014). Maximum efficiency point tracking for hydrogen fuel cells. 2014 IEEE 27th Canadian Conference on Electrical and Computer Engineering (CCECE), 1–6. https://doi.org/10.1109/CCECE.2014.6900909

Ibrahim, M., Antoni, U., Steiner, N. Y., Jemei, S., Kokonendji, C., Ludwig, B., Moçotéguy, P., & Hissel, D. (2015). Signal-Based Diagnostics by Wavelet Transform for Proton Exchange Membrane Fuel Cell. *Energy Procedia*, 74, 1508–1516.56...

https://doi.org/10.1016/J.EGYPRO.2015.07.708

- Ibrahim, M., Steiner, N. Y., Jemei, S., & Hissel, D. (2016). Wavelet-Based Approach for Online Fuel Cell Remaining Useful Lifetime Prediction. *IEEE Transactions on Industrial Electronics*, 63(8), 5057–5068. https://doi.org/10.1109/TIE.2016.2547358
- Kantz, H., & Schreiber, T. (2004). Nonlinear Time Series Analysis. In *Cambridge University Press* (p. 388). https://doi.org/10.1007/s13398-014-0173-7.2
- Li, H. (2008). Spectral Analysis of Signals [Book Review]. In *IEEE Signal Processing Magazine* (Vol. 24, Issue 1). https://doi.org/10.1109/msp.2007.273066
- Lorenz, E. N. (1963). Deterministic Nonperiodic Flow. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 20(2), 130–141. https://doi.org/10.1175/1520-0469(1963)020<0130:DNF>2.0.CO;2
- Mane, R. (1980). On the dimension of the compact invariant sets of certain non-linear maps. *Lecture Notes in Mathematics*, *898*, 230–242.
- Munmuangsaen, B., & Srisuchinwong, B. (2018). A hidden chaotic attractor in the classical Lorenz system. *Chaos, Solitons and Fractals*, 107, 61–66. https://doi.org/10.1016/j.chaos.2017.12.017
- Musio, F., Tacchi, F., Omati, L., Gallo Stampino, P., Dotelli, G., Limonta, S., Brivio, D., & Grassini, P. (2011). PEMFC system simulation in MATLAB-Simulink® environment. *International Journal of Hydrogen Energy*, 36(13), 8045–8052. https://doi.org/10.1016/J.IJHYDENE.2011.01.093
- Orvay, F. C., Palanca, M. T. M., & Alcaide, A. S. (2012). Adams methods: implementation as predictor-corrector methods. *Far East Journal of Applied Mathematics*, *66*(2), 93–105.
- Peighambardoust, S. J., Rowshanzamir, S., & Amjadi, M. (2010a). Review of the proton exchange membranes for fuel cell applications. In *International Journal of Hydrogen Energy* (Vol. 35, Issue 17). Elsevier Ltd. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2010.05.017

