



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL  
ESTADO DE QUINTANA ROO

DIVISIÓN DE CIENCIAS, INGENIERÍA Y TECNOLOGÍA

---

TÍTULO

PROMEDIO LOCAL DEL POTENCIAL ELÉCTRICO PARA DETERMINAR  
LA CONDUCTIVIDAD EFECTIVA DE UN MATERIAL HETEROGÉNEO  
ESTOCÁSTICO

---

TESIS

PARA OBTENER EL GRADO DE  
LICENCIADO EN INGENIERÍA EN SISTEMAS DE ENERGÍA  
PRESENTA

**RAFAEL DE JESÚS ALARCÓN POOT**

DIRECTOR DE TESIS

**DR. GLISERIO ROMELI BARBOSA POOL**

ASESORES

**DR. ABIMAEEL RODRÍGUEZ SÁNCHEZ**

**DR. JAIME SILVERIO ORTEGÓN AGUILAR**

**DRA. BEATRIZ ESCOBAR MORALES**

**DR. VICTOR MANUEL SÁNCHEZ HUERTA**



CHETUMAL QUINTANA ROO, MÉXICO, JUNIO DE  
2022.



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL  
ESTADO DE QUINTANA ROO

DIVISIÓN DE CIENCIAS, INGENIERÍA Y TECNOLOGÍA

TRABAJO DE TESIS TITULADO

"PROMEDIO LOCAL DEL POTENCIAL ELÉCTRICO PARA DETERMINAR LA CONDUCTIVIDAD  
EFECTIVA DE UN MATERIAL HETEROGÉNEO ESTOCÁSTICO"

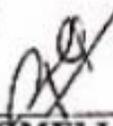
ELABORADO POR  
RAFAEL DE JESÚS ALARCÓN POOT

BAJO SUPERVISIÓN DEL COMITÉ DE ASESORÍA Y APROBADO COMO  
REQUISITO PARCIAL PARA OBTENER EL GRADO DE:

LICENCIADO EN INGENIERÍA EN SISTEMAS DE ENERGÍA

COMITÉ DE  
TESIS

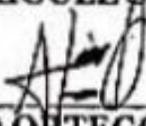
DIRECTOR:

  
DR. GLISERIO ROMELI BARBOSA POOL

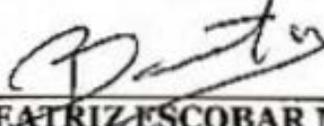
ASESOR:

  
DR. ABIMAEEL RODRIGUEZ SANCHEZ

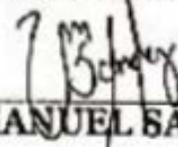
ASESOR:

  
DR. JAIME SILVERIO ORTEGÓN AGUIRRE

ASESORA:

  
DRA. BEATRIZ ESCOBAR MORALES

ASESOR:

  
DR. VICTOR MANUEL SANCHEZ HUERTA



*“La más hechizante experiencia en este planeta es la del enigma: aquella emoción fundamental, la cuna de toda ciencia y de todo arte auténtico. Aquel que no la conoce, aquel que es ya incapaz de imaginar, no logra sentir sorpresa por nada y es, a juicio propio, igual que un cadáver o una llama apagada”*

*(Albert Einstein)*

*A Zelda, Landy, Rafael y Ariadne.*

*A la memoria de Medalia.*

## **AGRADECIMIENTOS**

### ***A MIS ASESORES DE TESIS***

Reconozco a mi director de tesis, el Dr. Romeli Barbosa y a mi asesora la Dra. Beatriz Escobar Morales por su apoyo y valiosa colaboración además de sus consejos y gestiones durante la realización de este trabajo. Expreso también un agradecimiento afectuoso a mis asesores, Dr. Abimael Rodríguez, Dr. Jaime Ortigón y el doctor Víctor Sánchez por su colaboración en el presente documento.

### ***A LAS INSTITUCIONES QUE ME APOYARON***

A la Universidad de Quintana Roo (UQROO), por ser una institución de calidad con profesores con vocación y espíritu de enseñanza que me ha permitido desarrollar mis capacidades escolares y científicas. Al Centro de Investigación Científica de Yucatán (CICY), por permitirme desarrollar el proceso metodológico de este trabajo y apoyarme con infraestructura y económicamente. Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) por el apoyo económico que incentivó a que este trabajo de tesis sea posible.

### ***A MI FAMILIA***

A mis padres, Rafael y Landy por formarme con ética y valores, por ser esas personas que me motivan a cada día aspirar a más, por su apoyo incondicional, por ser el ejemplo de perseverancia y disciplina que me permite tener un rumbo en la vida y, sobre todo, por nunca abandonarme y brindarme todo su amor.

A mi hermosa familia conformada por mi novia Ariadne y mi hija Zelda que representan el principal motor que encamina mi vida y el motivo por el cual lucho día con día para ser una mejor persona, agradezco toda la confianza y amor incondicional que depositan en mí.

### ***A MIS COMPAÑEROS Y AMIGOS***

A mis compañeros y profesores que durante mi estadía en la universidad que me enseñaron el valor de la amistad y la solidaridad.

A Cristóbal, amigo incondicional que me enseñó algunas de las cosas me apoyaron a sobresalir tanto moral como académicamente.

A mis amigos y personas cercanas que siempre me brindaron palabras de motivación que radicarón en mi persona.

---



# Contenido

RESUMEN.....	1
NOMENCLATURA EMPLEADA.....	3
PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA.....	4
JUSTIFICACIÓN.....	5
OBJETIVOS.....	6
Objetivo general.....	6
Objetivos específicos.....	6
ESTRUCTURA DE LA TESIS.....	7
CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN.....	9
1.1 El hidrógeno.....	10
1.2 PEMFC.....	11
1.3 Estado del arte.....	12
CAPÍTULO 2. FUNDAMENTOS TEÓRICOS.....	15
2.1 Materiales heterogéneos.....	15
2.2 Materiales heterogéneos estocásticos.....	16
2.3 Reconstrucción estocástica.....	17
2.4 Binarización de imágenes digitales.....	19
2.5 Caracterización a partir de funciones de correlación.....	20
2.5.1 Función de correlación de dos puntos.....	21
2.5.2 Función de correlación de trayectoria lineal.....	22
2.5.3 Función de correlación por tamaño del poro.....	23
2.6 Determinación de coeficientes efectivos de transporte.....	23
2.6.1 Volúmenes de control finitos.....	27
2.7 Simulación y técnicas numéricas.....	35
CAPÍTULO 3. METODOLOGÍA.....	37
Algoritmo del proceso general.....	37
Generación de imágenes sintéticas del algoritmo de proceso general.....	53
CAPÍTULO 4. RESULTADOS.....	55
Análisis de imágenes sintéticas del algoritmo de proceso general.....	56
Obtención de la eficiencia general de transporte del algoritmo de proceso general.....	59
Conclusiones generales y discusión de los resultados.....	63
REFERENCIAS.....	66
ANEXO A: CÓDIGO GENERADO.....	69

ANEXO B: FRAGMENTO DE MALLA GENERADA. .... 72

ANEXO C: FRAGMENTO DE ARREGLO DE FLUJO DE CALOR POR NODO. .... 72

ANEXO D: FRAGMENTO DE DISTRIBUCIÓN DE TEMPERATURAS CON CONDICIONES DE FRONTERA (TOP)..... 73

ANEXO E: FUNCIONAMIENTO DEL ALGORITMO GENERADO EN INTERFAZ DE EJECUCIÓN DEL IDE. .... 73

ANEXO F: CONJUNTO DE IMÁGENES SINTÉTICAS OBTENIDAS DURANTE LAS DIVERSAS PRUEBAS. .... 74

## RESUMEN.

Se presenta un código de cómputo realizado para obtener la solución promedio del potencial local, en función del potencial global en la malla de volúmenes de control de un material heterogéneo estocástico. El algoritmo obtenido se ha realizado a partir del uso de la construcción para la interpretación abstracta realizada en el lenguaje C/C++ cuya principal intención es la de obtener un progreso en proceso de verificación de datos con la relación directa para el tipo de modelado aplicado a este trabajo de tesis y su facilidad de uso en el diseño de algoritmos de aplicación de métodos numéricos.

Los resultados muestran que para la determinación de un material heterogéneo estocástico es necesaria la utilización de una herramienta estadística que proporcione valores aleatorios que modelen el comportamiento de dicho material para analizar y predecir valores de su entorno en función de la microestructura. El desarrollo de esta investigación incide en desarrollo e implementación de métodos numéricos con la finalidad de validar el comportamiento de este tipo de modelado y con ello analizar de forma precisa coeficientes efectivos de transporte. Que tiene una variedad de diferentes aplicaciones en la rama de la ingeniería, por ejemplo: la relación de la temperatura, la conducción eléctrica, la transferencia de calor o su difusividad de masa y en las celdas de combustible (propósito general del presente trabajo de tesis).

El análisis computarizado consiste en la realización de la obtención de coeficientes efectivos de transporte de un material heterogéneo aleatorio. Posteriormente se aplican funciones de correlación correspondientes que funcionan como descriptores de microestructura. En el proceso de desorden se parte de la representación matricial de una imagen binaria que está compuesta de bandas de color negro (valor 1) y color blanco (valor 0), se realizan un millón, quinientas mil y trescientas mil iteraciones donde se reubican los elementos (píxeles) con el fin de mantener la fracción de superficie para obtener la misma imagen con diferente

arreglo entre sus pixeles. Durante el proceso de desorden se van recopilando datos y a cierto número de iteraciones se aplican las funciones de correlación de dos puntos (FS2) y de camino lineal (FLP) iterando renglón por renglón y columna por columna para el análisis en el eje "Y" y "X", respectivamente. El resultado más relevante es que el nuevo código propuesto fue validado con los resultados preliminares.

Una vez realizado el conjunto de muestras y pruebas en el análisis del algoritmo de procesamiento de información se requiere visualizar las imágenes sintéticas de las mallas desarrolladas en este, es por ello que se radica en la importancia de obtener los coeficientes efectivos de transporte basado en una eficiencia general para finalmente analizar un conjunto de pruebas que demuestren el comportamiento de las eficiencias a partir de los cambios en las condiciones de frontera de dicho material, finalmente se discutirán todos los resultados y el cómo se ha desarrollado dicha tesis de licenciatura.

## NOMENCLATURA EMPLEADA.

CET	Coeficiente Efectivo de Transporte.
PEM	Membrana de intercambio protónico ( <i>Proton Exchange Membrane</i> ).
PEMFC	Celda de combustible de membrana de intercambio protónico ( <i>Proton Exchange Membrane Fuel Cell</i> ).
MH	Material Heterogéneo.
MHA	Material Heterogéneo Aleatorio.
RE	Reconstrucción Estocástica.
REA	Reconstrucción Estocástica <i>Annealing</i> .
VC	Volumen de Control.
VCF	Volumen de Control Finito.
FC	Celda de combustible ( <i>Fuel Cell</i> ).
CL	Capa catalítica ( <i>Catalytic Layer</i> ).
FLP	Función de correlación de trayectoria lineal.
FS2	Función de correlación de dos puntos.
CC	Contador de Ciclos.
CET	Coeficiente Efectivo de Transporte.
CFD	Herramienta computacional de dinámica de fluidos ( <i>Computational Fluid Dynamics</i> ).
CL	Capa catalítica ( <i>Catalytic Layer</i> ).
DNS	Simulación numérica directa ( <i>Direct Numerical Simulation</i> ).
E	Potencial eléctrico.
FF	Combustible Fósil ( <i>Fossil Fuel</i> ).
SVE	Elemento de volumen estadístico ( <i>Stadistic Volume Element</i> ).
IDE	Entorno de desarrollo integrado ( <i>Integrated Development Environment</i> ).

## PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA.

Debido a la creciente demanda energética y lo finitos que pueden ser los procesos de generación de energía actuales (a partir de hidrocarburos) se presenta una problemática respecto a la intermitencia de las energías poco convencionales, esta problemática abre un campo de investigación y un mercado económico que beneficie tanto al medio ambiente como a la sociedad [1], por lo que, fuentes de energía menos tradicionales como lo es el hidrógeno proyecta un futuro más sostenible y con la capacidad de satisfacer la demanda actual y de generaciones futuras.

Por estos motivos, el hidrógeno es considerado como una fuente de generación de energía que presume un estudio amplio debido a que a partir de las celdas de combustible (FC, *Fuel Cell*) las cuales son, fundamentalmente, dispositivos que generan electricidad a partir de la combinación electroquímica del hidrógeno y del oxígeno sin la necesidad de realizar alguna combustión, es posible alcanzar avances científicos importantes en la generación de energía por métodos no convencionales. Además, es en este campo donde radica el análisis de las características físicas de las FC con un estudio general de volúmenes de control que incluye sus respectivas modificaciones de construcción y con características específicas que promueven su mejora.

El propósito general de un análisis de volúmenes de control y de los CET en un material heterogéneo estocásticos es el de realizar un modelo que contemple todas las características físicas de un material de esta naturaleza y se logren obtener mayor cantidad de estudios e información que fundamente futuras aplicaciones de innovación y análisis aplicado a las celdas de combustible.

## JUSTIFICACIÓN.

En lo que se refiere al uso de fuentes energéticas, los combustibles fósiles o las fuentes de energía convencionales producen un enorme impacto sobre el planeta en diferentes formas, incluyendo la seguridad y el aspecto ambiental. El hidrógeno es considerado como un combustible limpio, ya que en su proceso de combustión sólo genera agua. Por tanto, puede ser utilizado de diferentes maneras: como combustible no contaminante en los vehículos o como combustible doméstico. Siendo la obtención de energía sustentable una de las principales problemáticas, a nivel mundial, es de suma importancia encontrar sistemas sustentables para su obtención, una opción es la producción de hidrógeno.

Los materiales heterogéneos son de gran uso e importancia en muchos sectores, como lo son la industria aeronáutica, medica, de servicios, etcétera al igual de que son capaces de encontrarse de forma natural o ser modificados de forma artificial para su conveniencia, debido a la posibilidad de combinar las propiedades de diferentes materiales y ser utilizados de acuerdo con requerimientos específicos. Bajo un enfoque de necesidad los materiales heterogéneos estocásticos (que son materiales formados por elementos de diferente naturaleza y que básicamente no se pueden predecir) [1], es posible apreciar distintos tipos de ordenamiento de dos o más fases a nivel microestructural, donde se producen el transporte de masa y energía que tienen como resultado un efecto de utilidad como lo es una carga eléctrica, dichos efectos están en función de los coeficientes efectivos de transporte.

El presente trabajo de tesis tiene como finalidad contribuir a la investigación y optimización de las celdas de combustible de intercambio protónico (PEMFC) desarrollando un código computacional propio que a partir de parámetros matemáticos y estadísticos simulen la morfología microestructural de un material heterogéneo estocástico cuyo impacto fungirá en un conjunto de datos estadísticos que modelen el comportamiento de un MHA y proporcione datos del desarrollo y aplicaciones de las funciones de correlación en los coeficientes efectivos de transporte otorgando las bases teóricas para futuras aplicaciones prácticas. El resultado estará dado por la obtención de una eficiencia de conducción a partir de

los fenómenos de transporte obtenido con los promedios de conducción eléctrica ya que no existe un método analítico total que relacione todas las variables físicas que existen en la microestructura para determinar el comportamiento microscópico de una celda de combustible.

## OBJETIVOS.

### Objetivo general.

Desarrollar un algoritmo aplicando descriptores estadísticos para determinar coeficientes efectivos de transporte de un material heterogéneo estocástico, considerando la programación de comandos y funciones combinadas en lenguaje C++ y C de la solución de los promedios locales de conducción eléctrica en una malla de volúmenes de control.

### Objetivos específicos.

- Implementar un código computacional que caracterice la estructura bidimensional de un material heterogéneo estocástico.
- Determinar a partir de un proceso de simulación y modelado los principales coeficientes efectivos de transporte.
- Obtener un conjunto de imágenes sintéticas a partir de diferentes mallas obtenidas de las diferentes pruebas del uso del algoritmo realizado procesándolas en el software ImageJ.
- Realizar a partir de diversas funciones de correlación en algoritmos digitales la caracterización de los promedios de potencial eléctrico en función del orden de la estructura de un material heterogéneo aleatorio.

## ESTRUCTURA DE LA TESIS.

La estructura de la presente tesis está constituida por cuatro capítulos los cuales describen el estudio del promedio local del potencial eléctrico para determinar la conductividad efectiva de un material heterogéneo estocástico fundamentándose bajo el diseño de un programa el cual mediante caracterización y modelado permita obtener los coeficientes efectivos de transporte (CET) de dicho material, es entonces que el capítulo uno denominado como “Introducción” se presenta el panorama actual en términos energéticos en el mundo así como las alternativas energéticas a la creciente demanda del hidrógeno. Se incluye historia y estudios, para posteriormente abordar las celdas de combustible de membrana de intercambio protónico (PEMFC) y su relación directa con el estudio y modelado de los materiales heterogéneos aleatorios, posteriormente se seleccionaron trabajos bibliográficos en esta temática.

El capítulo dos hace referencia al marco teórico del presente trabajo de tesis iniciando por la descripción del material de estudio, así como las diversas fuentes en las que estos pueden ser encontrados o fabricados, seguidamente se mencionan las técnicas de modelado y binarización, así como los diferentes descriptores estadísticos por los cuales estos materiales pueden ser caracterizados y analizados. Finalmente se incluye información respecto a los volúmenes de control finitos que es el tema principal de esta investigación fundamentando así todas las ecuaciones y procesos que rigen el estudio de un sistema heterogéneo estocástico en diferentes campos de aplicaciones.

El capítulo tres describe el programa diseñado para la caracterización de las técnicas de volúmenes de control, este algoritmo ha sido escrito y ejecutado en el entorno de programación de C y C++, combinando atributos y funciones de ambos lenguajes por su utilización en muchas aplicaciones de este tipo. Entonces, este capítulo hace énfasis en como las ecuaciones mencionadas en el capítulo anterior tienden a ser aplicadas en un diseño del modelado de un material heterogéneo aleatorio a partir del planteamiento de condiciones de frontera previamente

determinadas para posteriormente describir cada uno de los componentes de este algoritmo, además de una sección donde se describen los pasos a seguir para la obtención de una imagen sintética generada a por la malla, la cual es resultado del proceso de simulación del algoritmo y que tiene como objetivo presentar visualmente el comportamiento del material como resultado de ciertas condiciones de frontera dados por el usuario.

