

Investigación, vinculación y transferencia

2021 -AÑO 3

Editores:

Cristina Vázquez

Luis Fernández Luco

SUBSECRETARÍA
DE INVESTIGACIÓN,
Y DOCTORADO

Investigación, vinculación y transferencia

| 2021 -AÑO 3

Editores:

Cristina Vázquez

Luis Fernández Luco

Vázquez, Cristina

Seminario de vinculación y transferencia: año 3 / Cristina Vázquez ; Luis Fernández Luco. - 3a ed compendiada. - Ciudad Autónoma de Buenos Aires : Cristina Vázquez, 2022.

Libro digital, DOCX

Archivo Digital: descarga

ISBN 978-987-88-4967-6

1. Ingeniería. 2. Bioingeniería. I. Fernández Luco, Luis. II. Título.

CDD 620.002

ISBN 978-987-88-4967-6



Prefacio

En línea con el espíritu con el que iniciamos estos Seminarios de Vinculación y Transferencia SeVyT organizados por la Subsecretaría de Investigación y Doctorado de nuestra Facultad, nos abocamos a la publicación de las contribuciones recibidas por nuestros doctorandos/as avanzados para nutrir esta tercera edición.

La identificación de aplicaciones concretas, las acciones de vinculación con requirentes de esos conocimientos, la protección del conocimiento a través de patentes, son recursos para incentivar las transferencias e innovaciones tecnológicas, en conformidad con el compromiso permanente de la Universidad para con la Sociedad.

Para ello, estamos convencidos que es necesario visualizar, además de la mirada académica, las posibles aplicaciones de los hallazgos producto de las investigaciones que realizan nuestros futuros doctores/as y esta serie de publicaciones se constituye en el brazo instrumental y facilitador de la universidad para poner en conocimiento de la Sociedad de los conocimientos y tecnologías desarrolladas por sus grupos de investigación.

En esta ocasión y a diferencia de las dos anteriores, los trabajos fueron presentados en el marco del Congreso Argentino de Ingeniería, de modalidad virtual, que reunió en un único evento al 5° Congreso Argentino de Ingeniería (CADI), al 11° Congreso Argentino de Enseñanza de la Ingeniería (CAEDI) y al 3er Congreso Latinoamericano de Ingeniería (CLADI), edición 2021.

Esta decisión permitió una divulgación a nivel latinoamericano de las presentaciones teniendo en cuenta que la concurrencia fue de más de 3600 participantes de 15 países con la presentación de 856 contribuciones en total. El evento se desarrolló del 5 al 7 de octubre de 2021. Este SEVyT, tercera edición, cuenta con 35 trabajos que fueron clasificados en las siguientes áreas: Transferencia Tecnológica, Ciencia de Datos, Materiales, Ambiente, Bioingeniería, Electrónica y Energía.

Esta apertura a otras temáticas cumple con lo anunciado en nuestra edición 2, donde nos propusimos trascender hacia otros ámbitos la asistencia y participación de nuestros futuros doctores/as.

Dra. Cristina Vázquez.

Subsecretaria de Investigación y Doctorado.

Dr. Luis Fernandez Luco.

Secretario de Investigación, Posgrado y Doctorado.

Ambiente

- 1** Cuantificación de incertidumbres en el riesgo de desastres.natural: un enfoque probabilístico.
Balbi Mariano, Bertero Raúl D y Lallemand David C. B.
 - 2** Referencias de tensión/corriente CMOS para sensores de gases.
Cassani María Victoria y Garcia-Inza Mariano.
 - 3** Marcos de referencia geodésicos, un enfoque bayesiano.
Clavijo Javier José y Martínez Julián Facundo.
 - 4** Simulación de desplazamiento agua-petróleo en medios porosos fracturados utilizando OpenFOAM.
Fioroni Soledad, Larreteguy Axel E. y Savioli Gabriela B.
 - 5** Nanopartículas magnéticas para recuperación mejorada en medio poroso 2d.
Fossati Ana B., Roht Yanina L., Ippolito Irene y Jacobo Silvia E.
 - 6** Clasificación de ríos de Argentina utilizando cuantificadores de información.
Suriano Micaela y Caram Facundo Leonidas.
 - 7** Estudio termodinámico del proceso de adsorción de azul de metileno en adsorbente de bajo costo proveniente de la industria algodonera.
Tenev M. D., Torre C., Fontana G. y Boeykens, S.
-

Bioingeniería

- 8** Estudio de transiciones de conciencia utilizando información integrada.
Baglivo F. H., Campora N., Mininni C., Kochen S. y Lew S.
- 9** Estimación rápida de la mediana en tiempo real
Burman A., Bongiovanni C. y Lew S.
- 10** Software para el análisis del mapeo electrocardiográfico.
Caracciolo S. F., Caiafa C. F., Martínez Pería F. D. y Arini P. D.
- 11** Obtención de almidón de maíz entrecruzado con ácido cítrico.
Cavallo E. C., Tupa Valencia M. V. y Foresti M. L.

- 12** Determinación de biomarcadores cerebrales basados en neuroimágenes para la predicción de la efectividad de tratamientos con psilocibina.
Copa D. P., Zanutto S. B. y Tagliazucchi E. R.
- 13** Nuevos parámetros para la detección de isquemias coronarias en electrocardiogramas utilizando EEMD.
Fernández Biscay C., Bonomini M. P. y Arini P. D.
- 14** Modulación de las oscilaciones del sueño por el aprendizaje motor.
Solano A., Riquelme L., Perez-Chada D., Mazzeo J. y Della-Maggiore V.
-

Ciencia de datos

- 15** Minería de datos en ambientes no estacionarios.
Chaure F. J.
- 16** Control por machine learning de la estela de un cilindro.
Roca P. D., D'Adamo J. y Duriez T.
- 17** FaCells. Un estudio exploratorio de capas LSTM en clasificadores de dibujos de caras.
González X. I.
-

Electrónica

- 18** Técnica "Shift-and-Zoom" para la identificación de materiales dieléctricos.
Albert R. y Galarza C.
- 19** Diseño y evaluación de un sistema Ultra-Wideband impulsivo para estimar el contenido de humedad de blancos de poliamida.
Bouza M., Altieri A.O. y Galarza C. G.
- 20** Estudio de arquitecturas digitales para sistemas UWB.
Cervetto M., Marchi E. y Galarza C.
- 21** Generadores de pulsos para electroporación.
Fanego D. A., Tacca H. E. y Olaiz N. M.