- Peighambardoust, S. J., Rowshanzamir, S., & Amjadi, M. (2010b). Review of the proton exchange membranes for fuel cell applications. In *International Journal of Hydrogen Energy* (Vol. 35, Issue 17). Elsevier Ltd. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2010.05.017
- Pereira, D. F., Lopes, F. C., & Watanabe, E. H. (2017). Prediction of PEMFC stack efficiency using recurrent neural networks. *IEEE International Symposium on Industrial Electronics*, 1017– 1022. https://doi.org/10.1109/ISIE.2017.8001385
- Petrone, R., Zheng, Z., Hissel, D., Péra, M. C., Pianese, C., Sorrentino, M., Becherif, M., & Yousfi-Steiner, N. (2013). A review on model-based diagnosis methodologies for {PEMFCs}. *International Journal of Hydrogen Energy*, 38(17), 7077–7091. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2013.03.106
- Pinsky, T. (2017). On the topology of the Lorenz system. Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 473(2205), 20170374. https://doi.org/10.1098/rspa.2017.0374
- Poole, D. (2011). Álgebra lineal: Una introducción moderna (C. Learning (ed.); 3rd ed.).
- Qin, F., Liu, P., Niu, H., Song, H., & Yousefi, N. (2020). Parameter estimation of PEMFC based on Improved Fluid Search Optimization Algorithm1-..0324339 https://doi.org/10.1016/j.egyr.2020.05.006
- Ramdani, S., Casties, J. F., Bouchara, F., & Mottet, D. (2006). Effect of noise on the averaged false neighbors method applied to simulated and experimental chaotic times series. *IFAC Proceedings Volumes (IFAC-PapersOnline)*, 1(PART 1), 286–290. https://doi.org/10.3182/20060628-3-fr-3903.00050
- Rhodes, C., & Morari, M. (1997). False-nearest-neighbors algorithm and noise-corrupted time series. *Physical Review E*, 55(5), 6162–6170. https://doi.org/10.1103/PhysRevE.55.6162
- Robinson, J. C. (1998). All possible chaotic dynamics can be approximated in three dimensions. *Nonlinearity*, 11(3), 529–545. https://doi.org/10.1088/0951-7715/11/3/007
- Sinha, V., & Mondal, S. (2018). Recent development on performance modelling and fault diagnosis of fuel cell systems. *International Journal of Dynamics and Control*, 6(2), 511–528. https://doi.org/10.1007/s40435-017-0328-4
- Sprott, J. C. (2003). Chaos and Time-Series Analysis.
- Takens, F. (1981). Detecting strange attractors in turbulence. Dynamical Systems and Turbulence, Warwick 1980, 898, 366–381. https://doi.org/10.1007/bfb0091924
- Vozikis, C., Kleidis, K., & Papaioannou, S. (2018). The power spectrum indicator: A new, efficient method for the early detection of chaos. ArXiv, 1–15.
- Wallot, S., & Mønster, D. (2018). Calculation of Average Mutual Information (AMI) and falsenearest neighbors (FNN) for the estimation of embedding parameters of multidimensional time series in matlab. *Frontiers in Psychology*, 9(SEP), 1–10. https://doi.org/10.3389/fpsyg.2018.01679

Wang, X. R., Ma, Y., Gao, J., Li, T., Jiang, G. Z., & Sun, Z. Y. (2021). Review on water management methods for proton exchange membrane fuel cells. *International Journal of Hydrogen Energy*, 46(22), 12206–12229. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.06.211

Wilkinson, A. (2017). What Are Lyapunov Exponents ,. Bull. Amer. Math. Soc, 54(1), 79-105.

- Wolf, A., Swift, J. B., Swinney, H. L., & Vastano, J. A. (1985). Determining Lyapunov exponents from a time series. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 16(3), 285–317. https://doi.org/10.1016/0167-2789(85)90011-9
- Yuan, Z., Wang, W., Wang, H., & Ashourian, M. (2020). Parameter identification of PEMFC based on {Convolutional} neural network optimized by balanced deer hunting optimization algorithm. *Energy Reports*, 6, 1572–1580. https://doi.org/10.1016/j.egyr.2020.06.011
- Zhang, J., Zhang, H., Wu, J., & Zhang, J. (2013). PEM Fuel Cell Fundamentals. In *Pem Fuel Cell Testing and Diagnosis*. https://doi.org/10.1016/b978-0-444-53688-4.00001-2
- Zheng, Z., Petrone, R., Péra, M. C., Hissel, D., Becherif, M., Pianese, C., Yousfi Steiner, N., & Sorrentino, M. (2013). A review on non-model based diagnosis methodologies for PEM fuel cell stacks and systems. In *International Journal of Hydrogen Energy*. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2013.04.007
- Ziogou, C., Papadopoulou, S., Georgiadis, M. C., & Voutetakis, S. (2013). On-line nonlinear model predictive control of a PEM fuel cell system. Journal of Process Control. https://doi.org/10.1016/j.jprocont.2013.01.011