El capítulo cuatro se presentan los resultados obtenidos de un conjunto de pruebas, donde la primera sección expone el cómo se muestran las imágenes sintéticas ya mostradas gráficamente y expuestas desde un punto de vista general desde cada una de las muestras principales y con mayor destacamento. La siguiente sección presenta los valores de eficiencia de transporte de cada una de las simulaciones que previamente expusieron sus imágenes virtuales, esto con el fin de analizar el comportamiento del algoritmo cambiando los valores de fase entre cada uno de ellos y que señale como los datos a partir de un determinado valor de procesamiento de información influyen en la eficiencia. Posteriormente, se realiza la discusión de los resultados y análisis del trabajo de tesis en un conjunto de conclusiones generales, desglosando un conjunto de argumentos que delimiten el alcance, los aprendizajes obtenidos, las situaciones de desarrollo y los resultados finales del presente trabajo de tesis.

Por último, se presenta una sección de referencias en donde se plantea toda la bibliografía y los anexos que hacen referencia principalmente al algoritmo generado con sus proyectos visuales y recursos extra para posteriores trabajos de investigación que referencien esta investigación. Por último, se presenta una sección de referencias en donde se plantea toda la bibliografía por la cual están sentadas las bases de este trabajo de tesis y los anexos que hacen referencia principalmente al algoritmo generado con sus proyectos visuales y recursos extra para posteriores trabajos de investigación que referencien al presente trabajo de tesis de licenciatura.

## CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN.

La humanidad ha estado evolucionando continuamente a partir del desarrollo de tecnologías que aumenten su calidad de vida, hoy en día uno de los principales retos está presente en el sector energético debido a que con el incremento constante y exponencial de la población mundial se ha registrado un crecimiento en la demanda energética con la finalidad de satisfacer las necesidades de todos los habitantes que lo requieran, cabe mencionar que la manera en la que se obtiene la energía no es la más óptima debido a que dicho recurso se obtiene, en su mayoría, a partir de combustibles fósiles en procesos térmicos (la quema de los mismos), lo cual resulta en la generación de otro tipo de conflictos tanto sociales, medioambientales y de salud; partiendo de esta premisa se buscan alternativas que sustituyan a los procesos de generación de energía convencionales al igual que sean de utilidad para disminuir los problemas previamente mencionados y con la garantía de obtener un futuro más sustentable [2].

Aunque existen algunas opciones energéticas sustentables que pueden emerger, una alternativa que cumple con las características de ser limpia y sustentable: es la utilización de hidrógeno como combustible. Agregando que este elemento posee un amplio campo de aplicaciones [3].

La energía es necesaria para mantener y aumentar los niveles de calidad de vida, desarrollo económico y competitividad en general de todos los países [6]. Dos de los grandes problemas de la actualidad es el hecho de que hay un incremento mundial de demanda energética y que las fuentes convencionales son finitas y además contaminantes. Este efecto en la demanda se da principalmente debido a que la población mundial aumenta y de que nuevos productos y servicios son incorporados a la sociedad. En este contexto, las principales fuentes de energía han sido los combustibles fósiles (FF) [4], debido a su disponibilidad y a que se tiene una infraestructura consolidada para su extracción, procesamiento y uso.

Los FF son el carbón mineral, petróleo y gas natural. Debido a que para utilizar sus propiedades energéticas de manera directa es necesario someterlos a

un proceso de combustión, su uso produce contaminación con material particulado y gases de efecto invernadero; durante décadas se han utilizado de manera masiva e indiscriminada lo que ha provocado altos niveles de contaminación ocasionando daños en la salud de las personas y en el medio ambiente [5], además del incremento de la temperatura global media del planeta [3]. Por otro lado, al tratarse de un recurso no renovable, la producción de este tipo de energético empezará a decaer en algún momento, lo que provocaría una crisis energética global [4]. Sin embargo, no es casualidad el auge de estos combustibles ya que poseen ciertos atributos que han permitido el desarrollo actual. En el sector eléctrico garantizan un suministro estable, seguro y constante de energía desde centrales de conversión tales como ciclo combinado, cogeneración y termoeléctricas en general. En el sector transporte garantizan su acceso mediante estaciones de carga y uso inmediato cuando es requerido mediante los motores de combustión interna.

### 1.1 El hidrógeno.

El hidrógeno fue descubierto por el científico británico Henry Cavendish, en 1776, quién informó de un experimento en el que había obtenido agua a partir de la combinación de oxígeno e hidrógeno, con la ayuda de una chispa eléctrica. Como estos elementos, no eran conocidos los denominó “aire sustentador de la vida” y “aire inflamable” respectivamente. El químico francés Antoine Laurent Lavoisier consiguió repetir con éxito el experimento en 1785 y dio el nombre de oxígeno al “aire sustentador de la vida” y el de hidrógeno al “aire inflamable”. El hidrógeno es un energético secundario y puede producirse por una gran variedad de métodos, cada uno de ellos se caracteriza por la fuente de energía primaria utilizada para obtenerlo.

El método de obtención del hidrógeno será una decisión crítica en la apuesta por un modelo energético sostenible [4]. Al igual que el autor Colleen Spieguel afirma que las celdas de combustible de hidrógeno pasarán a ser la principal fuente de energía en el futuro [5]. Con esto se ha obtenido que investigadores, empresas

del sector energético y de investigación, así como gobiernos dediquen recursos y esfuerzos al desarrollo de mejoras en la producción, almacenamiento, transporte y aplicación del hidrógeno como un combustible consolidado, de manera general, el desarrollo más eficiente con aplicaciones portátiles son las PEMFC [6].

## 1.2 PEMFC

Las PEMFC son denominadas así porque contienen un electrolito constituido por una membrana polimérica que separa la parte anódica y catódica de la celda. Se trata de un conductor protónico, que permite el paso a través de él de los iones de hidrógeno ( $H^+$ ), pero con la particularidad de ser impermeable al resto de las sustancias [4].

Básicamente, una CC está compuesta por tres zonas: un electrodo cargado negativamente (cátodo), un electrodo cargado positivamente (ánodo), y en medio la membrana electrolítica que separa físicamente los gases. El combustible, en este caso hidrógeno, es introducido por los canales mecanizados en la placa bipolar por el lado del ánodo y guiado a través de una capa difusora de material carbonoso hasta la capa catalítica, donde tiene lugar la reacción de oxidación del hidrógeno (ver en la ecuación 1.1). La capa difusora debe ser un material altamente poroso, de modo que facilite la difusión del hidrógeno para alcanzar más eficientemente las partículas del catalizador.

Los protones generados atraviesan la membrana polimérica de intercambio protónico, pero los electrones no pueden cruzarla, debido a que no es conductora electrónica y buscan la salida a través de un circuito alternativo: el formado por las capas difusoras (que al ser de un material carbonoso conducen la electricidad) y las placas, creando una corriente eléctrica disponible para la realización de un trabajo. Por la otra cara, el aire entra a través de los canales del cátodo, atraviesa la capa difusora y el oxígeno se combina en la capa catalítica con los protones que pasan a través de la membrana y los electrones del circuito exterior, generando agua y calor (ver en la ecuación 1.2). Estos dos subproductos son evacuados a través del

flujo de gases en el cátodo y, en el caso del calor, además por convección (natural o forzada) con el medio que rodea a la CC [4].

Básicamente las reacciones electroquímicas descritas previamente en las partes de una PEMFC se formulan de la siguiente manera:



El funcionamiento descrito previamente es posiblemente muy simplificado y, como es de esperar, pero en la práctica presenta muchas dificultades técnicas. El agua y el calor son actualmente los principales problemas que presentan estos dispositivos. Tanto un exceso como un defecto de agua o calor perjudican las propiedades de la membrana, afectando directamente el correcto funcionamiento de la CC. Debido a estas dificultades surge una nueva rama de investigación en las CC: las PEMFC de baja temperatura.

### 1.3 Estado del arte.

Como se ha mencionado, los materiales heterogéneos se pueden encontrar en todo entorno físico tanto de forma natural como artificial, ejemplos de esta clase de sistemas son, formaciones geológicas como suelos y rocas, materiales artificiales como filtros y cerámicas y formaciones biológicas como cartílagos y huesos. Un material heterogéneo estocástico es un medio poroso compuesto por una fase sólida y espacios vacíos denominados poros. La fase sólida denominada matriz o esqueleto porosos está formado por partículas y los poros están usualmente ocupados por uno o más fluidos. Los medios porosos son objeto de

estudio en diferentes áreas del conocimiento impulsando un crecimiento interdisciplinario ya sea teórico, experimental y computacional [6].

Con esto se ha realizado un gran número de trabajos e investigaciones para la formulación de métodos teóricos respecto a los materiales heterogéneos aleatorios. Los resultados de Jieqing Gan muestran que la conductividad térmica de un material se ve significativamente afectada por el tamaño de las partículas [7]. Akhgar y Toghraie investigaron respecto a la conductividad térmica de nanofluidos híbridos, ellos demostraron que el CET (coeficiente efectivo de transporte) tiene una relación lineal con el volumen sólido de fracción [8]. También, Ouyang ha desarrollado un polímero relleno de partículas compuestas que aumenta la conductividad térmica y las propiedades mecánicas del material [9,10], mientras que Liu y colaboradores han mejorado las propiedades mecánicas y disminuyó la conductividad térmica de las cerámicas de alúmina porosa [11].

Ahora bien, respecto al análisis numérico para la caracterización y modelado de un material heterogéneo estocástico en un sistema computacional se han elaborado un conjunto de trabajos que hacen clara referencia a lo que pretende esta investigación, ya que la reconstrucción tridimensional presenta un paradigma en relación con el esfuerzo computacional la cual direcciona a la obtención de resultados, es decir, la eficiencia del uso de los sistemas computacionales es mucho más compleja de conseguir debido a la numerosa información que se requiere procesar, es por ello que Coker y Torquato han realizado un análisis del efecto de la digitalización, a una resolución moderada, sobre la determinación de diversas magnitudes morfológicas para un modelo de medios digitalizados tridimensionales [12].

Barbosa y colaboradores, han realizado trabajos de reconstrucción estocástica y un método a escala para la determinación de los coeficientes efectivos de transporte en una PEMFC que básicamente propone una técnica para el escalado que permite determinar los coeficientes de transporte efectivos en dichas celdas de combustible lo cual permite una considerable reducción de recursos computacionales necesarios para el modelado y la simulación definiendo escalas a

partir de diferentes estructuras observables en escalas de magnitud de orden distinto [13], con un método alternativo de dicha reconstrucción que enfatiza la disponibilidad de la información de la capa catalítica (CL), por ende las estructuras que son reconstruidas de esta forma son caracterizadas por una función de correlación de dos puntos y una de la distribución del tamaño del poro, para finalmente caracterizar las estructuras obtenidas resultado del análisis anterior por medios estadísticos a partir de funciones de correlación, al igual que, los autores han realizado una investigación de la relación a multiescala de la eficiencia de conducción electrónica e iónica en un catalizador de PEMFC así como el efecto de la isotropía [14].

## CAPÍTULO 2. FUNDAMENTOS TEÓRICOS.

### 2.1 Materiales heterogéneos

Los materiales heterogéneos, como rocas y compuestos, están compuestos de varias fases de materiales de diferentes formas y tamaños los cuales están distribuidos aleatoriamente por el medio. Por lo tanto, se puede decir que un material heterogéneo es aquel que está compuesto de diferentes materiales (fases), como un solo compuesto, o del mismo material en diferentes estados, como un policristal. Es importante hacer énfasis respecto a la escala con la que se observan dichas propiedades. Ya que puede existir que en una escala “microscópica” de longitud mucho mayor a las dimensiones moleculares, no se puedan observar características mucho más pequeñas que las escalas tomadas, por lo que puedan ser no tomadas en cuenta o descartadas. Por lo que en estas circunstancias el material heterogéneo puede ser visto como continuo en la escala microscópica [15].

Existen diferentes materiales o elementos considerados como sistemas heterogéneos, tanto sintéticos como naturales, dentro de los sintéticos pueden considerarse: compuestos de fibras, compuestos de partículas, sólidos celulares, coloides, geles, espumas, concreto, etcétera; mientras que los naturales se pueden encontrar ejemplos como: policristales, suelos, arenisca, madera o huesos, por nombrar algunos [16].

La microestructura aleatoria puede ser descrita típicamente mediante el uso de un conjunto de descriptores estadísticos, que incluyen fracción de volumen, función de correlación de dos puntos y tortuosidad, solo por mencionar algunos. Al obtener diferentes características morfológicas, se proponen un gran número de descriptores estadísticos en diferentes campos de investigación, como la ciencia de los materiales, la geociencia y la ingeniería computacional [6, 7]. Es bien sabido que dichos descriptores estadísticos no son independientes uno con otro, pero hasta hace poco no estaba claro qué descriptores comparten más similitudes o diferencias. Es muy difícil buscar relaciones cuantificadas entre varios descriptores,

ya que a menudo están definidos en formatos muy diferentes. La falta de comprensión cuantificada de las relaciones de los descriptores puede causar incertidumbres o incluso errores sistemáticos en estudios de materiales heterogéneos [15].

## 2.2 Materiales heterogéneos estocásticos.

Un material heterogéneo encontrado en la naturaleza no está ordenado (por ordenado se refiere al material que cumpla con patrón definido de diseño a lo largo de su dominio), por lo que se puede decir que dicho material está desordenado debido a que contiene elementos de sus fases distribuidos de forma aleatoria en su estructuración, por lo tanto, estos son definidos como “materiales heterogéneos aleatorios (MHA) o “materiales heterogéneos estocásticos”.

Los materiales heterogéneos estocásticos son realmente comunes en los diferentes entornos en los que se analicen, ya que se pueden observar en las composiciones de geles, espumas, concretos, arenas, icebergs, maderas, partículas, entre otras formas ya sean artificiales o de forma natural [7,13].

En virtud del desarrollo de métodos efectivos y eficientes para generar modelos tridimensionales de la estructura de los materiales, debido a las dificultades en el análisis de la geometría y topología del espacio poroso, se intenta establecer un sistema estocástico de reconstrucción de la estructura de los materiales mediante un modelo metaheurístico. Por el interés que entran el avance para los sistemas de energía, para delimitar la complejidad del problema, la presente tesis se enfoca en concretos, suelos y electrodos para celdas de combustible.

Las propiedades macroscópicas de los MHA son afectadas por las propiedades físicas de las fases, las fracciones volumétricas de su composición y la estructura de los elementos que lo componen. Es decir, el coeficiente efectivo de transporte de un material heterogéneo estocástico debe caracterizar todo el dominio del material, considerando su estructura interna. El coeficiente efectivo de transporte se

convierte en un estudio de diseño [13], para un MHA consistente de n fase, la descripción de su CET en forma general está dada por la ecuación 2.1:

$$CET = f(p_1, p_2, \dots, p_n; \phi_1, \phi_2, \dots, \phi_n; \Omega) \quad 2.1.$$

Donde:

- CET es el coeficiente efectivo de transporte.
- p es la constante de proporcionalidad de la fase.
- $\phi$  indica la fracción volumétrica de la fase.
- $\Omega$  indica la información microestructural de todo el medio.

### 2.3 Reconstrucción estocástica.

La reconstrucción de microestructuras en 3D de un material heterogéneo aleatorio, a partir de fotomicrografías en 2D, es un trabajo que ha sido desarrollado extensamente en las últimas décadas. Estos métodos son comúnmente referidos como métodos de “reconstrucción estocástica”.

La microscopia de materiales es el primer eslabón en la cadena de procesos necesarios para la realización de la reconstrucción de materiales estocásticos, debido a ello, se considera como una de las herramientas más importantes al momento de estudiar materiales. A simple vista se puede obtener una percepción superficial de la estructura de un material, sin embargo, las propiedades y los detalles de la estructura atómica se aprecian exclusivamente en la morfología de este.

Gracias al avance tecnológico se han desarrollado nuevas técnicas dentro del análisis microscópico, tales técnicas de microscopia, como por ejemplo la técnica de sonda, han aumentado las posibilidades de llevar a cabo un análisis superficial más preciso de los materiales con resolución atómica. El análisis microscópico tiene como fin la obtención de precisión gracias a la capacidad aumentada de observación. Para lograr dicha capacidad es fundamental el estudio de imágenes

de materiales a mayor resolución espacial que la que percibe el ojo humano, mismas imágenes que sólo pueden ser obtenidas con instrumentos especializados conocidos como microscopios [17].

Uno de los primeros procedimientos desarrollados está basado en la aplicación de filtros de campos aleatorios Gaussianos. Este método es atribuido a Joshi en 1974 [16], posteriormente fue extendido por Quiblier en 1984. Este método de “filtros Gaussianos” es capaz de generar microestructuras aleatorias usando información estadística de “bajo-orden”, obtenida a partir de imágenes en segunda dimensión. Tres pasos principales son aplicados: la generación de campos Gaussianos, la transferencia del campo Gaussiano por un filtro lineal y transferencia por un filtro no lineal. Adler y colaboradores [17], utilizaron la transformada de Fourier en el segundo paso y condiciones de frontera periódicas para refinar y hacer este método más eficiente. Sin embargo, el método de filtros Gaussianos no puede incorporar eficientemente más información que la porosidad y la función de dos puntos, limitando con esto la reconstrucción verdadera, especialmente en medios porosos.

Un método mucho más flexible es el denominado “Reconstrucción Estocástica Annealing” (REA), el cual fue desarrollado por Hazlett en 1997 [18] y posteriormente extendido por muchos autores [19-21]. Este método es más eficiente que el anterior debido a que permite incluir una variedad de funciones estadísticas. Considerando la capacidad de la unidad de cómputo que procesa la información, las funciones más usadas para reconstruir de manera eficiente un espacio poroso, incluyen: porosidad, funciones de dos puntos y funciones de trayectoria lineal. Esta técnica está fundamentada en la generación computacional de una malla que caracteriza la microestructura real del medio heterogéneo, descrita matemáticamente por funciones estadísticas referidas como “funciones de correlación”.