- 22** Análisis de oscilaciones forzadas no estacionarias en sistemas eléctricos de potencia aplicando transformada synchrosqueezing.
Gill Estevez P., Galarza C. y Elizondo M.
- 23** Segmentación a partir de la similitud del movimiento.
Luiso J. y Giribet J. I.
- 24** Detección de blancos dieléctricos mediante señales de ultra-wideband.
Marchi E., Cervetto M. y Galarza C.
- 25** Acerca de la necesidad de introducir la enseñanza del cálculo fraccional en el ámbito de la ingeniería argentina.
Salvó G., Piacquadio Losada M. N. y Gun M. C.
- 26** Deconvolución con super-resolución en imágenes de microscopía por superposición de fuentes virtuales.
Toscani M., Lew S., Martínez S. y Martínez O. E.
- 27** Filtrado de señales inmersas en ruido estructurado utilizando redes neuronales.
Pitiddu O. S. y Veiga R. A.
-

Energía

- 28** Análisis del comportamiento de un reservorio shale fracturado hidráulicamente con open porous media.
Aroca Bavich A. C. y Savioli G. B.
- 29** ¿Baterías, GNC, Diesel o Hidrógeno? Cómo comparar tecnologías de buses urbanos usando índices económicos, energéticos y ambientales.
Levitán D., Muñoz P., Franceschini E., Rodríguez C. R., Humana T. y Correa, G.
- 30** Sistema de extracción de litio de salmuera, con electrodos porosos planos: simulación y experimentos.
Romero V. C. E., Tagliazucchi M. y Calvo E. J.
- 31** Efecto del tamaño de partícula en baterías de $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ (LTO)- LiMn_2O_4 (LMO): un estudio de simulación numérica.
Rozenblit A., Torres W. R., Tesio Á. Y. y Calvo E. J.
-

Materiales

- 32** Desarrollo de aleaciones nanoestructuradas a base de aluminio para cojinetes planos.
Lucchetta M., Saporiti F. y Audebert F.
- 33** Simulación termo-mecánica del enderezado en la colada continua: cuantificación del riesgo de falla y comparación con resultados industriales.
Poltarak G. y Ferro S.
- 34** Estudio por técnicas calorimétricas de las transformaciones involucradas en calcogenuros para dispositivos de memoria.
Rocca J. A., Ureña M. A. y Fontana M. R.
-

Transferencias Electrónicas

- 35** Interacciones fluidodinámicas entre pacientes conectados a un dispositivo de ventilación mecánica compartida.
Garcia Eijo P., D'Adamo J., Bianchetti A., Duriez T., Cabaleiro J. M. y Artana G.
- 36** Análisis de estrategias de transferencia tecnológica en Argentina y América Latina.
Willson V., Caracciolo N. y Boeykens S. P.

Cuantificación de incertidumbres en el riesgo de desastres natural: un enfoque probabilístico

Balbi, Mariano^a; Bertero, Raúl D.^a; Lallemand, David C. B.^b

^a *Laboratorio de Dinámica de Estructuras, Facultad de Ingeniería, UBA*

^b *Asian School of the Environment, Nanyang Technological University, Singapore*
e-mail de contacto: mabalbi@fi.uba.ar

Resumen

Hoy en día más de la mitad de la población mundial vive en zonas urbanas debido a su atractiva calidad de vida y oportunidades de desarrollo. Esta concentración creciente de personas e infraestructura eleva el riesgo que enfrentan las sociedades ante la ocurrencia de eventos naturales potencialmente dañinos. Por esto, es importante contar con modelos matemáticos confiables y robustos que permitan, no solo cuantificar el riesgo existente, sino además la incertidumbre asociada a las predicciones realizadas.

En el presente trabajo se propone un marco analítico para un enfoque probabilístico que permita cuantificar la probabilidad de ocurrencia del impacto de fenómenos naturales como inundaciones, huracanes y terremotos, en nuestras ciudades (personas e infraestructura), y que permita además incorporar de manera sistemática e integral las incertidumbres asociadas a los distintos modelos matemáticos necesarios y observaciones empíricas de los fenómenos en estudio. En este sentido, se muestra que se puede definir un marco teórico-analítico común a los distintos fenómenos naturales y distintas disciplinas científicas. El trabajo también indaga sobre el origen de las incertidumbres existentes en los modelos matemáticos, y muestra la importancia que tienen en un contexto de toma de decisiones con información incompleta.

Abstract

As of today, more than half of the world's population lives in urban areas due to their attractive quality of life and development opportunities. This increasing concentration of people and infrastructure increases the risk that communities face upon the occurrence of potentially damaging natural events. For this reason, it is important to have reliable and robust mathematical models that allow, not only to quantify the existing risk, but also the uncertainty associated with the predictions made.

In the present work, an analytical framework is proposed for a probabilistic approach that allows quantifying the probability of occurrence of the impact of natural phenomena such as

floods, hurricanes, and earthquakes, in our communities (people and infrastructure), and that also allows to systematically incorporate the uncertainties associated with the different mathematical models and empirical observations of the phenomena under study. In this sense, it is shown that a common theoretical-analytical framework can be defined for the different natural phenomena and different scientific disciplines. The work also investigates the origin of the existing uncertainties in mathematical models and shows the importance they have in a decision-making context with incomplete information.

Palabras clave: Riesgo, Desastres naturales, Modelos probabilísticos, Incertidumbres

Introducción

En el último siglo, la población mundial mostró una clara tendencia a desplazarse hacia los centros urbanos. En el año 2008 se logró un hito notable en términos de planificación y desarrollo sostenibles: la mitad de la población mundial vive ahora en ciudades. Esto tiene varias implicancias en términos de acceso a recursos, calidad de vida y, también, en la gestión de riesgos y desastres. Además, se espera que esta tendencia continúe en el tiempo (para el 2050, se espera que el 70% de la población viva en asentamientos urbanos) acentuando sus beneficios y problemas [1].

Una de las desventajas de la concentración de personas e infraestructura en áreas relativamente pequeñas es que aumenta la exposición a los desastres y, por lo tanto, el riesgo. Diferentes formas de comprender, cuantificar y responder a este riesgo es una tarea que la humanidad ha abordado desde la antigüedad [2], y surgen nuevos desafíos en el presente por la forma en continua evolución en la que los humanos vivimos e interactuamos con el medio ambiente. En este sentido, la evaluación del riesgo y la gestión de los centros urbanos ante las amenazas naturales se convierte en una tarea crítica en la ingeniería civil y la planificación urbana sostenible.

Según la definición del diccionario de Oxford, riesgo es la "posibilidad o posibilidad de peligro, pérdida, lesión u otras consecuencias adversas". En el contexto de los desastres humanos, la Oficina de las Naciones Unidas para la Reducción del Riesgo de Desastres (UNISDR) define el riesgo como "La posible pérdida de vidas, lesiones o activos destruidos o dañados que podrían ocurrirle a un sistema, sociedad o comunidad en un período específico. de tiempo, determinado probabilísticamente en función de la amenaza, la exposición, la vulnerabilidad y la capacidad ". Por lo tanto, el análisis de riesgo puede desempeñar un papel importante en el esfuerzo por reducir el impacto de los peligros naturales en las sociedades humanas, al generar información valiosa que, en última instancia, puede ser utilizada en el proceso de toma de decisiones.

En este sentido, un informe del Banco Mundial [3] identifica cinco áreas clave en el proceso de decisión para la gestión de desastres, donde la evaluación del riesgo tiene un rol clave: identificación del riesgo, mitigación del riesgo, preparación, protección financiera y construcción resiliente. Como claramente mencionan en su reporte: "La información sobre riesgo proporciona una base fundamental para gestionar el riesgo de desastres en una amplia gama de sectores. En el sector de seguros, la cuantificación del riesgo ante desastres es fundamental, dado que la solvencia financiera de la mayoría de las compañías de seguros está fuertemente influenciada por su exposición al riesgo de catástrofes naturales. En el sector de la construcción, la cuantificación del riesgo esperado en la vida útil de un edificio, puente o instalación crítica impulsa la creación y modificación de códigos de construcción. En los sectores del uso del suelo y la planificación urbana, un análisis robusto del riesgo ante inundaciones también impulsa la inversión en protección contra inundaciones y posiblemente también afecte cambios en las primas de los seguros. A nivel comunitario, la comprensión de los eventos de peligro, ya sea a partir de la memoria viva o

de historias orales y escritas, puede informar e influir en las decisiones sobre la preparación, incluidos los procedimientos de evacuación para salvar vidas y la ubicación de instalaciones importantes ” [3].

Matemáticamente, el riesgo puede definirse como "la probabilidad de que se supere un determinado nivel de consecuencias en un período de tiempo dado". Esta definición, aunque muy específica, le da a la noción de riesgo un significado taxativo, cuantificable y flexible que permite una respuesta cuantitativa a diferentes problemas de ingeniería como '¿Cuál es la probabilidad de que mi edificio se derrumbe en los siguientes 50 años?' O '¿Cuál es la probabilidad de tener más de 1.000 personas desplazados de su hogar debido a inundaciones en los próximos 10 años? ', O '¿Cuál es la probabilidad de que los pagos del seguro debido a un gran terremoto lleven a mi empresa a la quiebra en los próximos 20 años? ' Por lo tanto,

$$\text{riesgo} = P(Z \geq z \text{ en } 0 \leq t \leq T) \quad (1)$$

Por definición, la cuantificación del riesgo implica la caracterización de eventos futuros inciertos que involucran la sucesión de muchos procesos físicos complejos que eventualmente conducen a un desastre. La predicción de las características temporales y espaciales de estos eventos está sujeta a la variabilidad natural de los fenómenos físicos, también denominada incertidumbre aleatoria. Sin embargo, también existe incertidumbre acerca de los modelos y los parámetros utilizados para representar esos procesos debido a la falta de datos suficientes para caracterizarlos o debido a un conocimiento insuficiente sobre los mecanismos involucrados. Esta incertidumbre adicional se conoce típicamente como epistémica o subjetiva y su inclusión puede moldear significativamente la naturaleza de las decisiones adoptadas, proporcionar información sobre su robustez y ayudar a definir la asignación de recursos en post de mejorar de las estimaciones.

En este trabajo se resume un marco conceptual general para el análisis de riesgo que puede ser aplicable en una amplia gama de fenómenos naturales destructivos, y se propone un enfoque general, robusto y transparente para la incorporación de incertidumbres epistémicas mediante un enfoque bayesiano. También se incluye una discusión sobre cómo su incorporación puede afectar los resultados del análisis de riesgo y eventualmente influir en la toma de decisiones.

El modelo de riesgo

El enfoque más común para estudiar el riesgo, lo expresa como función de tres componentes [3]: (1) *Amenaza*, que cuantifica la probabilidad de ocurrencia de un evento potencialmente destructivo y la distribución espacial de su intensidad; (2) *Exposición*, que caracteriza los atributos de los objetos (personas y/o estructuras por ejemplo) potencialmente dañados, como su ubicación geográfica, características físicas y valor económico; y (3) *Vulnerabilidad*, que modela cómo reaccionan estos objetos a la perturbación producida por el evento en términos de impacto o consecuencias. Las componentes de *Exposición* y *Vulnerabilidad* juntas comprenden lo que aquí se denomina modelo de impacto, que mide el nivel de consecuencia para un evento dado.

En las siguientes secciones se describe más en detalle cada uno de estos modelos.

El modelo de amenaza

El modelo de amenaza tiene como objetivo cuantificar la distribución de probabilidad de la perturbación que origina el evento sobre los objetos de interés. Para ello, es necesario

definir dos modelos matemáticos: un *modelo de recurrencia* que cuantifica la tasa de ocurrencia de eventos definidos por un conjunto de características ν , y un *modelo de propagación* que cuantifica cómo la perturbación producida por este evento se propaga hacia los objetos de interés en el análisis.

Las características ν son un conjunto de parámetros que describen la magnitud y la ubicación espacial del evento, ya sea como una magnitud física o como una métrica que refleje su potencial dañino. La perturbación generada por el evento en el entorno medioambiental es caracterizada por una Medida de Intensidad (*IM* por sus siglas en inglés) que permite relacionarla con las potenciales consecuencias o daños a los objetos.

Por ejemplo, en los modelos de amenaza de terremotos, ν puede representar la Magnitud del terremoto (magnitud de momento o en la escala de Mercalli por ejemplo) y la ubicación geográfica del hipocentro, mientras que la *IM* puede asociarse a la aceleración del movimiento del suelo en los puntos geográficos de interés [4]. En el caso de la amenaza de inundaciones, un evento puede caracterizarse por la intensidad y la duración de una lluvia, en el caso de las inundaciones fluviales, o por el aumento del nivel del mar para las inundaciones costeras, mientras que la *IM* es típicamente asociado a la altura máxima de inundación en el sitio de interés [5]. Un evento de tornado, por ejemplo, caracteriza su magnitud a través de la categoría en la escala Fujita mejorada y la ubicación del punto de primer impacto, y la velocidad máxima del viento puede ser un *IM* útil para el análisis de la amenaza [6]. Ejemplos análogos existen para un gran abanico de fenómenos naturales y se utilizan de forma rutinaria en la comunidad de riesgo.

El modelo de recurrencia

El modelo de recurrencia está representado por un proceso aleatorio que refleja cómo ocurren eventos de diferente magnitud ν a través del tiempo (y el espacio). El modelo más utilizado es el Proceso de Poisson que implica que los eventos ocurren discretamente en el tiempo y que el tiempo entre ocurrencias se distribuye exponencialmente con tasa media λ_0 , y que cada evento tiene un nivel de magnitud asociado con distribución de probabilidad acumulada $F(\nu)$. En este caso, la tasa media de ocurrencia de eventos con magnitud igual o mayor que ν viene dada por,

$$\lambda_\nu(\nu) = \lambda_0(1 - F(\nu)) \quad (2)$$

Es común en la disciplina de riesgos, caracterizar la ocurrencia de eventos a través del inverso de la tasa media, también denominado Período de Recurrencia: $Tr(\nu) = 1/\lambda(\nu)$.