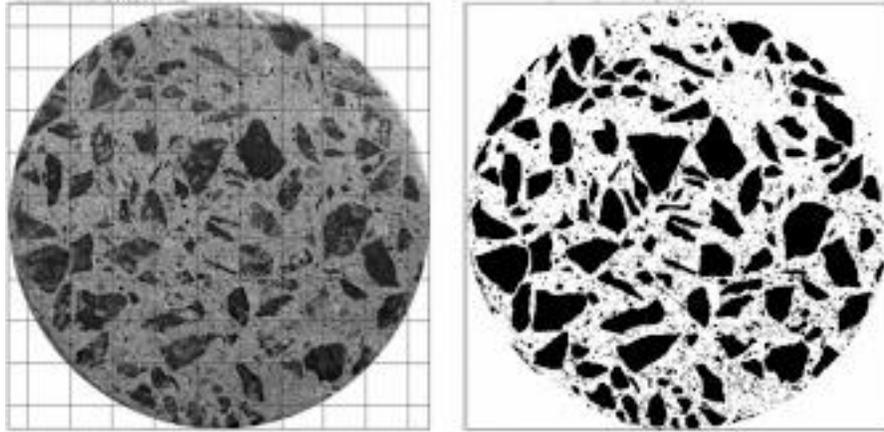
En su libro “Random Heterogeneous Materials”, Torquato [22] ofrece una metodología para la caracterización de microestructuras y fundamentos teóricos para la obtención de las propiedades efectivas.

## 2.4 Binarización de imágenes digitales.

Para la reconstrucción de materiales heterogéneos aleatorios es necesario el proceso de binarización de imágenes digitales, ya que este es un proceso fundamental para dicha caracterización y análisis que conforman este trabajo de tesis. Básicamente, la binarización consiste en la transformación de la información de un material a un plano bivalente, es decir, se obtiene una reducción de la información debido a que únicamente coexisten dos valores; verdadero y falso.

En el contexto de imágenes digitales, la binarización es el proceso de convertir una imagen a una versión reducida de la misma, donde los dos únicos colores resultantes posibles son el blanco y el negro. Para llevar a cabo esta asignación de colores se realiza un análisis individual píxel por píxel. En este análisis se encuentra un proceso contiguo llamado umbralización, que consiste en establecer un valor límite que sirve para decidir si el píxel, dependiendo de su tonalidad de color, será un blanco o un negro.

En la figura 2.1 se puede apreciar la binarización de la superficie de un material a partir de una escala de grises. En términos algorítmicos, una imagen digital está definida por una matriz de píxeles de extensión  $n$  de alto por  $n$  de ancho, entonces para que el recorrido completo de una imagen binarizada es necesario un algoritmo con función cíclica, con esto se logra que cada iteración en dicho ciclo sea representativa de un píxel.



*Figura 2.1. Imagen original (Izquierda) e imagen binarizada (derecha) [13].*

## 2.5 Caracterización a partir de funciones de correlación.

Por su complejidad en la microestructura que los conforma, los materiales heterogéneos, son difíciles de caracterizar, pero estadísticamente es posible extraer características que no se pueden deducir con métodos analíticos. Los MHA lo han podido describir con detalle, esto gracias a las funciones de correlación, principalmente: fracciones volumétricas de las fases, cuantificación del área superficial o interracial, orientación, distribuciones de tamaño conectividad de las fases [7-8, 13]. Las funciones de correlación, en este trabajo, serán implementadas exclusivamente como funciones estadísticas descriptivas, sin embargo, estas también pueden ser usadas para expresar diversas características, por ejemplo: que tan fuerte es la conexión una fracción de superficie y su tendencia al agrupamiento. Las funciones describen computacionalmente el MHA, ya que la información promedio de una colección de diferentes estructuras es caracterizada estadísticamente por una variable aleatoria, que es función del espacio, del tiempo y una subestructura. El descriptor en este caso se comporta de la forma condicional, toma el valor verdadero cuando el punto pertenece a la fase y a la condición definida (dependiendo de la función) y falso cuando no. Para manejar valores lógicos y numéricos que pueden ser recabados, resume como valor=1 si pertenece y valor=0 si no pertenece.

Las funciones de correlación de n-puntos se han utilizado para describir estadísticamente las microestructuras [22]. Las funciones de correlación se basan en la idea de que una estructura porosa compleja puede ser descrita por los valores de una función de fase,  $\mathfrak{I}_\pi(x)$ , en cada punto,  $x$ , dentro el medio poroso. La función de fase toma el valor de cero o uno, dependiendo en donde se encuentre el punto, y puede ser definida como la ecuación 2.2.

$$\mathfrak{I}_\pi(x) = \begin{cases} 1, & \text{si } x \in \pi \\ 0, & \text{de otra forma} \end{cases} \quad 2.2$$

Donde  $x$  denota la posición de un punto arbitrario,  $\pi = 0, 1, 2, \dots, n$  es la fase del correspondiente medio poroso. La fracción volumétrica de la fase  $\pi$ , es definida como el promedio de la función de fase  $\mathfrak{I}_\pi(x)$ , como describe la ecuación 2.3.

$$\varepsilon_\pi = \langle \mathfrak{I}_\pi(x) \rangle \quad 2.3$$

Por lo tanto, la porosidad o fracción superficial es definida como  $\varepsilon_0 = \langle \mathfrak{I}_0(x) \rangle$ .

### 2.5.1 Función de correlación de dos puntos.

La función de correlación de dos puntos (FS2) es un importante parámetro estadístico para la descripción de un MHA isotrópico, que se define mediante la ecuación 2.4:

$$S_{2,\pi}(x, r) = \langle \mathfrak{I}_\pi(x) \mathfrak{I}_\pi(x + r) \rangle \quad 2.4$$

Donde  $r$  es la distancia de  $x_1$  a  $x_2$ .

La función de correlación de dos puntos señala la probabilidad de que dos puntos separados por una distancia lineal coincidan en ser de la misma fase. Se debe definir la unidad de medida de los puntos, en este caso son los pixeles. Una función de correlación puede extraer información estadística de un subespacio dimensional de un tamaño moderado. Para un MHA isotrópico esta función puede ser obtenida al lanzar aleatoriamente un segmento de línea de longitud con orientación especiada y contar el número de veces que el inicio ( $x$ ) y final ( $x+r$ ) de

la línea se encuentra en la fase  $\pi$ , la función es un promedio estadístico que resulta al evaluar todo el dominio de cómputo.

El método consiste en barrer una matriz de  $n \times n$  y verificar si ambos pixeles cuentan con el mismo valor numérico, ya tomando en cuenta que la matriz representa a una imagen binarizada donde cada elemento  $e_{i,j}$  de la matriz puede contener los valores 0 y 1. La función de correlación de dos puntos, por su gran capacidad de descripción estadística y la simplicidad en su aplicación en programas de cómputo, es uno de los descriptores de mayor uso.

### 2.5.2 Función de correlación de trayectoria lineal.

Un parámetro adicional el cual tiene importancia en el estudio se conoce como función de correlación de camino lineal (FLP), la cual nos da información estadística acerca de la conductividad de las fases de la muestra. La ecuación 2.5 es la manera en que se expresa matemáticamente.

La función de correlación lineal es la probabilidad de que un segmento de puntos, (cada uno separado por un espacio discreto) pertenezca a una línea recta, de la fase definida previamente. De igual manera se barre una matriz bidimensional, y se valida si todos los pixeles que conforman la línea pertenecen a la misma fase. Esta función contiene información de conectividad a lo largo de una trayectoria lineal, proporcionando con esto información de gran relevancia del sistema. En un MHA isotrópico, la FLP solamente depende de la distancia de la línea  $r$ . Cuando  $r = 0$  la FLP es igual a la fracción volumétrica de la fase estudiada ( $FLP(0) = S_2(0) = \phi_1$ ).

$$S_{2,\pi}(x, r) = \left\langle \sum_0^{\pi} \mathfrak{I}_{\pi}(x + r) \right\rangle \quad 2.5$$

Para evaluar la función de correlación de camino lineal en un sistema digitalizado, es suficiente con tomar valores enteros de en direcciones ortogonales, especialmente para medios isotrópicos.

### 2.5.3 Función de correlación por tamaño del poro.

Finalmente, la función de correlación de tamaño de poro (FTP) es utilizada para de igual forma caracterizar las muestras. Para la función índice se tiene que:

$$\mathfrak{I}_{TP,\pi}(r) = \begin{cases} 1, & \text{si } H \in Q \\ 0, & \text{de otra forma} \end{cases} \quad 2.6$$

En este caso, se refiere a que para que la función índice obtenga el valor de 1, es necesario que el elemento representativo sea igual en su interior por completo a la fase estudiada, el elemento representativo por lo general son círculos. Para tener la relación matemática entre la función de tamaño de poro y el dominio de la muestra puede ser utilizada la ecuación 2.7.

$$TP_{r_a} = \frac{V_{r_a}}{V_{\pi}} \quad 2.7$$

Donde  $TP_{r_a}$  es la fracción volumétrica que caracteriza el volumen ocupado por el elemento representativo de diámetro  $r_a$  ( $V_{r_a}$ ) sobre el volumen total ocupado por el espacio de la fase  $\pi$  ( $V_{\pi}$ ). De manera similar se pueden evaluar medios con elementos de diferente tipo de forma como cúbicos, tubulares, sólidos o huecos, incluso estructuras amorfas que cumplan con una característica común que tienda a ser relacionada a una distribución de “tamaño”.

### 2.6 Determinación de coeficientes efectivos de transporte.

Las propiedades macroscópicas de un MHA dependen de las propiedades individuales de los componentes  $K$ , la composición de la fracción volumétrica  $\emptyset$  y la estructura de las fases  $\Omega$ . La figura 2.2 muestra en el panel izquierdo un esquema

de un MHA de dos fases; cada fase posee la propiedad efectiva  $K_1$  y  $K_2$  y la fracción superficial  $\phi_1$  y  $\phi_2$ .  $L$  y  $l$  representan las escalas macroscópicas y microscópicas, respectivamente. En el panel derecho, cuando  $L$  es mucho mayor  $l$ , el material heterogéneo puede ser tratado como uno homogéneo con la propiedad efectiva  $K_e$ .

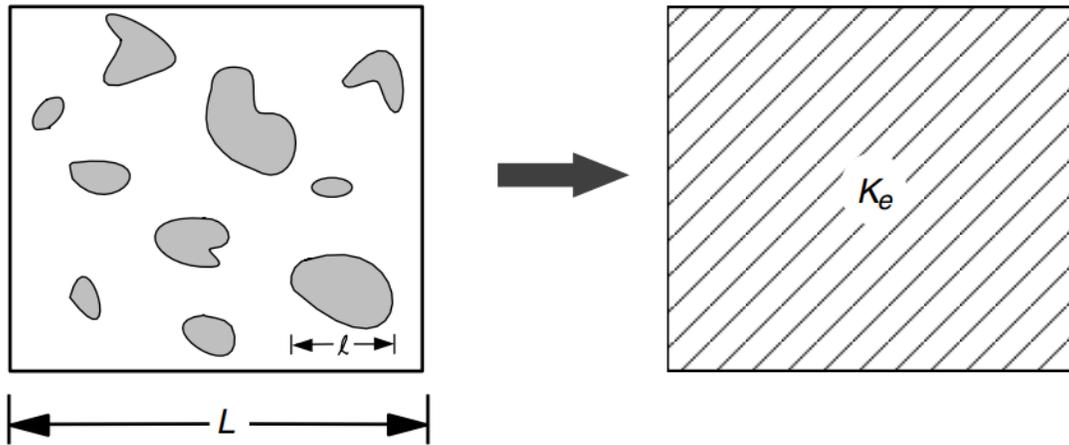


Figura 2.2. Relación entre MHA y propiedad efectiva  $K_e$  [16].

De tal modo, podemos entonces definir al “Coeficiente Efectivo de Transporte” (CET) de un MHA como el coeficiente de proporcionalidad que caracteriza todo el dominio del material. Un valor adecuado del CET es indispensable para diseñar dispositivos o procesos. Para un MHA consistente de  $n$  fases, su CET general  $K_e$  es:

$$K_e = f(K_1, K_2, \dots, K_n; \phi_1, \phi_2, \dots, \phi_n; \Omega) \quad 2.8$$

Es importante enfatizar que la información microestructural de un MHA generalmente no es una relación simple.

Los CET’s en un medio digitalizado, pueden ser determinados mediante los promedios de los campos locales derivados de las teorías apropiadas de transporte para el problema concerniente [17]. Las propiedades efectivas denotadas como conducción (eléctrica, protónica, energía térmica, entre otros), son definidas por una

relación lineal entre un promedio de un flujo local generalizado  $J$  y el promedio de un potencial aplicado  $E$  [21].

$$J \propto K_e \cdot E \quad 2.9$$

Por ejemplo, el flujo generalizado promedio ( $J$ ) representa la corriente eléctrica local media o flujo de calor y el potencial promedio aplicado ( $E$ ) representa el campo eléctrico o el gradiente de temperatura, para problemas de conducción de carga o de transporte de calor, respectivamente. Para la corriente eléctrica se tiene la ley de Ohm dada por la ecuación 2.10:

$$I = \frac{1}{R} \Delta E \quad 2.10$$

Donde,

$I$  = Intensidad eléctrica

$R$  = Resistencia eléctrica

$E$  = Diferencia de potencial eléctrico

Por otro lado, para la carga térmica se tiene la ley de Fourier en la ecuación 2.11:

$$Q = \frac{1}{R} \Delta T \quad 2.11$$

Donde,

$Q$  = Flujo de calor

$R$  = Resistencia térmica

$E$  = Diferencia de potencial térmico

En ambos casos,  $1 / R$  está relacionado con la conductividad, el área y la longitud de transporte, según la ecuación 2.12:

$$\frac{1}{R} = K = \frac{kA}{L} \quad 2.12$$

Donde,

$K$  = Conductancia

$k$  = Conductividad, eléctrica o térmica

$A$  = Área transversal

$L$  = Longitud de transporte, respecto al sentido del flujo.

Por lo anterior, tenemos que la conductancia  $K$ , cuando es de un MHA, puede ser utilizado como  $K_{eff} = CET$ . En esta tesis, para generalizar en los resultados, se empleará el concepto de eficiencia de conducción  $\eta_k$ , basada en la segunda ley de la termodinámica. La ecuación 2.13 proporciona la eficiencia de conducción de la fase  $\pi$ :

$$\eta_{k,\pi} = \frac{K_{e,\pi}}{K_\pi} \quad 2.13$$

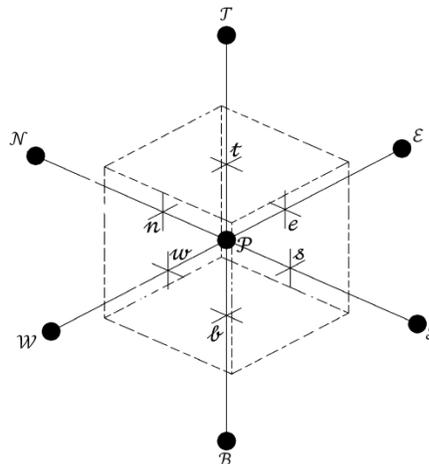
De manera general, los primeros trabajos relacionados se atribuyen a Maxwell (1873) quien desarrolló la relación para determinar propiedades ópticas para para dispersiones diluidas de esferas uniformes. Después, Bruggeman extendió el modelo de Maxwell a sistemas con dispersiones aleatorias de partículas con un rango de tamaño extendido. Torquato [21] desarrolló una metodología para caracterizar microestructuras así como la teoría fundamental para determinar los CET. También se han realizado estudios para reducir el tiempo de cómputo del modelo de Torquato. Los esfuerzos para determinar los CET de conducción eléctrica de la capa catalítica han sido mayormente estudios numéricos. Barbosa [12] utilizó reconstrucciones estocásticas para estimar la conductividad eléctrica de la capa catalítica; examinaron el efecto de la fracción del ionómero y la porosidad de la capa catalítica en la conductividad. Ellos concluyeron que, si la porosidad se

mantiene constante y la fracción del ionómero incrementa, la conductividad eléctrica decrece. Esto debido al decremento del número de partículas de carbón.

### 2.6.1 Volúmenes de control finitos.

Este método consiste en tres pasos: (1) integración formal de la ecuación que rige el fenómeno sobre todos los volúmenes de control (VC's), (2) la discretización, la cual involucra la substitución de una variedad de aproximaciones del tipo de diferencias finitas para los términos en la ecuación integrada. Esto convierte a la ecuación integral en un sistema de ecuaciones algebraicas, y (3) solución de las ecuaciones algebraicas por un método iterativo. El primer paso, la integración del VC, distingue al método de volumen finito de las otras técnicas CFD.

Antes de la integración, el dominio debe ser dividido en pequeños VC's discretos, el centro de cada uno de ellos puede ser asociado a un punto nodal, es decir, las fronteras de cada volumen se encuentran a la mitad entre los nodos adyacentes. En la figura 2.3 se muestra la notación de un nodo y de sus vecinos [14].



*Figura 2.3. Diagrama esquemático de un volumen de control tridimensional y sus nodos vecinos.*

Dado un nodo  $\mathcal{P}$ , sus vecinos se denotarán según las iniciales de los puntos cardinales (en inglés) en las direcciones “x – y” y como *Top* y *Bottom* en la dirección “z”. Las caras de la celda se denotan con la misma nomenclatura, pero con letras minúsculas. Siguiendo la figura, un VC que contiene el nodo  $P$ , tiene seis nodos vecinos identificados como los nodos: *west*, *east*, *south*, *north*, *bottom* y *top* ( $\mathcal{W}$ ,  $\mathcal{E}$ ,  $\mathcal{S}$ ,  $\mathcal{N}$ ,  $\mathcal{B}$  y  $\mathcal{T}$ ) y seis límites:  $w$ ,  $e$ ,  $s$ ,  $n$ ,  $b$  y  $t$  referidos respectivamente a las caras del VC de dichos nodos vecinos. Las distancias entre  $\mathcal{W}$  y  $\mathcal{P}$ , y entre  $\mathcal{P}$  y  $\mathcal{E}$  se identifican por  $\delta x_{\mathcal{W}\mathcal{P}}$  y  $\delta x_{\mathcal{P}\mathcal{E}}$ , respectivamente; de manera similar se obtiene  $\delta y_{\mathcal{N}\mathcal{P}}$ ,  $\delta y_{\mathcal{P}\mathcal{S}}$ ,  $\delta z_{\mathcal{T}\mathcal{P}}$ ,  $\delta z_{\mathcal{P}\mathcal{B}}$ .