Si bien muchos eventos naturales ocurren efectivamente en puntos discretos en el tiempo, como los terremotos, las tormentas, o los huracanes, algunos otros están relacionados con fenómenos que varían de manera continua en el tiempo, como el aumento del nivel del mar o el caudal de un río. En cualquier caso, se puede representar también esos procesos como si ocurrieran de manera discreta en el tiempo filtrando solo los períodos de ocurrencia de extremos. Es decir, para estudiar el riesgo, solo son de interés los niveles extremos de la altura del mar o del caudal de un río, que efectivamente ocurren en puntos discretos en el tiempo (ver Figura 1). Esto puede modelarse mediante la teoría estándar de valores extremos, particularmente a través de las metodologías de Peaks-Over-Threshold [7].

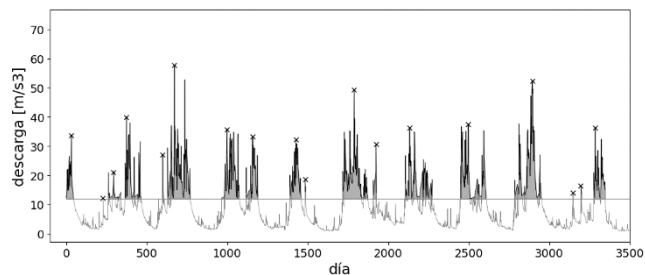


Figura 1: Identificación de eventos extremos, y discretos, en medición continua del caudal de un río

Cualquiera sea el caso, la función de recurrencia $\lambda_\nu(\nu)$ puede ser obtenida a través del ajuste estadístico de una serie de datos históricos (Figura 2).

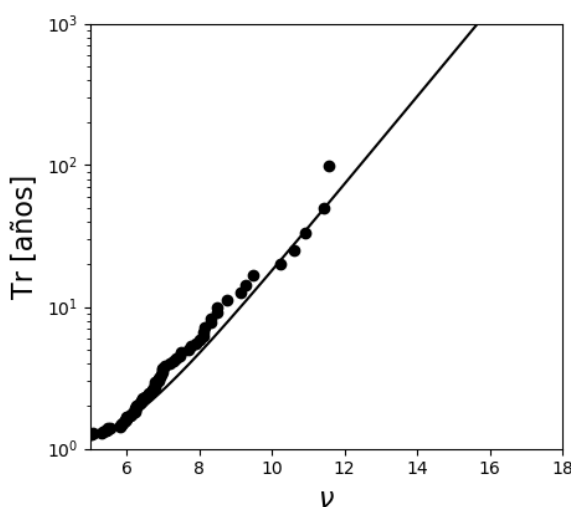


Figura 2: Curva de recurrencia de eventos de magnitud ν o mayor

Modelo de propagación

El impacto, o daño, en los objetos debido a la ocurrencia un evento natural destructivo está mejor correlacionado, tanto conceptual como matemáticamente, con la intensidad IM de la perturbación del evento en el sitio que con la magnitud del evento en sí. El proceso físico mediante el cual un evento propaga una perturbación desde su origen hacia las sitios de interés se modela mediante lo que aquí se denomina modelo de propagación.

Este modelo es una función de la magnitud del evento ν y un conjunto de parámetros y submodelos que describen cómo el evento interactúa con el medio circundante. Puede definirse mediante un conjunto complejo de ecuaciones basadas en la modelación mecánica del problema, como la dinámica de fluidos o suelos, o mediante regresiones estadísticas relativamente simples basadas en datos históricos. De manera general se tiene que,

$$IM = g(\nu, \theta_{IM}) \quad (3)$$

Donde θ_{IM} es un vector de parámetros del modelo de propagación.

Como ejemplo en el caso de amenaza por terremotos, la propagación del movimiento sísmico a través del suelo desde la fuente de ruptura y hasta las fundaciones de las estructuras suele modelarse mediante modelos puramente estadísticos conocidos como

ecuaciones de predicción del movimiento del suelo (GMPE). Estas GMPEs Relacionan la magnitud y otras características del evento de ruptura sísmica con la distribución espacial de algún parámetro estadístico del movimiento de suelo, como las aceleraciones máximas o las aceleraciones espectrales [4]. En el caso de amenaza por inundación, la propagación del caudal del río aguas abajo y el desborde hacia la llanura de inundación puede obtenerse mediante modelos hidrológicos o hidráulicos basados en las ecuaciones de fluidodinámica que permiten predecir la altura de inundación en los puntos de interés. Estos modelos requieren definir la topografía de la región, la rugosidad y la tasa de absorción del suelo, los cuales pueden incluirse como parámetros del modelo de propagación [5]. De la misma manera, para la amenaza de vientos de tornado, un modelo estadístico de distribución espacial del viento permite predecir la velocidad máxima del viento a diferentes distancias de la traza del tornado según su categoría en la escala de Fujita [6], con parámetros calibrados a partir de datos históricos.

El modelo de impacto: Exposición + Vulnerabilidad

El modelo de impacto cuantifica el nivel de consecuencias como resultado de la ocurrencia de un evento, medido a través de una métrica Z . Este modelo representa un complejo fenómeno físico por el cual los objetos de interés se ven afectados y dañados por la perturbación del evento en el medioambiente, y depende no solo de la intensidad IM de la perturbación, sino también de las características físicas del objeto. De manera general,

$$Z = h(IM, \theta_Z) \quad (4)$$

Donde θ_Z es un vector de parámetros del modelo de impacto.

La medida de impacto Z representa cualquier magnitud de relevancia que permita tomar decisiones en términos de la funcionalidad y capacidad de los objetos, o sistema en análisis. Puede ser pensada, de manera general, como una variable de performance del sistema.

Por ejemplo, en el diseño sísmico de estructuras, el ingeniero podría estar interesado en calcular el riesgo de colapso, en cuyo caso Z representa una variable binaria del tipo colapso/no colapso, y el modelo de impacto $h(IM, \theta_{IM})$ involucra la respuesta de una estructura con propiedades mecánicas θ_{IM} , al movimiento del suelo caracterizado por IM . En otro contexto, el propietario de un edificio, podría estar más interesado en calcular la extensión de los daños producidos por el movimiento del suelo y el costo de repararlos, en cuyo caso Z podría representar un costo económico y $h(IM, \theta_{IM})$ involucra, no solo la respuesta dinámica estructural, sino también un modelo económico de costos de reparación. En un último ejemplo, para un funcionario de una ciudad, podría ser de interés estimar el número de personas desplazadas de sus hogares como resultado de una inundación, en cuyo caso Z podría ser el número de viviendas inhabitables.