El paso clave del método del volumen finito es la integración de la ecuación o ecuaciones gobernantes sobre los volúmenes de control, para conducirnos a una ecuación discreta en el punto nodal  $P$ . Las ecuaciones fundamentales de mecánica de fluidos, transferencia de calor, y en general las ecuaciones de transporte, se pueden adaptar a la forma general siguiente:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_i \Phi) + \nabla \cdot (\rho_i \vec{v} \Phi - \Gamma \nabla \Phi) = \dot{S}_{\Phi, i} \quad 2.14$$

donde  $\Phi$  es la propiedad en estudio,  $\rho_i$  es la densidad del medio continuo,  $\Gamma$  es el coeficiente de proporcionalidad del transporte difusivo, y  $\dot{S}$  representa al resto de términos que aparece en la ecuación, también se le denomina término fuente o sumidero. Si esta ecuación se integra en un volumen de control, se obtiene:

$$\int_{VC} \frac{d}{dt}(\rho_i \Phi) dV + \int_{VC} \nabla \cdot (\rho_i \Phi) dV = \int_{VC} \nabla \cdot (\Gamma \nabla \Phi_i) dV + \int_{VC} \dot{S} dV \quad 2.15$$

El teorema de la divergencia de Gauss relaciona integrales de volumen e integrales de superficie, de modo que se puede escribir la ecuación anterior de la siguiente forma:

$$\int_{VC} \frac{d}{dt} (\rho_i \Phi) dV + \int_{SC} n \cdot (\rho_i \Phi \vec{v}) dA = \int_{SC} n \cdot (\Gamma \nabla \Phi_i) dA + \int_{VC} \dot{S} dV \quad 2.16$$

Cuando se estudian problemas en estado permanente, del fenómeno físico dominado “Conducción”, con generación o consumo de especies, la ecuación general de transporte queda reducida,

$$\int_{SC} n \cdot (\Gamma \nabla \Phi) dA + \int_{\Delta V} S dV \quad 2.17$$

Entonces en tres dimensiones, la ecuación queda como,

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( \Gamma \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \Gamma \frac{\partial \Phi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \Gamma \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right) + S = 0 \quad 2.18$$

De la integración de esta ecuación sobre el VC de la figura 2.3 resulta

$$\left[ \left( \Gamma A \frac{d\Phi}{dx} \right)_e - \left( \Gamma A \frac{d\Phi}{dx} \right)_w \right] + \left[ \left( \Gamma A \frac{d\Phi}{dy} \right)_n - \left( \Gamma A \frac{d\Phi}{dy} \right)_s \right] + \left[ \left( \Gamma A \frac{d\Phi}{dz} \right)_t - \left( \Gamma A \frac{d\Phi}{dz} \right)_b \right] = 0 \quad 2.18.1$$

Donde  $A$  es el área de la sección transversal. Esta discretización de la ecuación general de flujo por difusión, que cabe repetir, no tiene términos fuentes, ni acumulativos; tiene una interpretación física evidente: lo que entra es igual a lo que sale, i.e. constituye la ecuación de balance de la propiedad  $\Phi$  sobre el volumen de control. También puede escribirse, de acuerdo con la ley de Fourier como flujos de energía térmica,  $J = \Gamma A \frac{d\Phi}{dx}$ ,

$$[J_e - J_w] + [J_n - J_s] + [J_t - J_b] + S = 0 \quad 2.18.2$$

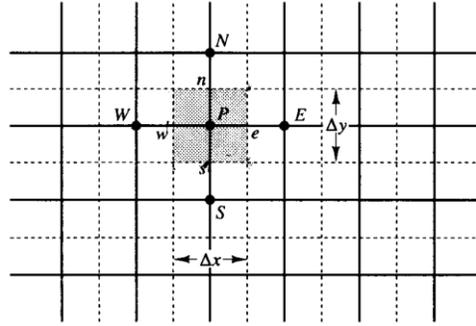


Figura 2.4 Diagrama esquemático de un volumen de control en 2 dimensiones y sus nodos vecinos [14].

La ley de Fourier en la presente aplicación quedaría como.

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + S = 0 \quad 2.19$$

De la integración de esta ecuación sobre el VC expresado en la figura 2.4 resulta en la ley de flujo de calor (Balance de energía):

$$\left[ \left( \Gamma A \frac{d\phi}{dx} \right)_e - \left( \Gamma A \frac{d\phi}{dx} \right)_w \right] + \left[ \left( \Gamma A \frac{d\phi}{dy} \right)_n - \left( \Gamma A \frac{d\phi}{dy} \right)_s \right] + S = 0 \quad 2.18.3$$

La forma más simple de aproximar los gradientes en las caras del VC es por medio de la aproximación lineal, esta práctica se llama diferenciación central. En una malla uniforme, los valores para la interpolación lineal del flujo superficial pueden ser evaluados como:

$$\left( \Gamma A \frac{d\phi}{dx} \right)_e = \Gamma_e A_e \left( \frac{\phi_E - \phi_P}{\delta x_{PE}} \right) \quad 2.20$$

$$\left( \Gamma A \frac{d\phi}{dx} \right)_w = \Gamma_w A_w \left( \frac{\phi_P - \phi_W}{\delta x_{WP}} \right) \quad 2.21$$

$$\left(\Gamma A \frac{d\Phi}{dy}\right)_n = \Gamma_n A_n \left(\frac{\Phi_N - \Phi_P}{\delta y_{NP}}\right) \quad 2.22$$

$$\left(\Gamma A \frac{d\Phi}{dy}\right)_s = \Gamma_s A_s \left(\frac{\Phi_P - \Phi_S}{\delta y_{PS}}\right) \quad 2.23$$

$$\left(\Gamma A \frac{d\Phi}{dz}\right)_t = \Gamma_t A_t \left(\frac{\Phi_T - \Phi_P}{\delta z_{TP}}\right) \quad 2.24$$

$$\left(\Gamma A \frac{d\Phi}{dz}\right)_\ell = \Gamma_\ell A_\ell \left(\frac{\Phi_P - \Phi_B}{\delta z_{PB}}\right) \quad 2.25$$

sustituyendo estas seis ecuaciones en la ecuación 2.17 se obtiene:

$$\begin{aligned} & \left[ \Gamma_e \frac{(\Phi_\varepsilon - \Phi_P) A_e}{\delta x_{PE}} - \Gamma_w \frac{(\Phi_P - \Phi_W) A_w}{\delta x_{WP}} \right] + \left[ \Gamma_n \frac{(\Phi_N - \Phi_P) A_n}{\delta y_{NP}} - \Gamma_s \frac{(\Phi_P - \Phi_S) A_s}{\delta y_{PS}} \right] + \\ & + \left[ \Gamma_t \frac{(\Phi_T - \Phi_P) A_t}{\delta z_{TP}} - \Gamma_\ell \frac{(\Phi_P - \Phi_B) A_\ell}{\delta z_{PB}} \right] = 0 \end{aligned} \quad 2.26$$

esta ecuación puede ser arreglada como:

$$\begin{aligned} & \left( \frac{\Gamma_e}{\delta x_{PE}} A_e + \frac{\Gamma_w}{\delta x_{WP}} A_w + \frac{\Gamma_n}{\delta y_{NP}} A_n + \frac{\Gamma_s}{\delta y_{PS}} A_s + \frac{\Gamma_t}{\delta z_{TP}} A_t + \frac{\Gamma_\ell}{\delta z_{PB}} A_\ell \right) \Phi_P = \\ & \left( \frac{\Gamma_w}{\delta x_{WP}} A_w \right) \Phi_W + \dots \\ & \dots + \left( \frac{\Gamma_e}{\delta x_{PE}} A_e \right) \Phi_\varepsilon + \left( \frac{\Gamma_s}{\delta y_{PS}} A_s \right) \Phi_S + \left( \frac{\Gamma_n}{\delta y_{NP}} A_n \right) \Phi_N + \left( \frac{\Gamma_\ell}{\delta z_{PB}} A_\ell \right) \Phi_B + \\ & \left( \frac{\Gamma_t}{\delta z_{TP}} A_t \right) \Phi_T \end{aligned} \quad 2.27$$

Por último, identificando los coeficientes de  $\Phi$ , esta ecuación se puede reescribir como:

$$a_P \Phi_P = a_W \Phi_W + a_\varepsilon \Phi_\varepsilon + a_S \Phi_S + a_N \Phi_N + a_B \Phi_B + a_T \Phi_T \quad 2.28$$

donde:

$$a_{\mathcal{W}} = \frac{\Gamma_w}{\delta x_{\mathcal{W}\mathcal{P}}} A_w \quad 2.29$$

$$a_{\mathcal{E}} = \frac{\Gamma_e}{\delta x_{\mathcal{P}\mathcal{E}}} A_e \quad 2.30$$

$$a_{\mathcal{S}} = \frac{\Gamma_s}{\delta y_{\mathcal{P}\mathcal{S}}} A_s \quad 2.31$$

$$a_{\mathcal{N}} = \frac{\Gamma_n}{\delta y_{\mathcal{N}\mathcal{P}}} A_n \quad 2.32$$

$$a_{\mathcal{B}} = \frac{\Gamma_b}{\delta z_{\mathcal{P}\mathcal{B}}} A_b \quad 2.33$$

$$a_{\mathcal{T}} = \frac{\Gamma_t}{\delta z_{\mathcal{T}\mathcal{P}}} A_t \quad 2.34$$

$$a_{\mathcal{P}} = a_{\mathcal{W}} + a_{\mathcal{E}} + a_{\mathcal{S}} + a_{\mathcal{N}} + a_{\mathcal{B}} + a_{\mathcal{T}} \quad 2.35$$

Esta ecuación discretizada es obtenida para cada nodo presente en el dominio, y juntas establecen un sistema de ecuaciones simultáneas. De esta forma, la solución total estará dada por la solución del sistema de ecuaciones, la cual tiene una solución no trivial si se especifican condiciones consistentes de frontera. En la ecuación 2.26 se pueden identificar 7 incógnitas ( $\Phi_{\mathcal{P}}, \Phi_{\mathcal{W}}, \Phi_{\mathcal{E}}, \Phi_{\mathcal{S}}, \Phi_{\mathcal{N}}, \Phi_{\mathcal{B}}, \Phi_{\mathcal{T}}$ ), una forma “práctica” para su solución aproximada es adoptar el método de matriz triangular (TDMA, por su acrónimo “*TriDiagonal-Matrix Algorithm*”) [23]. El algoritmo numérico TDMA ofrece la ventaja de ser un método implícito con un requerimiento de tiempo de cómputo significativamente corto. El método se aplica para lograr una solución línea por línea en un plano  $k$  dado, al completar la solución en el plano  $k$  se analiza el plano siguiente  $k + 1$  y así sucesivamente hasta completar el dominio tridimensional total. Para ejemplificar, resolveremos a lo largo de la línea  $\mathcal{N} - \mathcal{S}$  en el plano  $x - y$ , la ecuación de transporte discretizada (2.26) puede ser reescrita como:

$$a\Phi_{\mathcal{P}} = b\Phi_{\mathcal{N}} + c\Phi_{\mathcal{S}} + d \quad 2.36$$

donde  $a = a_p$ ,  $b = a_N$ ,  $c = a_s$  y  $d = a_w\Phi_w + a_\varepsilon\Phi_\varepsilon + a_B\Phi_B + a_T\Phi_T$ . Los valores en  $\mathcal{W}$  y  $\varepsilon$ , así como en  $\mathcal{B}$  y  $\mathcal{T}$  contenidos en “ $d$ ” son considerados temporalmente conocidos. De esta forma se calculan los valores de  $\Phi$  a lo largo de la línea seleccionada “north-south”. Subsecuentemente, el método es aplicado en la línea siguiente hasta barrer todo el dominio, de esta forma los valores de  $\Phi$  se calculan todos los VC’s. El método es repetido de manera tal que los valores de  $\Phi$  se actualicen ciclo con ciclo. El final del cálculo iterativo es condicionado por un término de convergencia, especificado desde el inicio del algoritmo, generalmente este término consiste en cumplir una variancia estadística mínima entre ciclos. Para cálculos en 2 y 3 dimensiones, la convergencia puede ser acelerada mediante la alternación de las direcciones de barrido, permitiendo de esta forma que las condiciones de frontera sean incluidas en el cálculo con mayor eficacia. Para resolver a lo largo de la línea “ $\varepsilon - \mathcal{W}$ ”, la ecuación discretizada debe ser reorganizada de la siguiente forma:

$$a\Phi_p = b\Phi_\varepsilon + c\Phi_w + d \quad 2.37$$

en este caso,  $a = a_p$ ,  $b = a_\varepsilon$ ,  $c = a_w$  y  $d = a_s\Phi_s + a_N\Phi_N + a_B\Phi_B + a_T\Phi_T$ . Similar al caso anterior, los valores en  $\mathcal{S}$  y  $\mathcal{N}$ , así como en  $\mathcal{B}$  y  $\mathcal{T}$  contenidos en “ $d$ ” son aquí los temporalmente conocidos.

En resumen, la técnica de volúmenes finitos permite, a partir de un flujo generalizado obtener el potencial local, o viceversa, y de esta forma a partir de la relación lineal mostrada en la ecuación 2.12 se puede obtener el CET. Para condiciones de la malla con volúmenes de control uniformemente cuadrados, donde la distancia finita sea idéntica:  $\delta x_{p\varepsilon} = \delta x_{wp} = \delta y_{Np} = \delta y_{ps}$  y por consecuencia  $A_\varepsilon = A_w = A_n = A_s$ , se tiene que  $\frac{A}{\delta X} = Cte$ , de tal forma que la ecuación 2.25, puede reducirse al ser multiplicada por  $\frac{\delta X}{A}$ , como lo muestra la ecuación 2.36,

$$\begin{aligned} \frac{\delta X}{A} \left[ \left( \frac{\Gamma_\varepsilon}{\delta X} A \right) \Phi_\varepsilon + \left( \frac{\Gamma_w}{\delta X} A \right) \Phi_w + \left( \frac{\Gamma_n}{\delta X} A \right) \Phi_N + \left( \frac{\Gamma_s}{\delta X} A \right) \Phi_S + S \right] = \\ \frac{\delta X}{A} \left[ \left( \frac{\Gamma_\varepsilon}{\delta X} A + \frac{\Gamma_w}{\delta X} A + \frac{\Gamma_n}{\delta X} A + \frac{\Gamma_s}{\delta X} A \right) \Phi_p \right] \end{aligned} \quad 2.38$$

Para obtener la ecuación 2.39

$$\Gamma_e \Phi_\varepsilon + \Gamma_w \Phi_w + \Gamma_n \Phi_N + \Gamma_s \Phi_S + \frac{\delta X}{A} S = (\Gamma_e + \Gamma_w + \Gamma_n + \Gamma_s) \Phi_P \quad 2.39$$

En la determinación de CETs, se usa un sistema con dominio geométrico cuadrado, sin término fuente, con dos fronteras definidas con un potencial térmico (típicamente de Norte a Sur) y dos fronteras con flujo nulo (típicamente este y oeste). La figura 2.5 muestra a detalle cómo están expresadas las condiciones de frontera del material estudiado [14].

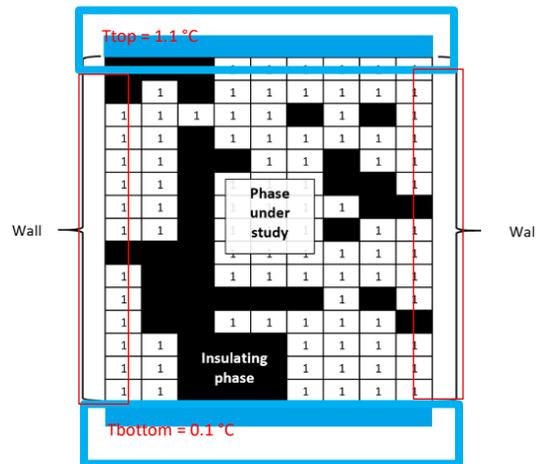


Figura 2.5 Determinación de condiciones de frontera en la aplicación.

Es de suma importancia especificar que, al encontrarse en el dominio dos o más materiales con diferente conductividad, y al tratarse de un estudio que condiciona el flujo en la interfaz de los volúmenes de control vecinos, es indispensable calcular una conductividad media (o promedio) que caracteriza el flujo de calor desde el nodo “P” hacia el nodo vecino “m”, este coeficiente medio es caracterizado por la siguiente ecuación [12],

$$\bar{\Gamma} = \frac{2\Gamma_P\Gamma_m}{\Gamma_P + \Gamma_m} \quad 2.40$$

Para los nodos centrales se despeja la ecuación 2.38, para  $\Phi_P$ ,

$$\Gamma_e \Phi_E + \Gamma_w \Phi_W + \Gamma_n \Phi_N + \Gamma_s \Phi_S + \frac{\delta X}{A} S = (\Gamma_e + \Gamma_w + \Gamma_n + \Gamma_s) \Phi_P \quad 2.38$$

$$\Phi_{P,centro} = \frac{\bar{\Gamma}_e \Phi_E + \bar{\Gamma}_w \Phi_W + \bar{\Gamma}_n \Phi_N + \bar{\Gamma}_s \Phi_S}{\bar{\Gamma}_e + \bar{\Gamma}_w + \bar{\Gamma}_n + \bar{\Gamma}_s} \quad 2.40$$

Si la conductividad es igual en todos los nodos,  $\Gamma_e = \Gamma_w = \Gamma_n = \Gamma_s$ , se tiene que:

$$\Phi_{P,centro} = \frac{\Phi_E + \Phi_W + \Phi_N + \Phi_S}{4}$$

Que es el promedio de los potenciales de los nodos vecinos. Los nodos de las aristas del lado este, con condición de frontera J=0, tienen la siguiente solución,

$$\Gamma_e \Phi_E + \Gamma_w \Phi_W + \Gamma_n \Phi_N + \Gamma_s \Phi_S = (\Gamma_e + \Gamma_w + \Gamma_n + \Gamma_s) \Phi_P \quad 2.41$$

Solucionando para  $\Phi_P$ ,

$$\Phi_{P,e} = \frac{\Gamma_w \Phi_W + \Gamma_n \Phi_N + \Gamma_s \Phi_S}{\Gamma_w + \Gamma_n + \Gamma_s}$$

Los nodos de las aristas del lado oeste, con condición de frontera J=0, tienen la siguiente solución,

$$\Gamma_e \Phi_E + \Gamma_w \Phi_W + \Gamma_n \Phi_N + \Gamma_s \Phi_S = (\Gamma_e + \Gamma_w + \Gamma_n + \Gamma_s) \Phi_P \quad 2.41.1$$

## 2.7 Simulación y técnicas numéricas.

Visto como concepto general, simulación se refiere a la aproximación a la operación de un sistema o proceso, basado en un modelo numérico, el cual es la aproximación matemática a un fenómeno físico. Por lo general, el modelo numérico de la simulación suele resolverse por medio de computadoras. Las técnicas numéricas más utilizadas en la ingeniería son los métodos de elemento, volumen y diferencias finitos [17].