La curva de riesgo

El riesgo, como la probabilidad de exceder un nivel dado de consecuencias z , puede calcularse mediante la concatenación de los tres modelos descritos anteriormente. A partir de la ocurrencia de un evento de magnitud v , puede calcularse el nivel de impacto z calculando primeramente la IM en los sitios de interés mediante la ecuación (3) y calculando luego el impacto para cada IM mediante la ecuación (4). Componiendo las dos funciones podemos resumir en un solo modelo,

$$Z = (h \circ g)(v, \theta) = \zeta(v, \theta) \quad (5)$$

Donde θ reúne todos los parámetros del modelo de propagación y de impacto. Para simplificar la notación, se usará, de ahora en más, la función $\zeta(\nu, \theta)$ para representar el modelo de impacto para un evento de magnitud ν .

De la misma manera que los eventos ocurren a través del tiempo siguiendo un proceso aleatorio, los niveles de impacto z también lo hacen según un proceso aleatorio en el tiempo y , por lo tanto, pueden ser representados por una curva de recurrencia (Figura 3). De esta manera, una forma clásica de resumir un análisis de riesgo es a través de la tasa de ocurrencia de eventos que producen un nivel de consecuencia z o mayor.

$$\lambda_z(z) = \lambda_\nu[\zeta^{-1}(z, \theta)] \quad (6)$$

Siguiendo esta ecuación, el riesgo como recurrencia de eventos con consecuencias mayores a z puede calcularse a través de un cambio de escalas en la curva de recurrencia de eventos naturales (Figura 4), representado por la transformación $\nu = \zeta^{-1}(z, \theta)$.

Asimismo, con la información de recurrencia puede calcularse la probabilidad de excedencia en un período de tiempo cualquiera, según se definió al riesgo en un principio. Asumiendo un proceso de Poisson, esta probabilidad es,

$$P(Z \geq z \text{ en } 0 \leq t \leq T) = 1 - e^{-\lambda_z T} \quad (6)$$

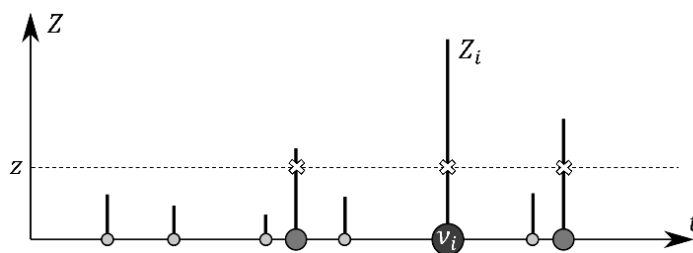


Figura 3: El nivel de impacto Z como un proceso aleatorio en el tiempo

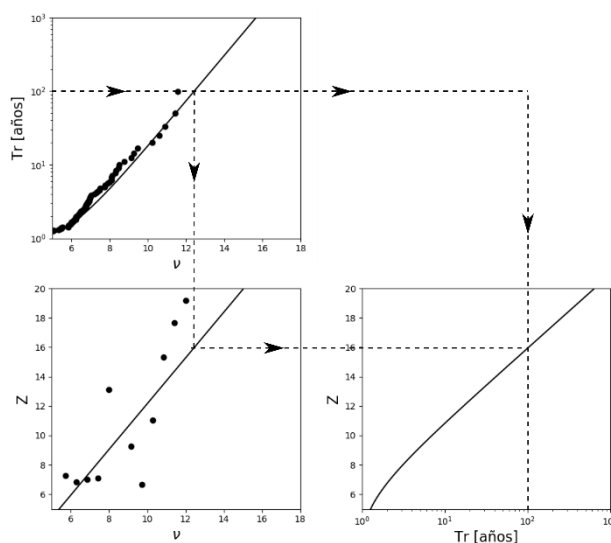


Figura 4: Cálculo de la curva de riesgo como cambio de escala de la curva de recurrencia de eventos.

Incertidumbres

La noción de riesgo está intrínsecamente relacionada con la predicción de un evento incierto en el futuro. Por lo tanto, la cuantificación de la incertidumbre es lo que da sentido a un análisis de riesgos: sin la existencia de incertidumbres, el análisis de riesgos no sería necesario.

Las incertidumbres suelen diferenciarse entre las que se consideran como una propiedad del sistema (incertidumbre aleatoria o natural) y entre las que son producto del conocimiento incompleto e imperfecto sobre las características y el funcionamiento del sistema en estudio (incertidumbres epistémicas o subjetivas). Si bien en muchos casos, la distinción entre estos dos tipos de incertidumbre es poco clara, la principal característica que las diferencia es el hecho de que la incertidumbre aleatoria no puede reducirse porque es simplemente una propiedad inherente al sistema en estudio. Por otro lado, la incertidumbre epistémica puede reducirse recopilando más información y adquiriendo conocimientos sobre el sistema de análisis. Esta distinción es fundamental a la hora de asignar recursos que pueden ayudar a comprender mejor un proceso determinado [9].

Spiegelhalter y Riesch [10] adoptan un enfoque más operacional en la caracterización de incertidumbres al definir tres niveles asociados al desarrollo de modelos matemáticos que representan distintas imperfecciones en la construcción del modelo: (1) *Variabilidad de eventos futuros*, lo que llamamos previamente incertidumbre aleatoria, (2) *información limitada* que refleja la incapacidad de caracterizar un modelo de manera completa producto de los datos siempre limitados del mismo, y que puede ser representada a través de la incertidumbre en los parámetros del modelo; y (3) *conocimiento limitado* que refleja la incapacidad de los modelos conocidos en representar de manera integral los fenómenos físicos de interés y que podría representarse como una incertidumbre asociada a distintos modelos matemáticos.

Esta clasificación de incertidumbres permite el desarrollo de una metodología para incluirlas en la construcción de modelos de riesgo. Por un lado, la incertidumbre aleatoria puede asociarse al proceso aleatorio mediante el cual los eventos ocurren a lo largo del tiempo, representado matemáticamente por el modelo de recurrencia λ_v de la ecuación (2) (proceso de Poisson). Las incertidumbres epistémicas, en cambio, representan incertidumbre sobre la estructura de los modelos matemáticos utilizados (ecuación (5)) y sus parámetros θ .

Incorporando las incertidumbres epistémicas: la integral del riesgo

La inclusión de incertidumbres epistémicas en la cuantificación del riesgo aumenta enormemente la complejidad del problema previamente resuelto por la ecuación (6). Incluso considerando que los modelos computacionales utilizados para describir los procesos físicos son completamente correctos, la información siempre es limitada y, por lo tanto, los parámetros del modelo no se pueden determinar de forma única, excepto en contextos muy específicos. En todo caso, puede obtenerse una distribución de probabilidad asociada a los parámetros del modelo (y eventualmente a la estructura del modelo en sí) $f(\theta)$ como una representación de la incertidumbre en su definición debido a la falta de información y conocimiento suficientes.

En este sentido, la curva del riesgo dada por la ecuación (5) puede interpretarse como una estimación condicionada a un conjunto de parámetros y modelos específicos resumidos en θ , pero no únicos. Por medio del Teorema de probabilidad total, podemos integrar todas las curvas posibles en una sola curva de riesgo como,

$$\lambda_z(z) = \int_{\theta} \lambda_v[\zeta^{-1}(z, \theta)] f(\theta) d\theta \quad (7)$$

Esta integral puede resolverse mediante simulación de distintos parámetros θ , por lo que el desafío resultante es obtener la distribución de probabilidad $f(\theta)$.

La estadística bayesiana proporciona un marco robusto y transparente para caracterizar esta distribución mediante la construcción de una distribución a-posteriori de los parámetros condicionados a observaciones o datos de la realidad. Esto se logra a través del Teorema de Bayes y de la definición de un modelo de probabilidad de los datos, conocido como función de verosimilitud, que mide la probabilidad de obtener los datos observados para cada valor posible de los parámetros θ [11]. Esta distribución posterior se puede calcular como,

$$f(\theta|data) \propto \mathcal{L}(data|\theta) \cdot \pi(\theta) \quad (8)$$

Donde $\pi(\theta)$ es la función a-priori de los parámetros, que permite incluir el conocimiento previo del modelador acerca de su distribución (en general también puede admitirse que no hay ningún tipo de conocimiento previo usando una función aproximadamente uniforme), y $\mathcal{L}(data|\theta)$ es la función de verosimilitud.

Discusión

La influencia de las incertidumbres epistémicas en cada uno de los modelos que componen el riesgo puede verse en la Figura 5, según un ejemplo puramente conceptual, como intervalos creíbles (en el sentido bayesiano) que reflejan los rangos dentro de los cuales la salida del modelo ocurre con una probabilidad particular (en la figura 90%).

En particular, el modelo de impacto, que originalmente se asumió como una función determinista, ahora aparece como una distribución de posibles impactos para cualquier magnitud dada ν (gráfico central de la figura 5). Las líneas continuas reflejan los modelos definidos con los parámetros de ajuste óptimo, es

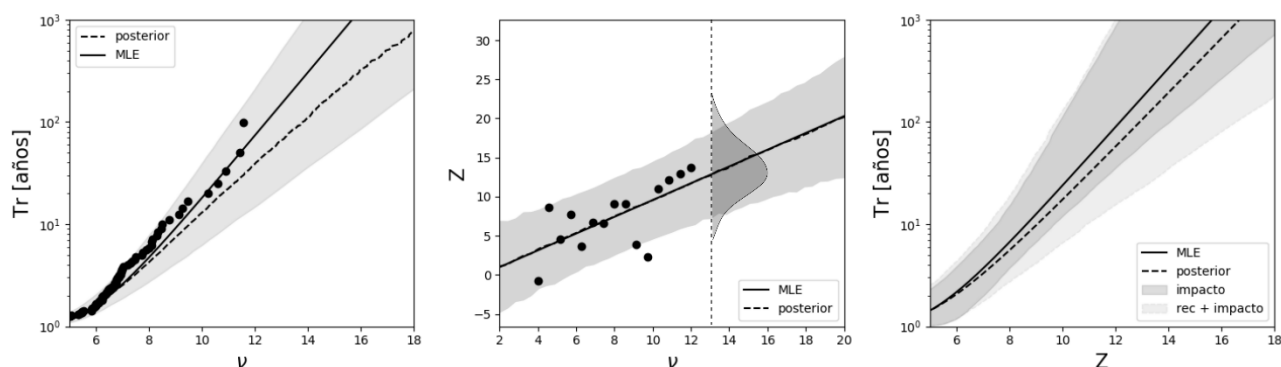


Figura 5: Modelo de recurrencia (izq.), de impacto (centro) y curva de riesgo (der.) considerando incertidumbres epistémicas

decir, aquellos parámetros que maximizan la función de verosimilitud, denominados Estimadores de Máxima Verosimilitud (MLE por sus siglas en inglés). Estos serían los modelos generalmente utilizados cuando no se considera la incertidumbre epistémica. Finalmente, las líneas punteadas representan los modelos predictivos según el enfoque bayesiano [11], es decir, las curvas que resultan de promediar todos los modelos posibles definidos por $f(\theta)$.

La inclusión de las incertidumbres epistémicas puede tener un impacto significativo en la estimación final del riesgo como se ve a partir de la diferencia entre las líneas sólidas y

punteadas en el gráfico de la derecha de la Figura 5. La inclusión de incertidumbre en los parámetros del modelo de recurrencia principalmente genera distribuciones de probabilidad con colas más pesadas (largas), desplazando así hacia la derecha la curva de recurrencia del riesgo. Esto puede afectar la toma de decisiones como resultado de un análisis de riesgo. Si pensamos en un problema clásico de diseño en ingeniería, donde se requiere estimar el nivel de consecuencia para una recurrencia específica (período de retorno) para usar como criterio de diseño, esto implicaría estimaciones de diseño más conservadoras (ver Figura 6). Esto es razonable desde un punto de vista conceptual: cuanto mayor sea la incertidumbre, más conservador debería ser el diseño.

Además, se puede ver en la Figura 5 que las incertidumbres epistémicas son más influyentes para períodos de retorno más grandes, donde las dos líneas se separan cada vez más. Esto está generalmente asociado al ajuste del modelo de recurrencia (figura izquierda), donde solo se disponen de observaciones históricas para un número limitado de años en el pasado. Esto implica que magnitudes asociadas a períodos de retorno grandes aún no han sido observadas y, por lo tanto, la incertidumbre en su estimación es mayor. Se puede intentar pensar, por ejemplo, en estimar el evento con un período de retorno de 500 años cuando solo se dispone de 50 años de observaciones.

Finalmente, desagregando los intervalos creíbles según la contribución de la incertidumbre epistémica en cada modelo, como se muestra en la Figura 6, puede servir para identificar dónde deben destinarse recursos para la obtención de datos y mejora de modelos de manera óptima para reducir el impacto de las incertidumbres.