Visto de manera más específica, las ventajas de la simulación pueden ser:

1. Es un proceso en relación más eficiente y maleable.
2. Puede ser utilizada para analizar y sintetizar una red compleja y extensa de una situación real, pero no puede ser aplicada para solucionar un modelo de análisis cuantitativo convencional.
3. En algunos casos la simulación es el único método útil para ser aplicado.
4. Los modelos de simulación se estructuran y nos ayuda en general con problemas determinados por nuestra mera delimitación.
5. Los analizadores requieren conocer la manera en que se avanza y que opciones son las más factibles; el directivo con la ayuda del computador puede obtener varias opciones de las diferentes tomas de decisiones respectivamente.
6. La simulación no incurre en sistemas del mundo real.
7. Permite el estudio de los efectos interactivos de los componentes individuales o variables para determinar las más relevantes.

Entre las desventajas se encuentran la limitada capacidad de cálculo de las computadoras y de los sistemas informáticos según su arquitectura y disponibilidad para hacer dichas tareas, ya que por lo general la simulación de problemas complejos suelen ser arduas tareas que requieren un gran número de recursos informáticos que tienden a ser incapaces de realizar dichas exigencias. por lo que los modelos suelen ser una versión simplificada del fenómeno estudiado.

## CAPÍTULO 3. METODOLOGÍA.

### Algoritmo del proceso general.

En esta sección se presenta el código realizado [VER ANEXO A], con el objetivo de describir con detalle el algoritmo, los pasos y los resultados, dicho algoritmo requiere un sistema informático con varias exigencias debido a la cantidad de información que ejecuta, por lo que las características del ordenador donde se ha compilado, depurado y ejecutado son las siguientes:

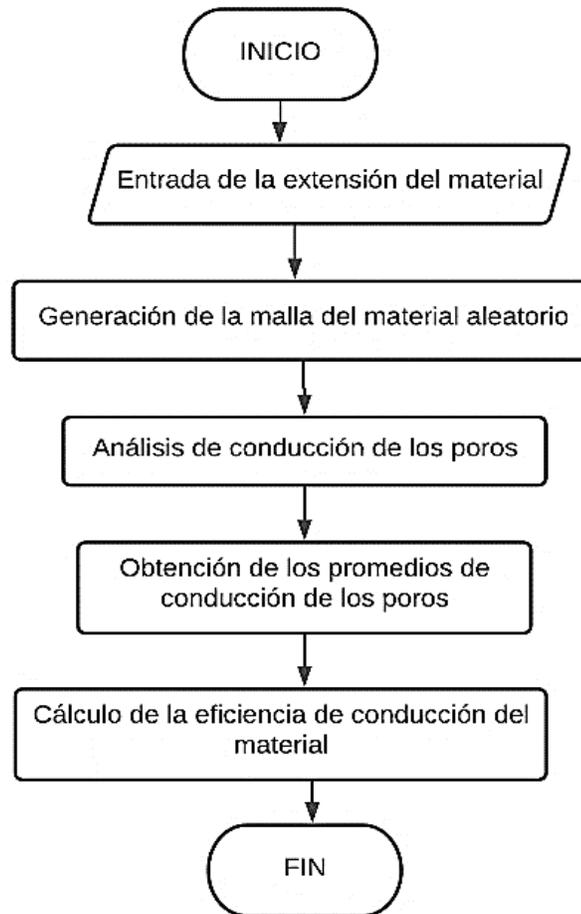
- Computador: LENOVO Z50.
- Sistema operativo: Windows 11 PRO 21H2.
- Procesador: AMD Athlon 200GE with Radeon Vega Graphics 3.20 GHz.
- Memoria RAM: 8 GB DDR5 + 2 GB DDR4.
- Tarjeta gráfica: NVIDIA GeForce GTX 1050 de 2 GB.
- Disco duro: 1TB.

El proceso general de la metodología, en su descripción más básica, requiere un mapeo de dos fases en una matriz lógica, cada fase la identificamos numéricamente y en código de colores podemos describirla como “fase de color negro” y “fase de color blanco”. Las dimensiones de la matriz corresponden a  $N \times N$ . Donde  $N$  corresponde al número de píxeles por renglón y columna (es cuadrada). La matriz generada representa un dominio constituido por volúmenes de control, en donde el dominio constituye un material.

El proceso general inicia con un material ordenado y una secuencia específica provoca el desorden. Para esta tesis de licenciatura, al material en su estado inicial estará ordenado con puntos (color negro y color blanco).

El algoritmo siguiente describe su creación en el entorno de desarrollo (IDE) CODEBLOCKS manipulando un código que comparte, funciones, atributos y librerías de lenguajes primos como lo son C y C++ (Con la finalidad de destacar y optimizar el resultado a obtener). En la figura 3.1 se presenta un diagrama de flujo

general del algoritmo realizado mediante el cual se puede describir de manera general como se ha de realizar el análisis del potencial de conducción con su respectiva eficiencia en un material heterogéneo aleatorio (MHA) a partir de un subconjunto de condiciones de frontera previamente determinadas tomando en consideración la función índice y la simulación de un material con características amorfas aleatorias como se ha mencionado en la sección anterior.



*Figura 3.1. Diagrama de flujo de datos del algoritmo*

Se procede a la explicación general del código generado, iniciando por las librerías necesarias para la compilación y el desarrollo del algoritmo, siendo las siguientes:

- stdio.h: Librería de cabecera que contiene las definiciones de macros, constantes y las funciones de la biblioteca estándar del lenguaje de programación C.

- `stdlib.h`: Nos permite acceder a las funciones de dicha librería las cuales son: de conversión, memoria, el control de procesos, matemáticas, ordenación y búsqueda.

Por consiguiente, se han declarado las variables, arreglos (matrices y vectores) y el archivo de texto que será la de escritura en una malla; en donde se almacenarán los datos que serán analizados en los resultados. La tabla 3.1 presenta la recopilación de dichas variables utilizadas en el algoritmo:

*Tabla 3.1. Recopilación de variables utilizadas en el algoritmo.*

Variable	Descripción	Tipo de dato
nx	Dominio en el eje X.	Entero (Int)
ny	Dominio en el eje Y.	
i	Contador de ciclo matricial.	
j	Contador de ciclo matricial.	
VCT	Cantidad de elementos que contendrá la malla (Producto de valor del eje "x" por valor de eje "y").	
vBlanco	Representación binaria de presencia de un blanco de 1.	
Conclude	Valor de conclusión para el ciclo condicional y valores de convergencia.	
CUENTA	Contador para las iteraciones de análisis.	
CCDELTA	Acumulador de diferencias de temperaturas.	
CICLOSENERMAXIMOS	Cantidad de ciclos a realizar para análisis de datos de temperatura, de 25,000.	
bt	Contador de blancos presentes.	

random	Valor aleatorio de la partícula (ya sea blanco o negro)	
Tem1	Valor de temperatura asignado en función de condiciones de frontera.	
Tem2	Asignación de valor de temperatura en función de las condiciones de frontera.	
sumacond	Sumador de condiciones de frontera según sea el punto de aplicación.	
Negro	Ausencia del elemento en el punto.	
PHI	Fracción de un blanco (valor diferente a cero).	Real (double)
VCBlanco	Producto de la cantidad de elementos (VCT) por la fracción de un blanco (PHI).	
Kconduce	Valor de conducción eléctrica del elemento (1000000).	
Kaislante	Propiedad de aislar la conducción eléctrica en la ausencia del elemento (0.0000001).	
Tinit	Temperatura inicial en el material, de 0.5 grados.	
Converge_NUM	Valor de convergencia del elemento cuyo valor es cercano a 0, de 0,00000001.	
DELTA	Delta de temperaturas.	
Te	Temperatura del este del punto donde se analice.	
Tw	Temperatura del oeste del punto donde se analice.	
Ts	Temperatura del sur del punto donde se analice.	
Tn	Temperatura del norte del punto donde se analice.	
Tb	Temperatura de la parte interior del material.	

Tt	Temperatura de la parte superior del material.	
Val_FronteraTOP	Condición de frontera de la parte superior del material donde la temperatura es de 10 grados.	
Val_FronteraBOTTOM	Condición de frontera de la parte inferior del material donde la temperatura es de 0.1 grados.	
Dtemp	Diferencial de temperatura entre un punto.	
KK	Valor de conductividad eléctrica en un punto.	
calor_flux_k	Flujo de calor según la conductividad eléctrica del material.	
SUMADELTA	Acumulador de las deltas de temperatura.	
PROMDELTA	Promedio de valores obtenidos de deltas de temperatura sobre la cantidad de deltas.	
SUMA_EN_K	Acumulador de valores de flujo de calor en el material.	
CCSUMA_EN_K	Cantidad de acumulaciones de flujo de calor.	
EFFFF_NAFION	Eficiencia de conducción del elemento.	
VCiProp[1050][1050]	Matriz de la función índice del elemento binarizado.	Entero sin asignación largo (Unsigned long int)
Told[1050][1050]	Matriz de temperaturas iniciales.	
Tnew[1050][1050]	Matriz de temperaturas finales.	Arreglo real largo (long double)
Con[1050][1050]	Matriz de conductividades en función de la matriz de función índice de los elementos.	

Kw	Conductividad oeste del elemento según la posición.	
Kn	Conductividad norte del elemento según la posición.	
Ks	Conductividad sur del elemento según la posición.	
Ke	Conductividad este del elemento según la posición.	
Promedio[1050]	Arreglo en el cual se almacenarán los promedios de conductividad de los puntos internos de la imagen (Sin contemplar las aristas)	
*DATOSGEN_CAL_RES	Archivo donde se escribirá la matriz del flujo de calor en el elemento.	
*DATOSGEN_eff	Archivo donde se escribirá la eficiencia general del elemento.	
*DATOS_TEM_Blanco	Archivo donde se escribirá la solución a la distribución de las respectivas temperaturas.	File
*Cheq	Archivo donde se escribirá la malla de la función índice del elemento.	
*Dat	Datos de lectura de los elementos para la generación de un sustrato.	

Las primeras condiciones, como se ha mencionado, son para la iniciación de las variables que fungirán en el programa. Se analizarán materiales que se comportan en un sistema aleatorio, pero estadísticamente determinado. Por conveniencia, en las primeras pruebas, del análisis reconstructivo, se ha optado por un sistema de 300 datos, valor que se puede variar cambiando la extensión de la matriz. Como se puede observar un blanco del sistema estará determinado por un 1 y un negro por un 0, estos valores serán de utilidad cuando se realice el procesamiento de la malla en un visualizador de imagen binaria: Esta identificación

binaria de los colores, está descrita en el capítulo y corresponde a la función índice de la ecuación 2.1.

Posterior a la declaración de variables se inicia el código con la clase principal (Main), la cual no posee un tipo de dato determinado teniendo en cuenta que se presume una hibridación de funciones y atributos de lenguajes primos como los son C++ y C. Para posteriormente invocar la función srand para generar un número aleatorio en función del horario actual lo que permite que dicho valor nunca sea igual, esta función establece un punto de partida para generar una serie de valores enteros pseudoaleatorios en el subproceso en el que se trabaje (según sea el caso).

En el fragmento 3.1, se procede a la asignación de aglomerados a partir de una determinación aleatoria con la función rand y con una magnitud de la cantidad de blancos en función de la fracción declarada en la variable PHI. Todo esto mientras la matriz principal (VCiProp) es llenada con los datos obtenidos, denominado como el proceso de binarización y asignación de carbones en un subconjunto de números aleatorios.

```
for (int j=1; j<=ny; j++){ for (int i=1; i<=nx; i++){
    random=VCT * rand() / 32767;
    if (random<=VCBlanco){VCiProp[i][j]=vBlanco;
        bt++;}
    else{VCiProp[i][j]=vNegro;}}
```

*Fragmento 3.1. Código de asignación de blancos.*

A partir de la invocación de un par de ciclos y trabajando con los valores de los ejes “x” y “y” es posible realizar la respectiva asignación de una cantidad de blancos determinada por el valor dado por la función srand cuyo valor máximo posible es de 32767 y este se encuentra determinado por la librería stdlib.h, con esto se asigna el valor 1 (color blanco en la matriz) en la función índice. A partir de

la generación del subconjunto de números aleatorios, en función de esta matriz, es posible establecer un MHA con las características descritas en la bibliografía de este documento. Tomando en cuenta que existan elementos conductores (valor 1, color blanco) y aislantes (valor 0, color negro) que serán analizados para el material de la malla específica.

Partiendo del fragmento 3.2 es posible analizar que se realiza la escritura de la matriz "VCiProp" en el archivo \*txt con el dominio que se ha pedido en el inicio de programa:300, 350 ó 400). Estas magnitudes son delimitadas a la exigencia computacional y a los recursos informáticos disponibles en la ejecución de dicho sistema matricial. La función fprintf(), permite la adquisición de los datos, para su posterior procesamiento.

```
CHEQ= fopen ("mallacheq","wt");
    for (j=1; j<=ny; j++) {for (i=1; i<=nx;
i++){
    fprintf (CHEQ, "%d\t", VCiProp[i][j]);}
    fprintf (CHEQ, "\n");}
close (CHEQ);
```

*Fragmento 3.2. Escritura de la función índice de la matriz en una malla.*

En el fragmento 3.2 es posible obtener un archivo txt ubicado en la carpeta raíz del programa, la finalidad de obtener dicho archivo y de la correspondiente escritura de la matriz de función índice es de realizar un análisis de dicha binarización que modela el comportamiento de un material estocástico a partir de la imagen virtual que este elemento genera, [EJEMPLO EN ANEXO B].

Analizando el fragmento 3.3 se realiza un proceso de transformación de la matriz de binarización a una matriz de conductividades reales a partir de los datos obtenidos de la malla, se realizó la manipulación de los valores binarios, con la excepción de que ahora con la utilización de una sentencia de disyuntiva de las variables con datos numéricos de las propiedades de Kconductora o Kaislante, es decir, que si el valor encontrado en la matriz "VCiProp" es un 1 significa que es un

blanco, por tanto, conduce, de lo contrario es un 0, lo que significa que es un valor de negro o dieléctrico. Esto se hace porque las funciones de correlación son más fáciles de operar en binario (valor 1 y valor 0), mientras que para el transporte de carga se requiere la magnitud de la conductividad (matriz  $con[i][j]$ ).

```
/*ASIGNA CONDUCTIVIDAD DE ACUERDO CON LA FASE*/  
for (j=1; j<=ny; j++) { for (i=1; i<=nx; i++) {  
    if (VCiProp [i][j]==1){  
        con[i][j]=Kconduce;}  
    else{con[i][j]=Kaislante;}}}
```

*Fragmento 3.3. Asignación de conductividades.*

De acuerdo con el fragmento 3.4, en el algoritmo se ha de realizar el perfil inicial de temperaturas, es decir, la distribución correspondiente a las temperaturas del material a partir de condiciones iniciales de frontera, esto bajo la particularidad descrita en el capítulo 2 en la sección 2.6.1 de volúmenes de control finitos. Se ha definido que todos los nodos del material tendrán una temperatura interna inicial definida de 0.5 grados descartando únicamente las paredes norte y sur (top y bottom). Por lo tanto, el arreglo matricial inicia en la segunda posición en Y y culmina en la penúltima.

```
/*PERFIL INICIAL DE TEMPERATURAS*/ //las inicia con  
la distribución lineal desde top a bottom*/  
Tinit=0.5;  
  
for (j=1; j<=ny; j++) {for (i=1;i<=nx; i++) {  
    Told [i][j]=Tinit;}}  
  
CHEQ= fopen ("Tinicial","wt"); for (j=1; j<=ny;  
j++) {  
    for (i=1; i<=nx; i++){fprintf (CHEQ, "%f\t",  
Told[i][j]);} fprintf (CHEQ, "\n");} close  
(CHEQ);
```

*Fragmento 3.4. Asignación inicial de temperaturas.*

Se procede a la delimitación de condiciones iniciales de frontera en el material, se puede obtener del código realizado la linealización en un vector de un conjunto de promedios de los puntos medios, sin considerar las aristas, de la matriz de conductividades, es decir, en el caso presente que se ha declarado una matriz con extensión que va desde la posición 1 (recordando que en un vector o matriz se parte desde una posición 0), hasta la posición  $x-1$  y/o  $y-1$  respectivamente. Con esto se obtiene por manipulación de posiciones de los arreglos un conjunto de datos promedio, la suma aritmética y el cociente de estos valores se ha de obtener de esta manera el promedio de conductividad de dicha posición, siendo aquel conjunto, la recopilación de los promedios efectivos del material heterogéneo estocástico.

Estos descritos por la previa delimitación de temperatura en los poros centrales del material se procede a la obtención de los valores de conducción en las posiciones NORTE, SUR, ESTE Y OESTE de cada uno de los poros del material, es decir, aplicando la ecuación 2.40. Es de suma importancia especificar que, al encontrarse en el dominio dos o más materiales con diferente conductividad, y al tratarse de un estudio que condiciona el flujo en la interfaz de los volúmenes de control vecinos.