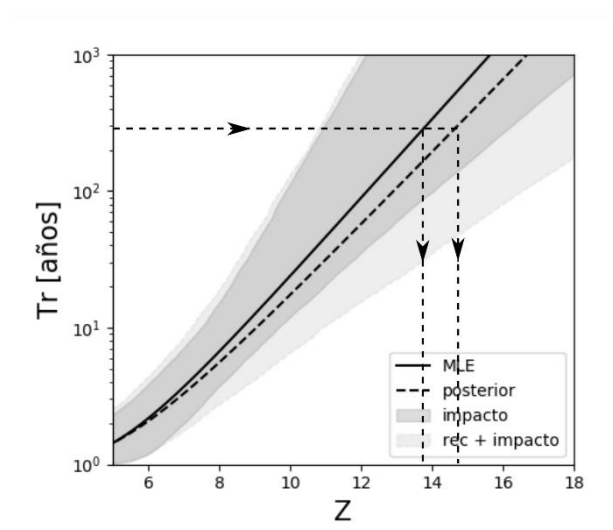


Figura 6: Impacto de las incertidumbres epistémicas en problemas de diseño

Conclusiones

Modelar el riesgo, como la probabilidad de exceder un nivel dado de consecuencias z en el tiempo, implica armar tres modelos: (1) el modelo de recurrencia que cuantifica cómo ocurren eventos probables de diferente magnitud ν a lo largo del tiempo, definido por la tasa media de ocurrencia λ_ν , (2) el modelo de propagación que relaciona la magnitud del evento ν con una medida de intensidad IM que se correlaciona bien con el impacto en el objeto de interés, y (3) un modelo de impacto que relaciona IM con la consecuencia, o impacto, Z .

La variabilidad natural en la ocurrencia de eventos se considera a través del modelo de recurrencia que es la representación matemática de un proceso de tiempo estocástico (Poisson en este trabajo). Sin embargo, existen otras fuentes inevitables de incertidumbre

que afectan nuestra estimación del riesgo. Estas fuentes, que surgen de la falta de información y conocimiento del fenómeno en estudio, pueden cuantificarse asignando distribuciones de probabilidad a los parámetros que definen cada uno de los tres modelos (y eventualmente los modelos mismos). La estadística bayesiana proporciona una herramienta sólida y transparente para cuantificar estas distribuciones, combinando tanto el juicio y experiencia del modelador, como las observaciones del mundo real.

Finalmente, se mostró que la incorporación de las incertidumbres epistémicas no solo es útil para identificar qué modelos necesitan mejoras adicionales, sino que también puede modificar la toma de decisiones mediante la modificación de las estimaciones de riesgo.

Es importante reconocer que es imposible incluir todas las fuentes potenciales de incertidumbre epistémica y, por lo tanto, todas las estimaciones de riesgo son incompletas en ese sentido. Sin embargo, considerarlas de manera consistente y transparente según permite la teoría de estadística bayesiana, permite mejorar el desarrollo de modelos al comparar las técnicas y expertise de los diferentes modeladores, las fuentes de datos y los procedimientos de toma de decisiones.

Referencias

- [1] A. K. Jha, R. Bloch, and J. Lamond, *Cities and Flooding: A Guide to Integrated Urban Flood Risk Management for the 21st Century*. The World Bank, 2012. doi: 10.1596/978-0-8213-8866-2.
- [2] G. P. Cimellaro, *Urban Resilience for Emergency Response and Recovery: Fundamental Concepts and Applications*. Springer International Publishing, 2016. doi: 10.1007/978-3-319-30656-8.
- [3] Global Facility for Disaster Reduction and Recovery, “Understanding Risk in an Evolving World: Emerging Best Practices in Natural Disaster Risk Assessment,” The World Bank, 2014.
- [4] S. L. Kramer, *Geotechnical earthquake engineering*. Pearson Education India, 1996.
- [5] K. Beven, “Use of Models in Flood Risk Management,” in *Applied Uncertainty Analysis for Flood Risk Management*, IMPERIAL COLLEGE PRESS, 2014, pp. 25–35. doi: 10.1142/9781848162716_0002.
- [6] M. Balbi and P. Barbieri, “Enfoque Científico del riesgo - Evaluación del Potencial de Tornados en la República Argentina,” 2018, doi: 10.13140/RG.2.2.35047.80801.
- [7] S. Coles, *An Introduction to Statistical Modeling of Extreme Values*. London: Springer London, 2001. doi: 10.1007/978-1-4471-3675-0.
- [8] J. W. Hall, “Flood Risk Management: Decision Making Under Uncertainty,” in *Applied Uncertainty Analysis for Flood Risk Management*, IMPERIAL COLLEGE PRESS, 2014, pp. 3–24. doi: 10.1142/9781848162716_0001.
- [9] A. D. Kiureghian and O. Ditlevsen, “Aleatory or epistemic? Does it matter?,” *Structural Safety*, vol. 31, no. 2, pp. 105–112, Mar. 2009, doi: 10.1016/j.strusafe.2008.06.020.
- [10] D. J. Spiegelhalter and H. Riesch, “Don’t know, can’t know: embracing deeper uncertainties when analysing risks,” *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, vol. 369, no. 1956, pp. 4730–4750, Dec. 2011, doi: 10.1098/rsta.2011.0163.
- [11] A. Gelman, J. B. Carlin, H. S. Stern, D. B. Dunson, A. Vehtari, and D. B. Rubin, *Bayesian Data Analysis, Third Edition*. CRC Press, 2013.

2

Referencias de tensión/corriente cmos Para sensores de gases

Cassani, María Victoria ^{a,b}; Garcia-Inza, Mariano ^{a,b}

^a. *Laboratorio de Física de Dispositivos – Microelectrónica, INTECIN, FIUBA, Argentina.*

^b. *CONICET, Argentina.*

mcassani@fi.uba.ar

Resumen

En la actualidad, es indiscutible la necesidad de medir los niveles de contaminación del aire para poder monitorear las concentraciones de gases atmosféricos y tomar decisiones tendientes a mitigar los daños que producen en la población.

En este trabajo se presentan dos circuitos que actúan como referencias de tensión/corriente, necesarias para la implementación de un circuito integrado CMOS que actúe como transductor de un sensor de gases resistivo. Como se requiere que la referencia sea de muy bajo consumo y presente estabilidad frente a variaciones de temperatura y de tensión de alimentación, se estudian dos diseños de referencias auto-polarizadas, una de ellas con compensación en temperatura, obteniéndose una variación de 50ppm/°C y un consumo de 178,6 nW en el mejor caso.

Abstract

At present, it is essential to measure air pollution levels in order to control atmospheric gas concentrations and make decisions to mitigate the damage caused to population.

In this work, two voltage/current references are presented. This reference is necessary for the implementation of a CMOS integrated circuit that acts as a transducer for a resistive gas sensor. It is required a very low consumption and high stability against variations in temperature and supply voltage. Therefore, two designs of self-biased references are studied, one of them compensated in temperature, obtaining a variation of 50ppm/°C and a consumption of 178.6 nW in the best case.