Es indispensable calcular una conductividad media (o promedio) que caracteriza el flujo de calor desde el nodo "P" hacia el nodo vecino "n". finalmente es posible determinar mientras un conjunto de condicionales en qué posición están ubicados y determinar sus respectivas condiciones de frontera y conducción, por ejemplo, la posición N de X no incluye un valor en el promedio ESTE o en caso contrario, la posición inicial en dicho dominio, no poseer un valor verificado promedio OESTE, así como en los límites inferior y superior del material, ya que estos poseen una temperatura definida de 10 en valor superior y de 0.1 en el inferior, brindando consistencia en las condiciones de temperatura centrales del elemento, por lo tanto, lo descrito en la ecuación 2.41.1 que otorga el valor cuádruple de conducción del poro como punto final (ya sea blanco o negro). Lo mencionado es posible de visualizar como algoritmo en el fragmento 3.5.

```

//cond media y condiciones de frontera
for (j=1; j<=ny; j++) {for (i=1; i<=nx; i++) {
    Ke[i][j]= (2*con[i][j] * con[i+1][j]) / (con[i][j] +
    con[i+1][j]);
    Kw[i][j]= (2*con[i][j] * con[i-1][j]) / (con[i][j] +
    con[i-1][j]);
    Kn[i][j]= (2*con[i][j] * con[i][j+1]) / (con[i][j] +
    con[i][j+1]);
    Ks[i][j]= (2*con[i][j] * con[i][j-1]) / (con[i][j] +
    con[i][j-1]);
    if (i==nx) {Ke[i][j]=0;}
    if (i==1) {Kw[i][j]=0;}
    if (j==ny) {Kn[i][j]=4*con[i][j];
        Tnew[i][j]=Val_FronteraTOP;}
    if (j==1) {Ks[i][j]=4*con[i][j];
        Tnew[i][j]=Val_FronteraBOTTOM;}
}}

```

*Fragmento 3.5. Condiciones medias y de frontera de promedios de conducción.*

Conocidos los valores de temperatura y de conducción eléctrica considerando las condiciones de frontera del elemento se proceden a realizar las soluciones de los nodos tanto centrales como de las aristas laterales.

En el fragmento 3.5 se especifica, que en las fronteras geométricas sin flujo de energía (aislantes) la conductividad es cero ( $i=nx$ ,  $i=1$ ) y en las fronteras geométricas con condiciones de frontera en potencial (con flujo de energía), la conductividad es 4 veces la conductividad del nodo vecino ( $j=ny$  y  $j=1$ ).

```

//SULUCIÓN ARISTA OESTE
for (i=1, j=2; j<=nx-1; j++){
    sumacond=Ke[i][j]+Kn[i][j]+Ks[i][j];
    Tnew[i][j]=((Ke[i][j]*ToId[i+1][j])+(Ks[i][j]*ToId[i][j-1])+(Kn[i][j]*ToId[i][j+1]))/sumacond;}
//SULUCIÓN ARISTA ESTE
for (i=nx, j=2; j<=nx-1; j++){
    sumacond=Kw[i][j]+Kn[i][j]+Ks[i][j];
    Tnew[i][j]=((Kw[i][j]*ToId[i-1][j])+(Ks[i][j]*ToId[i][j-1])+(Kn[i][j]*ToId[i][j+1]))/ sumacond;}
//SULUCIÓN CENTRALES
for (j=2; j<=ny-1; j++){for (i=2;i<=nx-1; i++){
    sumacond=Ke[i][j]+Kw[i][j]+Kn[i][j]+Ks[i][j];
    Tnew[i][j]=((Ke[i][j]*ToId[i+1][j])+(Kw[i][j]*ToId[i][j])+(Kn[i][j]*ToId[i][j+1])+(Ks[i][j]*ToId[i][j-1]))/
    sumacond;}}

```

*Fragmento 3.6. Cálculo de solución de temperatura en función de la conductividad de los poros en las aristas ESTE y OESTE y de los CENTRALES.*

En el fragmento 3.6 se han de determinar los valores promedio de temperatura, considerando las magnitudes de los nodos producto de los valores previos (promedios realizados en la sección de código anterior), dividido por la suma de las conductividades de cada punto según sea el caso ya que el sistema de ecuaciones lineales algebraicas, obtenido para cada nodo p de todo el dominio. Siguiendo la ecuación 2.40 para la solución centrales, ecuación 2.41 para solución arista este y ecuación 2.42 para solución arista oeste.

La arista oeste (o izquierda) consta de los valores fuera de las condiciones de frontera que son las aristas norte y sur además de no estar ubicados en el centro del elemento, siendo estos los valores mayores en J=2 e iguales en i=1, moviendo el contador “verticalmente” hasta lograr la posición N-1, con la finalidad de no

interferir con el valor de frontera el cual está delimitado a ser el mismo para denotar el comportamiento de temperatura del elemento.

En el caso de la arista este (o derecha), como en el caso anterior, se han de constar todos los valores fuera de las condiciones de frontera, que no se encuentran en el centro y que están determinados por los valores mayores en  $J=2$  e iguales en  $i=N$ .

Finalmente, en el caso de los nodos centrales se toman en consideración que no integren ninguna de las aristas del elemento binarizado, es decir, con los valores dados en  $1 < J < N$  y  $1 < i < N$ , siendo todos los nodos fuera del primer y último valor del elemento en sus dos ejes (mayor-igual a 2 y menor a  $N_x$  en el caso de los valores horizontales).

Con lo previamente mencionado se han obtenido los valores promedio nuevos de temperatura en función de los parámetros de conductividad eléctrica y del promedio del potencial.

En el fragmento 3.7 se procede al cálculo de un gradiente de temperaturas que se ha obtenido con la diferencia de temperatura de cada uno de los nodos del MHA generado.

```
/*CÁLCULO DE la diferencia de Temperatura*/
    CCDELTA=0; DELTA=0; SUMADELTA=0;
    for (j=1; j<=ny ; j++){for (i=1; i<=nx; i++){
        DELTA=Tnew[i][j]-Told[i][j]; if (DELTA<0){DELTA=DELTA*-
        1.0;}}
        CCDELTA++; SUMADELTA=SUMADELTA+DELTA;}}
    PROMDELTA=SUMADELTA/CCDELTA;
```

*Fragmento 3.7. Cálculo del gradiente de temperatura general del MHA.*

A partir de un par de ciclos se permite el cálculo de un delta general de temperatura, es decir, que engloba la suma de las diferencias de temperatura

anterior y la previamente obtenida de cada uno de los nodos conformados en el material de estudio, considerando que se obtenga un valor absoluto en la presente, posteriormente se tiene noción de un contador CCDELTA el cual permite contemplar el número de convergencia y un acumulador SUMADELTA que cumplirá su función sumando todos los gradientes de temperatura, finalmente se obtendrá el promedio de deltas dividiendo la suma total por el número de elementos, esto con el fin de un posterior análisis cuantitativo.

```
/*ACTUALIZA la temperatura*/  
  
for (j=1; j<=ny; j++){  
    for (i=1;i<=nx; i++){  
        Told[i][j]=Tnew[i][j];}}  
  
if (PROMDELTA<=Converge_NUM || CUENTA>=CICLOSENERMAXIMOS) {  
    Conclude=1;}  
else {  
    Conclude=0;}  
}while(Conclude==0); //CONVERGENCIA
```

*Fragmento 3.8. Actualización de temperatura.*

El fragmento 3.8 muestra la actualización de los valores de temperatura, es decir, el valor de la matriz Told cambia obteniendo el valor idéntico de la matriz Tnew ya que se ha hecho uso de ambas para la tener el valor de gradiente de temperatura, por consiguiente, se procede al análisis de convergencia del promedio de las deltas para conseguir cerrar el ciclo While del inicio, esto con la finalidad de que a medida que la muestra de deltas aumente junto con la variable aleatoria de datos, tomen un valor cercano a la constante de convergencia (por conveniencia CCDELTA) o que

el número de ciclos contados por la iteración residual del promedio porcentual de delta llegue a 1 millón, la selección de los intervalos de caracterización se realiza postprocesamiento.

En la primera etapa, el material se agita hasta la convergencia del error de Annealing. Los "sistemas de estudio" se seleccionan de acuerdo con la evolución de PHI y EFFFF\_NAFION, siendo esto posible debido a que se conocen los valores iniciales y de frontera.

En función de la ecuación 2.40. 2.41 y 2.42, se calcula el valor de de potencial medio en cada uno de los nodos, tomando en consideración la suma de la cantidad de nodos que existen en el material, la suma de conductividades promedio y la suma de la conductividad en función del flujo de calor del elemento.

```
calor_flux_K=0; SUMA_EN_K=0; CCSUMA_EN_K=0;
  for (j=1; j<=ny; j++){ for (i=1; i<=nx; i++){
    KK = (2*con[i][j] * con[i][j+1] ) / (con[i][j] +
    con[i][j+1] );
    DTemp=Tnew[i][j]-Tnew[i][j+1];
    calor_flux_K=calor_flux_K+(KK *DTemp*1.0);
    /*SUMATORY--> amp/(A/L)*/ }CCSUMA_EN_K++;
  SUMA_EN_K=SUMA_EN_K+calor_flux_K;
  calor_flux_K=0;}
```

### *Fragmento 3.9. Obtención de valor de conductividad media.*

La finalidad de obtener la conductividad promedio en cada uno de los nodos del elemento permite identificar una conductividad eléctrica general y con ello el potencial eléctrico que posee dicho material de estudio, entonces es un paso de suma importancia en la realización de dicho algoritmo, una vez calculado, se procede a obtener un gradiente de temperatura entre un valor inicial y el anterior, teniendo así un entero positivo que permita brindar un valor de flujo de calor en el

elemento relacionado con la conductividad K, con los valores conductivos y las temperaturas 1 y 2, Es posible obtener una eficiencia general de conducción del elemento, a partir de esto, es perceptible que dicho valor es la eficiencia de conducción eléctrica total del material, debido a que este ha surgido de las sumas de conductividades promedio sobre la cantidad de nodos y los gradientes de temperaturas promedio en cada uno de ellos, como se puede visualizar en el fragmento 3.10.

```
EFFFF_NAFION=(SUMA_EN_K/CCSUMA_EN_K)/Kconduce/(Tem1-Tem2)*100;  
  
DATOSGEN_CAL_RES= fopen ("CALORFLUX_S_RESUME", "wt");  
fprintf (DATOSGEN_CAL_RES, "\nRANDOM\t\nK\tncalor_flux\n");
```

*Fragmento 3.10. Eficiencia del MHA.*

Por consiguiente, se obtienen los valores propuestos que brindan la información necesaria para proceder al análisis de la generación de una imagen virtual de la composición de un MHA como tal el valor de eficiencia de conducción por valores de promedios locales en los poros, valores de la distribución correspondiente de la temperatura en sus diferentes fases en el gradiente de cada elemento del material y finalmente la malla de volúmenes de control de dicho material, es posible de visualizar en los anexos B, C y D, presentes al final de este documento, con esto, a partir de un conjunto de pruebas, se enfatiza y comprueba el correcto funcionamiento del algoritmo generador correspondiente a los objetivos propuesto en este trabajo de tesis.

Posteriormente a la experimentación y prueba del correcto funcionamiento del algoritmo de proceso general, se realizan un conjunto de pruebas que comprueben cada uno de los resultados que demuestran como se van desarrollando las variables de un material heterogéneo estocástico conforme a las ecuaciones vistas en el capítulo 2 en conjunto a las condiciones de frontera propuestas al inicio del algoritmo [Ver anexos B, C y D].

## Generación de imágenes sintéticas del algoritmo de proceso general

Para la creación de las imágenes sintéticas, se generó una malla que simule la forma bidimensional del MHA, ya que, a partir de este procederá a su análisis en función de los valores que se le establezcan en cada una de las pruebas que se le realicen.

Las consideraciones generales para la generación de imágenes sintéticas son que se debe establecer un valor de fase PHI mayor a 0.2 y menor o igual a 0.8 (Ya que el primer valor es previo a ser despreciable y en el segundo se presume una eficiencia que no concuerda con lo estipulado por el algoritmo). Un parámetro que también debe ser de suma consideración es el valor de extensión del material (Mostrado como  $N_x$  y  $N_y$  en el algoritmo) que como se ha mencionado y por conveniencia este material estará conformado por 90,000 elementos (o nodos) identificables por la fase 0 ó 1 y su respectiva conductividad.

Previamente establecidas y tomadas en cuentas las consideraciones generales se ha de ejecutar el programa con la intención de obtener una malla de ceros y unos que represente la formación morfológica de un MHA [Ver anexo B], recordando que esta se almacena desde el código en un archivo de texto “\*.txt” en la carpeta raíz del programa.

Al ubicar la malla se procede a la construcción de su imagen sintética y esto se realiza mediante el uso de una herramienta digital llamada ImageJ la cual ofrece un entorno aplicado a la generación, visualización, tratamiento y análisis de materiales sintéticos e imágenes experimentales obtenidas por medios visuales (por ejemplo, de microscopio).

En la interfaz de inicio de ImageJ se ha de realizar el inicio de la imagen virtual a partir de ingresar el archivo “mallacheq.txt”importándolo como un archivo de imagen de texto como se observa en la imagen 3.12.

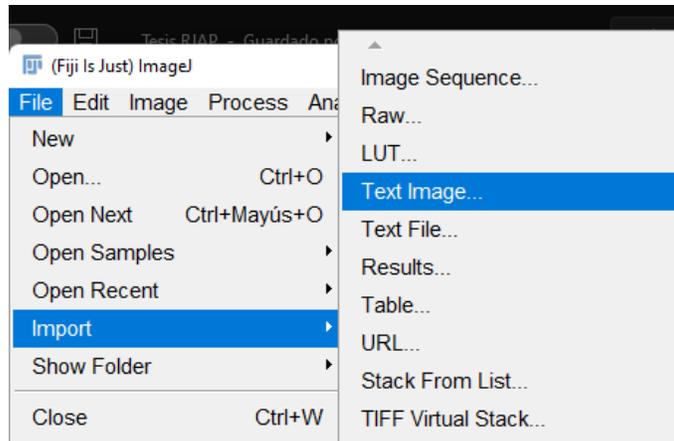


Figura 3.12. Importación de archivo de imagen de texto.

Una vez importado el archivo de texto se ha obtenido una imagen virtual sintética con la que gracias al uso de la herramienta ImageJ es posible procesar su forma y que mediante la cual se pueden describir los valores previamente determinados y el comportamiento de las variables definidas a partir de las condiciones iniciales de frontera como se puede apreciar en la imagen 3.13.

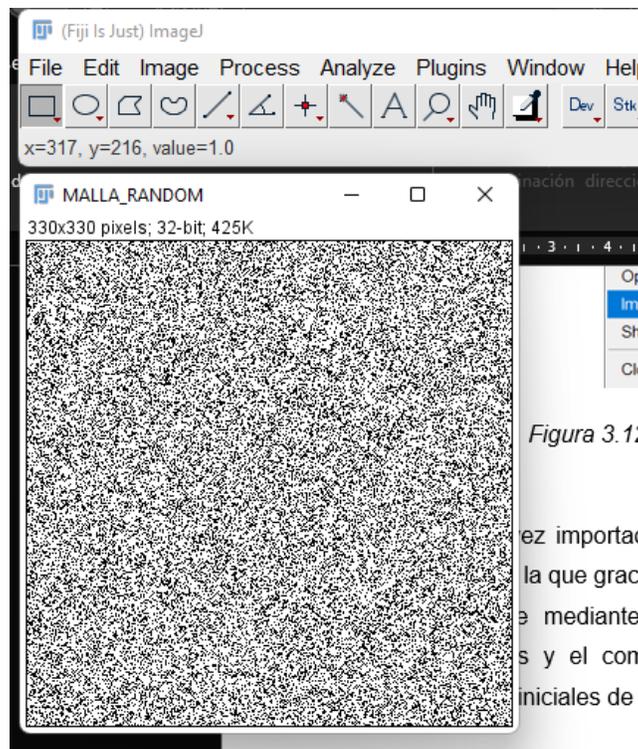


Figura 3.12.

ez importad  
la que graci  
e mediante  
s y el comj  
iniciales de fi

Figura 3.13. Imagen sintética generada a partir del archivo de imagen de texto.

## CAPÍTULO 4. RESULTADOS.

Este capítulo muestra los resultados de la tesis, los casos de estudio fueron seleccionados y acotados para cumplir con el objetivo general de la tesis, se debe mencionar que las preguntas de estudio al final de la tesis son mayores que al inicio. Se presenta, de manera sistemática, para un solo caso de estudio ( $PHI=0.5$ ,  $n=300$ ), la evolución del comportamiento de las funciones de correlación, el error entre las funciones de correlación, y la evolución de la eficiencia de conducción. Posteriormente se presenta la comparación de la respuesta del error global normalizado y la eficiencia de conducción de tres pruebas de estudio seleccionadas.

A partir de lo efectuado en el proceso de análisis de este trabajo de tesis de licenciatura el proceso consiste en que mediante una serie de pruebas se analice el comportamiento y el cambio del valor de EFFFF\_NAFION (eficiencia de conducción) respecto a PHI (pureza del material conductor) es por ello que a partir del algoritmo y el programa ejecutable es posible verlo como un proceso de diseño mediante el cual es posible definir las condiciones mediante las cuales se conforme la propiedad general de ciertas cualidades como la temperatura, conductividad y extensión del material estocástico aleatorio y que varían en función de la dirección en que son propiamente analizadas.

El sistema inicial se basa generando una malla donde se han asignado un conjunto de semillas (de un píxel) en una posición aleatoria desde el origen de la matriz, el propósito consiste en una distribución aleatoria de cada píxel el dominio de una matriz cuadrada de N por N elementos de extensión en donde la propuesta de aplicación realizada ha sido sencilla y eficiente, ya que, basándose en la información proporcionada por el usuario colocando la pureza de la fase del material en el diagrama y formulando cambios en la microestructura es posible aumentar o disminuir su eficiencia de transporte o conducción.

## Análisis de imágenes sintéticas del algoritmo de proceso general.

Se generaron imágenes sintéticas, del procesamiento de la información del algoritmo realizado, es posible tener noción real y dimensional del elemento que se está analizando mediante métodos de reconstrucción y análisis de imágenes virtuales. La tabla 4.1 muestra las dimensiones del dominio de cómputo de la generación del material estudiado y las pruebas más sobresalientes que se le realizaron con las condiciones iniciales efectuadas en este, a partir de la exigencia computacional en los ciclos total de convergencia, tomando en cuenta que estas han sido realizadas en valores diferentes de pureza del material siendo de 0.2 a 0.8.

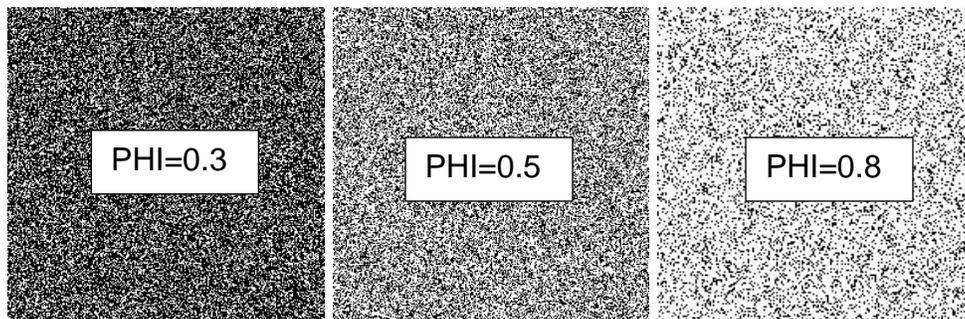
*Tabla 4.1. Dimensión de dominio computacional y condiciones de funcionamiento del algoritmo en distintas pruebas.*

<b>Muestra</b>	Extensión del material.	Pureza de fase.	Ciclos máximos de convergencia
P1	90,000	0.2-0.8	300,000
P2	90,000	0.2-0.8	500,000
P3	90,000	0.2-0.8	1,000,000

Las pruebas realizadas, siendo una prueba por cada coeficiente de pureza de fase que va de 0.2 a 0.8 en intervalos de 0.1, realizando el mismo procedimiento en cambios de ciclos máximos de convergencia de 300,000; 500,000 y 1,000,000; siendo en total de 21 pruebas que han sido efectuadas en un elemento de una extensión total de 90,000 pixeles en dimensiones, dadas de 300 X 300 elementos en sus vertientes  $N_x$  y  $N_y$ , siendo este el valor de extensión que ha guardado un comportamiento más uniforme en los instantes que se requiere cambios del esfuerzo computacional como en la generación de las mallas que nos brindan las imágenes virtuales correspondientes y mediante las cuales el ordenador utilizado para estas no es forzado a utilizar todos los recursos con los que cuenta en una tarea que resulta ser más compleja que eficiente partiendo las bases por las cuales se rige el presente trabajo de tesis.

Básicamente se ha requerido de un conjunto de muestras propuestas que se diferencian en la cantidad de esfuerzo computacional por el número de ciclos máximos para poder oscilar en un valor cercano a la convergencia del elemento siendo valores de CEM (Ciclos Energéticos Máximos) la cantidad de veces que se ha de procesar (como se presenta en el capítulo 3 donde se muestra el algoritmo realizado), mediante el análisis de la malla obtenida, el total de imágenes sintéticas obtenidas se pueden visualizar en el ANEXO F.

El valor final de eficiencia de transporte del elemento que se está manipulando conforme a la extensión brindada previamente, teniendo en cuenta que cada una de las muestras contiene pruebas en valores diferentes de pureza (PHI) que van desde 0.2 hasta 0.8 en intervalos de 0.1 (siendo estos los valores que proponen datos de eficiencia, conducción y distribución de temperatura reales y que cumplen los parámetros propuestos en las ecuaciones vistas en el capítulo 2).



*Figura 4.1. Resultados de imágenes sintéticas obtenidas en las diversas pruebas realizadas con los valores de fase más destacados (donde los puntos negros representan huecos o poros y los blancos muestran la presencia del elemento).*

En el capítulo previo se han expresado las bases y los fundamentos por los cuales se rigen los sistemas de simulación estocásticos presentes en este trabajo de tesis por lo que resulta factible el análisis del conjunto de pruebas realizadas en las 3 muestras correspondiente a cada una, siendo estas las más destacadas.

Como se puede apreciar en la figura 4.1, se han presenta pruebas en donde la delimitación general que las diferencia es la cantidad de veces que se procesará

la malla que se genera al ejecutar el algoritmo según la fase y la extensión del elemento y esto radica en la forma específica de distribuir los poros y las partículas del elemento debido a que todos estos muestran un número similar de presencia de poros y partículas en cada una de las muestras correspondiente donde se comparten los valores de fase.

La figura 4.1 en la primera prueba presenta un análisis visual del comportamiento regular de un material conformado por 90,000 elementos. Esto supone una prueba con menor exigencia computacional en donde es posible visualizar que respectivamente en las muestras de fase de 0.2 y 0.5 se aprecia una distribución de poros más densa. Suponiendo que la unión entre partículas es menor y una menor presencia de blancos que por ejemplo con la fase de 0.8, mostrando así un comportamiento de distribución de poros más abierta y que por lo tanto muestre una eficiencia de conducción menor en comparativa y dejando a interpretación que se perciba una diferencia mayor en la cantidad de blancos y poros de la que realmente hay respecto a sus homólogas en las siguientes pruebas.

La prueba expone una diferencia abierta a lo presentado en casos previos ya que presenta un valor de CEM de 1,000,000 suponiendo un esfuerzo computacional un tanto más alto en comparativa a las primeras pruebas. Por lo que la imagen sintética obtenida con valor de fase de 0.2 (vista en la figura 4.1) que, virtualmente presume la distribución más uniforme de poros y partículas de las tres pruebas. A simple vista se puede apreciar que existe una mayor cantidad de sólido que de poros y con ello una mayor eficiencia de conducción que la planteada en el algoritmo y no como se presenta en la prueba número 1.

En el caso de la muestra número 2 con un PHI de 0.5 modela una imagen diferente a las primeras dos pruebas realizadas ya que en este caso se aprecia una distribución de poros un tanto más diferente simulando tener una mayor cantidad de partículas que de poros en relación a los casos anteriores siendo esta inferencia descartable debido a que la cantidad de poros en la tercera prueba no tiene una variación tan considerable al igual que la misma no define porqué la imagen se muestra con dicho contenido diferente a las anteriores y con eficiencia desigual.

Finalmente se presenta el caso con un valor de fase de 0.8 y que en las tres pruebas mostró un comportamiento mucho más uniforme y relativamente menos variado ya que tanto en la última como en la primera prueba esta muestra fue prácticamente una misma distribución de blancos que de poros teniendo como principal factor de causa que, desde un principio y en la definición de condiciones del algoritmo se predispuso que tanto la cantidad de blancos como la eficiencia serán superiores ya que es sumamente cercano al valor unitario y por tanto la pureza del material será mucho mayor y superior, dando pauta a que se defina que la cantidad de partículas y poros en el elemento y la extensión del mismo (que es la misma) sean muy similares con una varianza en su contenido virtualmente despreciable.

#### Obtención de la eficiencia general de transporte del algoritmo de proceso general.

La presente sección muestra el análisis de los resultados obtenidos a partir de las pruebas realizadas mediante la manipulación de las principales variables presentes en el proceso metodológico es, a partir de esta premisa en donde se desempeñan los resultados finales gráficamente expuestos.

A continuación, se exponen las simulaciones realizadas como resultados ante las pruebas de funcionamiento y desempeño del algoritmo realizado. Los resultados de la tabla 4.2 son los valores más relevantes del presente trabajo de tesis de licenciatura.

*Tabla 4.2. Valores de eficiencia en pruebas y casos de pureza.*

PHI	EFFFF_NAFION (%)		
	P1	P2	P3
0.2	0.016	0.025	0.009
0.3	3.39	4.28	5.1
0.4	11.22	12.5	12.98

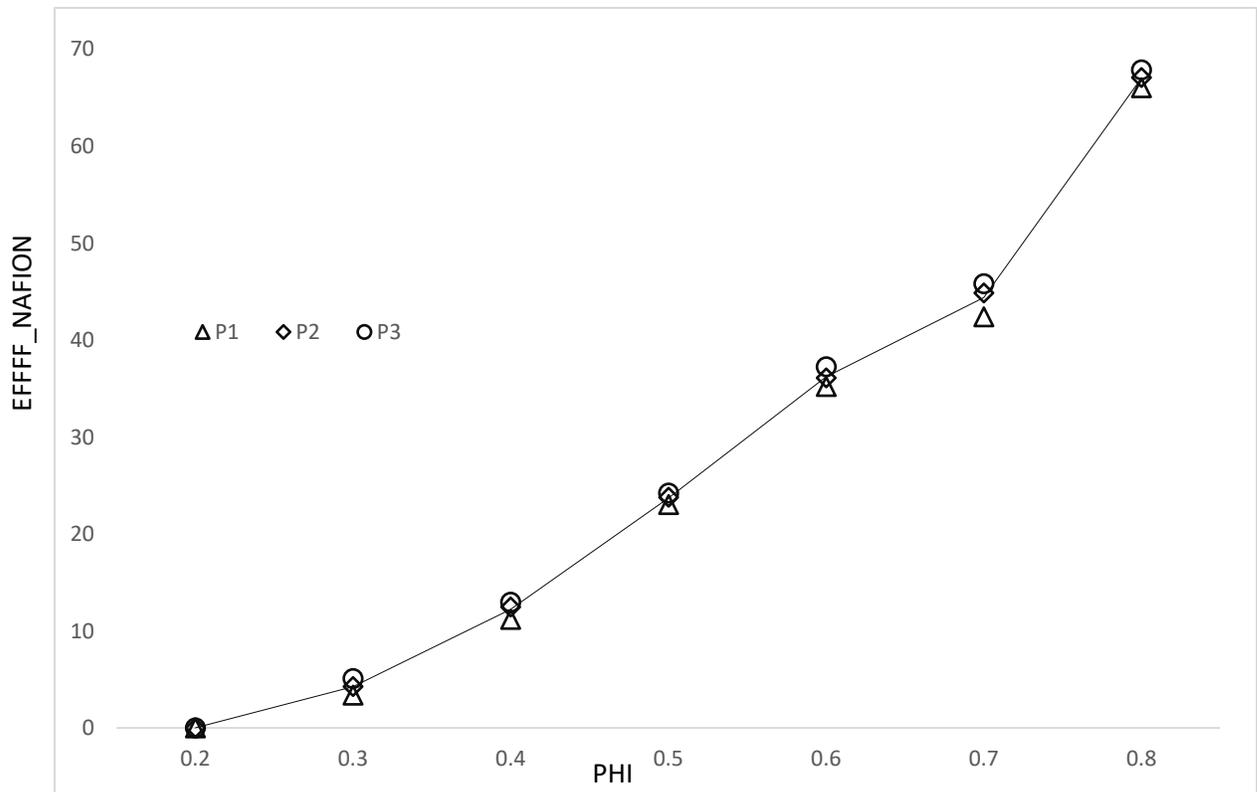
0.5	23.06	23.81	24.26
0.6	35.25	36.12	37.26
0.7	42.42	44.89	45.84
0.8	66.07	67.11	67.89

La tabla 4.2 muestra los valores de eficiencia obtenidos a partir de la realización de una variedad de pruebas a través de las cuales se realizó una comparativa entre cada una exponiendo diversos resultados que básicamente exponen el comportamiento de las ecuaciones de transporte vistas en capítulo 2 y aplicadas en el algoritmo correspondiente al capítulo 3.

Los resultados se expresan mediante un marco de presentación que inicia con la muestra de pureza de fase propuesta en 0.2 utilizada con dimensiones de 300 píxeles por lado (siendo 90,000 píxeles presentes) demostrando valores sumamente bajos de eficiencia de transporte, por lo que considerar un valor menor a la cifra mínima electa expondría un valor despreciable y que no radica al igual que afecte en importancia al considerar herramientas estadísticas que describan el comportamiento del conjunto de datos.

Cabe destacar que el valor de fase del límite superior para el análisis realizado fue tomado bajo diversas pruebas y cuyo valor es de 0.8, siendo este el que cumple las condiciones de pruebas experimentales vistas en las fuentes investigadas y que se aproxima a valores reales.

Es entonces que, con el límite establecido en pruebas que va desde los 0.2 hasta los 0.8 es que es plausible realizar un análisis más certero y preciso respecto a las muestras que se visualicen en el comportamiento a analizar en el gráfico 4.1.



*Gráfico 4.1. Comportamiento de las eficiencias obtenidas a partir de pruebas realizadas bajo distintos niveles de pureza de fase del material propuestos en el algoritmo.*

El gráfico 4.1 describe el comportamiento visual de los datos a partir de la realización de diversas pruebas estipulando un conjunto límite de valores propuestos experimentalmente y así que dicha grafica fue obtenida.

Los ensayos realizados presentan que con un valor de fase de 0.2 es posible obtener valores de eficiencia totalmente despreciables que con el valor medio arroja en todas las pruebas que está por debajo de un valor unitario siendo esto que la eficiencia es prácticamente nula.

Posteriormente se tiene el valor de prueba de pureza de fase de 0.3 que es perceptible en valores enteros no muestra un cambio radical en relación con el valor promedio anterior y que es posible apreciar en la figura 4.1 de imágenes sintéticas más destacas obtenidas a partir de pruebas, donde a percepción visual es

apreciable que dicha figura demuestra que está mucho más conformada por poros que de contenido del MHA y por lo tanto que el grado de eficiencia es muy bajo.

Ahora bien, los valores de fase expuestos en 0.4 y 0.5 proponen un crecimiento bastante considerable a los valores previamente mencionados, debido a que existe cierta diferencia abierta entre cada uno de estos, siendo un promedio de 12.23% de eficiencia en el caso de pureza de 0.4 y de 23.71% de eficiencia en el caso medio de pureza en el material (de 0.5) además que es posible visualizar su imagen sintética en donde se puede apreciar el cambio con relación a la vista con pureza de fase de 0.3, ya que es perceptible la presencia de más moléculas del material y menos presencia de poros (mencionando que ambas simulaciones contienen el mismo número de elementos de 90,000).

Seguidamente se tienen los valores medios de pureza de 0.6 y 0.7 donde se obtienen crecimientos más uniformes como se ha visto en los valores previos (0.4 y 0.5) siendo estos de 36.21 y de 44.23 respectivamente, cabe señalar que en este caso en específico es donde se presentó la diferencia más grande entre pruebas, destacando que, básicamente el comportamiento en este valor de fase fue un tanto más impredecible a comparación de los datos previos.

Finalmente se expone el análisis del algoritmo y el valor de eficiencia final con un PHI de 0.8 del valor unitario, mostrando con su valor promedio el cambio más abrupto del gráfico obtenido a partir de las muestras obtenidas en las diversas condiciones de frontera dadas, dando como promedio un valor de 67.02% de eficiencia de transporte obteniendo una diferencia del 22.79% en comparativa al valor medio del caso de PHI de 0.7, demostrando que a partir de una diferencia de un decimal en el caso de estudio presente en el algoritmo puede generar una diferencia considerable en cuanto al modelado de una imagen virtual y los efectos de las condiciones de frontera en el algoritmo realizado, además es de analizar la imagen sintética obtenida y compararla con sus homologas, ya que esta presume una presencia muchísimo más notoria del MHA con una distribución más uniforme de los poros permitiendo así tener la concordancia clara de la eficiencia en relación a su imagen virtual obtenida.

Valores posteriores al final de 0.8, rompen las estipulaciones básicas del algoritmo y su alcance, ya que, en el caso de manipular este con valores superiores nos arroja eficiencias poco certeras y precisas que incluso superan significativamente una eficiencia del 100%, dando como resultado valores erróneos y que carecen de credibilidad.

## Conclusiones generales y discusión de los resultados.

A lo largo del desarrollo de la presente tesis, el conocimiento que se adquirió en los diferentes capítulos se enfoca principalmente en la materialización de la herramienta computacional, debido a ello, se presenta una serie de conclusiones generales que recaban la retroalimentación completa de dicha tesis.

La revisión minuciosa del estado del arte permitió visualizar el panorama teórico a lo largo del tiempo sobre el estudio de la microestructura de los materiales. La importancia de haber recabado y comprendido los estudios previos referentes a la reconstrucción y análisis de sistemas aleatorios aplicados a la energía, otorgaron una visión de desarrollo clara y precisa, y de la misma manera, brindaron la oportunidad de identificar opiniones con tendencia a la mejora, con la respectiva adquisición de nuevos puntos de vista que fueron sumamente importantes al abordar las soluciones a los debidos objetivos que se presentaron. Respectivamente, se analizó en la bibliografía correspondiente y en trabajos de investigación de diferentes autores un análisis científico que proporciona diferente información al proceso de reconstrucción estocásticas con la finalidad de tener los conocimientos básicos antes de abordar temas específicos de software, permitiendo conocer el mejor rumbo existente entre las características de las distintas competencias y disciplinas que intervienen en dicho proceso.

En esta tesis de licenciatura, se presenta una introducción, detalles numéricos del modelado, las ecuaciones y el código de cómputo realizado para

determinar la eficiencia de conducción de materiales heterogéneos aleatorios, enfatizando el carácter investigativo y de desarrollo numérico y analítico de los MHA.

El código, ejecutado en el entorno de programación de CODEBLOCKS y manipulando sintaxis de lenguajes primos como lo son C y C++, exponiendo paso por paso las ecuaciones revisadas en el capítulo 2 y ejecutadas al igual de ser propiamente efectivas en el capítulo 3, exponiendo su solución, muestra que es un método determinista, lo cual quiere decir que solo hay una solución posible.

El resultado principal es una herramienta de cómputo, en la cual se pueden identificar mejoras, pero la cual ha sido validada con otra herramienta preliminar que nos muestra una caracterización de eficiencia de conducción sistemática. Se implementaron las funciones de correlación de dos puntos (FS2) y de camino lineal (FLP) iterando renglón por renglón y columna por columna para el análisis en el eje "Y" y "X", respectivamente.

El resultado más relevante es que el nuevo código propuesto fue validado con los resultados preliminares. Teniendo como resultados promedio en la eficiencia de conducción:  $EFF = 0.01 @ PHI = 20\%$ ,  $EFF = 4.3 @ PHI = 30\%$ ,  $EFF = 12.2 @ PHI = 40\%$ ,  $EFF = 23.7 @ PHI = 50\%$ ,  $EFF = 36.2 @ PHI = 60\%$ ,  $EFF = 44.4 @ PHI = 70\%$  y  $EFF = 67.0 @ PHI = 80\%$ .

Exponiendo cada uno de los capítulos presentados se puede obtener que la conclusión más importante, que valida el cumplimiento del objetivo general, es que se ha realizado el algoritmo que demuestre resultados importantes en el estudio de las ecuaciones de correlación y la obtención de una eficiencia en función de la proporción de un conjunto de condiciones iniciales de frontera y delimitación propia que exponga las características principales de un material heterogéneo estocástico y la relación entre una malla aleatoria que mediante el uso de herramientas computacionales nos proporciones dicha correspondencia entre el orden de los poros y moléculas del elemento y los resultados de su eficiencia de transporte final.

Las principales perspectivas para trabajos futuros son: detallar los cambios del comportamiento entre los ejes del dominio, implementar un sistema de error en

el algoritmo que permita calcular la capacidad analítica de este entre funciones de correlación para cuantificar un desorden entre partículas del elemento, aumentar el nivel de análisis de la eficiencia de conducción para relacionarla analíticamente con el coeficiente efectivo de transporte determinado con la simulación numérica con volúmenes de control finitos, obtener un modelo analítico de la magnitud de la eficiencia con las funciones de correlación, estudiar diferentes modelos propuestos en la literatura mediante la variación de las posibles geometrías desordenadas.

## REFERENCIAS.

- [1] William D. Callister Jr. Ciencia e Ingeniería de los Materiales. Ed. AO.
- [2] Andrews, J. and Shabani, B. Re-envisioning the role of hydrogen in a sustainable energy economy. *Int. J. Hydrogen Energy* (2012) in press.
- [3] Blanco L., Producción de biohidrógeno a partir de residuos mediante fermentación oscura: una revisión crítica (1993-2011), *Ingeniare, Revista chilena de ingeniería*, 20(3), 398-411. (2012).
- [4] Spiegel C., PEM Fuel Cell Modeling and Simulation Using MATLAB, Primera ed., Oxford:Academic Press, 2008.
- [5] K. Bennaceur, F. M. Orr, T. S. Ramakrishnan, C. Roulet, and E Stout. El hidrógeno: Un futuro portador energético. *El hidrógeno: Un futuro portador energético*, 2005.
- [6] Snarskii A., et. al., Transport Processes in Macroscopically Disordered Media: From Mean Field to Percolation, Primera Ed., Springer Verlag, New York, 2016.
- [7] Jieqing Gan, Zongyan Zhou, Yu. Aibing, Effect of particle shape and size on effective thermal conductivity of packed beds, *Powder Technol*, 2017.
- [8] Alireza Akhgar, Davood Toghraie, An experimental study on the stability and thermal conductivity of water-ethylene glycol/TiO<sub>2</sub>-MWCNTs hybrid nanofluid: developing a new correlation, *Powder Technol*, 2018.
- [9] Ouyanga, Design of network Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> spheres for significantly enhanced thermal conductivity of polymer composites, *Comp. A* 128 (2020) 105673.
- [10] Y. Ouyang, G. Hou, L. Bai, B. Li, F. Yuan, Constructing continuous networks by branched alumina for enhanced thermal conductivity of polymer composites, *Compos. Sci. Technol.* 165 (2018) 307–313.

- [11] Jingjing Liu, et al., Enhanced mechanical properties and decreased thermal conductivity of porous alumina ceramics by optimizing pore structure, *Ceram. Int.* 44 (2018) 13240–13246.
- [12] D. A. Coker y S. Torquato, “Extraction of morphological quantities from a digitized medium,” *Journal of Applied Physics*, vol. 77, pags. 6087–6099, jun. 1995.
- [13] Barbosa Romeli, J. Andaverde, B. Escobar, U., Cano. Stochastic reconstruction and a scaling method to determine effective transport coefficients of a PEMFC catalyst layer, *J. Power Sources* 196 (2011) 1248–1257.
- [14] Barbosa Romeli, B. Escobar, U. Cano, J. Ortegón, V. Sánchez, Multiscale relationship of electronic and ionic conduction efficiency in a PEMFC catalyst layer, *Int. J. Hydrog. Energy* 41 (2016) 19399–19407.
- [15] Salvatore Torquato, *Random Heterogeneous Materials*, Springer-Verlag New York, Inc., Estados Unidos de América, 2002.
- [16] Lee H.K., A study on the characteristics of the diffusion layer thickness and porosity of the PEMFC, *J. Power Sources*, 2004.
- [17] Nam J.H., Microporous layer for water morphology control in PEMFC, *J. Heat and Mass Transfer*, 2009.
- [18] Lee J.S., *Ionic Liquid Composite Polymer Electrolyte Membranes for the Unhumidified Intermediate Temperature Fuel Cell*, 2006.
- [19] Kreuer K.D. On the development of proton conducting polymer membranes for hydrogen and methanol fuel cells. *J. Membrane Sci.* (2001) 185: 29-39.
- [20] Stumper J. and Stone C. Recent advances in fuel cell technology at Ballard. *J. Power Sources*, 2008.
- [21] Peighambardoust S.J., et al. Review of the proton exchange membranes for fuel cell applications. *Int. J. Hydrogen Energy*, 2010.
- [22] Torquato S. “Theory of random heterogeneous materials”. *Handbook of Materials Modeling*, USA, Springer (2005).

[23] Versteeg H. K. and Malalasekera W. An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method Approach, Longman Scientific & Technical, UK. (1995).

[24] Patankar S.V. Numerical heat transfer and fluid flow. USA, McGraw Hill (1980).

[25] Escobar B., Simulated annealing and finite volume method to study the microstructure isotropy effect on the effective transport coefficient of a 2D unidirectional composite, Materials today communications 24 (2020) 101343.

## ANEXO A: CÓDIGO GENERADO

```
1 #include <stdio.h>
2 #include <stdlib.h>
3 #include <math.h>
4
5 int
6 i,j, nx, ny, Conclude, CUENTA, CCDELTA, CICLOSENERMAXIMOS=1000000, VCT
7 ,vBlanco=1, bt;
8
9 double
10 Tem1, Tem2, sumacond, random, negro=0.0, PHI=0.5, VCBlanco,
11 Tinit, Converge_NUM=0.00000001, DELTA, Te, Tw, Tn, Ts, Tt, Tb, Val_FronteraTOP=10,
12 Val_FronteraBOTTOM=0.1, DTemp,KK, calor_flux_K, Kconduce=10000000, Kaislante=0.0000001,
13 PROMDELTA, SUMADELTA, EFFFF_NAFION, SUMA_EN_K, CCSUMA_EN_K;
14
15 unsigned long int VCiProp [1010][1010];
16
17 double
18 Told [1010][1010], Tnew [1010][1010], con [1010][1010],Ke [1010][1010],
19 Kw [1010][1010], Kn [1010][1010], Ks [1010][1010];
20 /*+++++*/
21 FILE
22 *DATOSGEN_CAL_RES, *DATOSGEN_eff, *DATOSGEN_TEM_Blanco, *CHEQ, *Dat;
23
24 //$$$char nombre_MALLA2D [30];/*Primer Caracter del nombre del archivo Nodos*/
25 /*+++++*/
26 main(){
27 srand(time(NULL)); /*La función srand establece el punto de partida para generar una
28 serie de enteros pseudoaleatorios en el subproceso actual*/
29
30 /*LECTURA DE DATOS PARA DEFINICIÓN DE MALLA*/
31
32
33 printf ("\n\nLeyendo Archivo\t->");
34 /*Leer el archivo con la malla de volúmenes de control finitos*/
35 printf ("\nescribir la dimensio'n de la malla (nx)\t");
36 scanf ("%d",&nx);
37 ny=nx;
38 VCT=nx*ny;
39 VCBlanco=PHI*VCT;
40
41
42 for (int j=1; j<=ny; j++){
43 for (int i=1; i<=nx; i++){
44 random=VCT * rand() / 32767;
45 if (random <= VCBlanco){VCiProp[i][j]=vBlanco;
46 bt++;}}
47
48 /*Imprime malla leida*/
49 CHEQ= fopen ("mallacheq","wt");
50 for (j=1; j<=ny; j++) {
51 for (i=1; i<=nx; i++){
52 fprintf (CHEQ, "%d\t", VCiProp[i][j]);}
53 fprintf (CHEQ, "\n");}
54 close (CHEQ);
55
56 Dat=fopen ("SUSTRATO_GENERADO","r");
57 for (j=1; j<=ny; j++) {
58 for (i=1; i<=nx; i++){
59 fscanf (Dat, "%d", &VCiProp[i][j]);}}
60 close (Dat);
61
62 /*+++++*/
63 printf ("\nProcesando la ecuacion de transporte de carga en fase 1");
64
65 /*ASIGNA CONDUCTIVIDAD DE ACUERDO CON LA FASE*/
```

```

66 for (j=1; j<=ny; j++) {
67 for (i=1; i<=nx; i++) {
68 if (VCiProp [i][j]==1){
69 con[i][j]=Kconduce;}
70 else{con[i][j]=Kaislante;} }}
71
72 /*PERFIL INICIAL DE TEMPERATURAS*/ //las inicia con la distribución lineal desde top a
bottom*/
73 Tinit=0.5;
74 for (j=1; j<=ny; j++) {
75 for (i=1; i<=nx; i++) {
76 Told [i][j]=Tinit;} }
77
78 CHEQ= fopen ("Tinicial","wt"); for (j=1; j<=ny; j++) {
79 for (i=1; i<=nx; i++){
80 fprintf (CHEQ, "%f\t", Told[i][j]);}
81 fprintf (CHEQ, "\n");} close (CHEQ);
82
83 //cond media y condiciones de frontera
84 for (j=1; j<=ny; j++) {for (i=1; i<=nx; i++) {
85 Ke[i][j]= (2*con[i][j] * con[i+1][j] ) / (con[i][j] + con[i+1][j] );
86 Kw[i][j]= (2*con[i][j] * con[i-1][j] ) / (con[i][j] + con[i-1][j] );
87 Kn[i][j]= (2*con[i][j] * con[i][j+1] ) / (con[i][j] + con[i][j+1] );
88 Ks[i][j]= (2*con[i][j] * con[i][j-1] ) / (con[i][j] + con[i][j-1] );
89 if (i==nx) {Ke[i][j]=0; }
90 if (i==1) {Kw[i][j]=0; }
91 if (j==ny) {Kn[i][j]=4*con[i][j];
92 Tnew[i][j]=Val_FronteraTOP; }
93 if (j==1) {Ks[i][j]=4*con[i][j];
94 Tnew[i][j]=Val_FronteraBOTTOM; }
95 }}
96
97 do{ CUENTA++;
98 //SULUCIÓN ARISTA OESTE
99 for (i=1, j=2; j<=nx-1; j++){
100 sumacond=Ke[i][j]+Kn[i][j]+Ks[i][j];
101 Tnew[i][j]=((Ke[i][j]*Told[i+1][j])+(Ks[i][j]*Told[i][j-1])+(Kn[i][j]*Told[i][j+1]))
102 / sumacond;}
103 //SULUCIÓN ARISTA ESTE
104 for (i=nx, j=2; j<=nx-1; j++){
105 sumacond=Kw[i][j]+Kn[i][j]+Ks[i][j];
106 Tnew[i][j]=((Kw[i][j]*Told[i-1][j])+(Ks[i][j]*Told[i][j-1])+(Kn[i][j]*Told[i][j+1]))
107 / sumacond;}
108 //SULUCIÓN CENTRALES
109 for (j=2; j<=ny-1; j++){for (i=2; i<=nx-1; i++){
110 sumacond=Ke[i][j]+Kw[i][j]+Kn[i][j]+Ks[i][j];
111 Tnew[i][j]= ((Ke[i][j]*Told[i+1][j])+(Kw[i][j]*Told[i-
112 ]][j])+(Kn[i][j]*Told[i][j+1])+(Ks[i][j]
113 ]*Told[i][j-1])
114 ) / sumacond;
115 }}
116
117 /*CÁLCULO DE la diferencia de Temperatura*/
118 CCDELTA=0; DELTA=0; SUMADELTA=0;
119 for (j=1; j<=ny ; j++){for (i=1; i<=nx; i++){
120 DELTA=Tnew[i][j]-Told[i][j]; if (DELTA<0){DELTA=DELTA*-1.0;}
121 CCDELTA++; SUMADELTA=SUMADELTA+DELTA;
122 }} PROMDELTA=SUMADELTA/CCDELTA;
123 if (CUENTA%5000==0) printf ("\nIteracion=%d--Residual_s=%f", CUENTA, PROMDELTA*100);
124
125 /*ACTUALIZA la temperatura*/
126 for (j=1; j<=ny; j++){
127 for (i=1; i<=nx; i++){
128 Told[i][j]=Tnew[i][j];}}
129
130 if (PROMDELTA<=Converge_NUM || CUENTA>=CICLOSENERMAXIMOS) {
131 Conclude=1;

```

```

132 }else {
133 Conclude=0;}
134
135
136 }while(Conclude==0); //CONVERGENCIA
137
138
139
140 DATOSGEN_TEM_Blanco= fopen ("Tem_solution","wt");
141 for (j=1; j<=ny; j++){
142 for (i=1; i<=nx; i++){
143 fprintf (DATOSGEN_TEM_Blanco, "%f\t ", Tnew[i][j]);
144 if (j==1){Tem1=Tnew[i][j];}
145 if (j==ny){Tem2=Tnew[i][j];}
146 }fprintf (DATOSGEN_TEM_Blanco, "\n");}
147 close (DATOSGEN_TEM_Blanco);
148
149
150
151 printf ("\nCET...");
152
153 calor_flux_K=0; SUMA_EN_K=0; CCSUMA_EN_K=0;
154
155 for (j=1; j<=ny; j++){
156 for (i=1; i<=nx; i++){
157
158 KK = (2*con[i][j] * con[i][j+1] ) / (con[i][j] + con[i][j+1] );
159 DTemp=Tnew[i][j]-Tnew[i][j+1];
160 calor_flux_K=calor_flux_K+(KK *DTemp*1.0); /*SUMATORY--> amp/(A/L)*/
161
162 }CCSUMA_EN_K++;
163 SUMA_EN_K=SUMA_EN_K+calor_flux_K;
164 calor_flux_K=0; }
165
166 EFFFF_NAFION=(SUMA_EN_K/CCSUMA_EN_K)/Kconduce/(Tem1-Tem2)*100;
167
168 DATOSGEN_CAL_RES= fopen ("CALORFLUX_S_RESUME","wt");
169 fprintf (DATOSGEN_CAL_RES, "\nRANDOM\t\nK\tcalor_flux\n");
170 for (j=1; j<=ny; j++){
171 for (i=1; i<=nx; i++) {
172
173 KK= (2*con[i][j] * con[i][j+1] ) / (con[i][j] + con[i][j+1] );
174 DTemp=Tnew[i][j]-Tnew[i][j+1];
175 calor_flux_K=calor_flux_K+(KK*DTemp*1.0); }
176 fprintf (DATOSGEN_CAL_RES, "%d\t%f\n", j, calor_flux_K); calor_flux_K=0; }
177
178 close (DATOSGEN_CAL_RES);
179
180 DATOSGEN_eff= fopen ("EFF_RESUME","wt");
181 fprintf (DATOSGEN_eff, "\nEficiencia de conduccion=\t%f", EFFFF_NAFION);
182 close (DATOSGEN_eff);
183
184
185 if (EFFFF_NAFION<=1){
186 printf ("\n\nPosible error\n1.-Revisar la dimension de la malla,");
187 printf ("\n2.-Revisar el nombre del archivo, el archivo mallacheq debe ser identico al
archivo malla");
188 printf ("\n3.-Seguir las instrucciones de arriba al pie de la letra");}
189 else {
190 printf ("\nEficiencia de conduccion=\t%f\n ;-)", EFFFF_NAFION);}
191
192 printf ("\n\n\a\a\a\aProceso Concluido ;-);");getch();
193 }

```

## ANEXO B: FRAGMENTO DE MALLA GENERADA.

```

0110101111110011111111110000101101101101101111111101111111011111110010111111101100111110111:
0111011011100111110100011010111111011011110110111001110011101110110011101111110101111111110:
010000101111000011111111111100111101101111011111111001100111000101111111100110111111110101:
1111111101000110111111110111111111111111111111111011111111111110101010111111101111111011101111:
110111101110111101111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111:
101111111011011111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111:
11110111010111101100111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111:
11110011111011111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111:
001011100011011111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111:
11011111111110101111101001011110001111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111:
011011111111100101111101100000111111100001110111111111111111111111111111111111111111111111111:
111111111011001011111011011111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111:
111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111:
111001111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111:
001101001111101111011111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111:
110011101110101111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111:
011111101111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111:
11111010000110001101111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111:
101111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111:
111011111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111:
000111101111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111:
111101111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111:
111010111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111:
010111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111:
110000011011111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111:
110110111011111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111:
111111011111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111:
010110100011111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111:
110111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111:
001011100011111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111:
111011011111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111:
110110111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111:
011101111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111:
111111011111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111:
100101111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111:

```

## ANEXO C: FRAGMENTO DE ARREGLO DE FLUJO DE CALOR POR NODO.

RANDOM	
K	calor_flux
1	-34761230.243821
2	-34761238.504294
3	-34761259.246417
4	-34761295.159270
5	-34761342.827508
6	-34761400.699415
7	-34761462.184933
8	-34761540.812501
9	-34761637.994795
10	-34761748.338487
11	-34761872.273842
12	-34762011.412525
13	-34762164.936131
14	-34762317.174862
15	-34762467.749176
16	-34762640.807544
17	-34762833.507962
18	-34763042.281993
19	-34763268.189195
20	-34763503.616284
21	-34763755.707711



ANEXO F: CONJUNTO DE IMÁGENES SINTÉTICAS OBTENIDAS DURANTE LAS DIVERSAS PRUEBAS.