Palabras clave: Sensores de gases, circuitos CMOS, referencias de tensión y corriente.

Introducción

La medición de los niveles de contaminación del aire es relevante para evaluar la situación ambiental, que causa millones de muertes por año a nivel global [1]-[3]. Además, permite cuantificar tendencias atmosféricas con fines de prevención y control. Los sensores

comerciales actuales para detección de gases contaminantes utilizan óxidos semiconductores como material sensible y miden su resistencia para calcular la concentración de gas presente. Sin embargo, presentan diversos inconvenientes, entre los que se destaca la necesidad de trabajar a temperaturas elevadas y en consecuencia un consumo de energía cercano a 1W [4]. En los últimos años se han desarrollado materiales calcogenuros que permitirían el sensado de gases a temperatura ambiente [5]. Por otro lado, la tecnología de circuitos integrados CMOS (Complementary Metal-Oxide-Semiconductor) es buena candidata para la implementación de los circuitos de lectura ya que tiene la ventaja del bajo consumo eléctrico y del bajo costo cuando son fabricados de forma masiva [6]. En estas condiciones sería factible implementar redes de sensores inalámbricos que permitan monitorear concentraciones de gases en áreas extensas o lugares de difícil acceso.

El presente trabajo se centra en el desarrollo de circuitos integrados CMOS de bajo consumo para la electrónica de transducción de un sensor resistivo basado en materiales calcogenuros, que funcione en ambientes a temperatura no controlada. En particular, se estudiaron, diseñaron y analizaron por simulación diferentes estrategias circuitales para el subcircuito referencia de tensión/corriente, bloque esencial para el desarrollo del sistema de sensado, siendo el que genera las tensiones o corrientes necesarias para el funcionamiento del resto del circuito. Como requerimientos esenciales, se considera el bajo consumo de potencia y un buen desempeño frente a variaciones de tensión de alimentación y de temperatura.

En este trabajo se presentan dos diseños candidatos para la aplicación. La tecnología elegida es del nodo de 180 nm. La principal característica de estos es el bajo consumo, motivo por el cual se evita utilizar resistores. Los dos circuitos son analizados mediante simulaciones para luego extraer conclusiones a partir de la comparación entre los resultados obtenidos.

Desarrollo

Referencia auto-polarizada

El primer circuito analizado, que se muestra en la Figura 1, consiste en una referencia de corriente auto-polarizada diseñada únicamente con transistores (SBCS, por su nombre en inglés Self-Biased Current Source) [7]. El circuito es estable para $K > 1$, siendo $K = S_2/S_1$ el cociente entre las relaciones de aspecto de los transistores M1 y M2 ($S_i = W_i/L_i$). El núcleo del circuito está compuesto por estos transistores y M7, a partir de los que se define la tensión V_{S2} , que se transforma en corriente mediante M7 (actúa como resistor). Todos los transistores se encuentran en saturación, salvo M7 y M6 que operan en la región lineal.

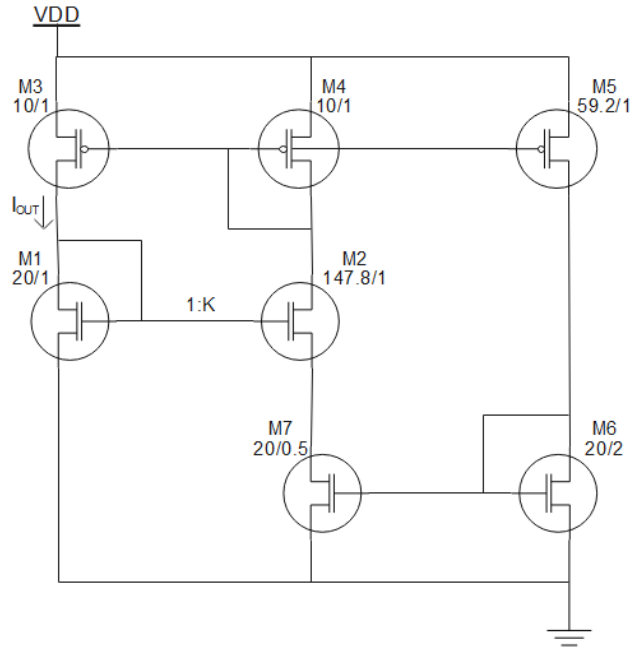


Figura 1: Referencia auto-polarizada.

Utilizando el modelo Unified Current-Control Model (UICM) para los transistores M1 y M2 se obtiene que:

$$\frac{V_{S2}}{\varphi_t} = \sqrt{1 + i_{f1}} - \sqrt{1 + \frac{i_{f1}}{K}} + \ln \left(\frac{\sqrt{1 + i_{f1}} - 1}{\sqrt{1 + \frac{i_{f1}}{K}} - 1} \right) \quad (1)$$

donde $\varphi_t = k_B T / q$ es la tensión térmica e $i_{f1} = I_{D1} / I_{SH} S_1$ es el nivel de inversión en directa del transistor M1. $I_{SH} = 0,5 \mu C_{ox} n \varphi_t^2$ es la corriente específica del transistor, donde μ es la movilidad, C_{ox} la capacidad del óxido por unidad de área y n es el factor de pendiente (slope factor).

Como se emplea una tensión de alimentación baja ($V_{DD} = 1,8 V$), es conveniente trabajar con niveles de inversión correspondientes a inversión débil ($i_{f1} \ll 1$). De esta manera, la ecuación precedente se reduce a:

$$\frac{V_{S2}}{\varphi_t} = \ln(K) \quad (2)$$

Por otra parte, vale la igualdad de las corrientes que circulan por M1 y M7:

$$I_{D1} = i_{f1} I_{SH} S_1 = I_{D7} = (i_{f7} - i_{r7}) I_{SH} S_7 \quad (3)$$

donde i_{r7} es el nivel de inversión reversa del transistor M7, que opera en inversión moderada. Con estas ecuaciones y considerando las relaciones entre las corrientes del circuito y las relaciones de aspecto de los transistores, es posible definir sus dimensiones para una corriente de salida I_{OUT} determinada. Esta corriente resulta una copia de la corriente que circula por las ramas centrales del circuito, y teóricamente independiente de la tensión de alimentación. Resulta entonces proporcional a la corriente específica, y su

dependencia con la temperatura está dada principalmente por la dependencia de la movilidad frente a este parámetro.

En la Tabla 1 se presentan las dimensiones finales de los transistores de esta referencia, para una corriente de $I_{OUT} = 34,8 \text{ nA}$, $i_{f1} = 0,0084$ e $i_{f7} = 10$.

Tabla 1: Dimensiones de los transistores de la referencia auto-polarizada.

Transistor	W [μm]	L [μm]
M1	20	1
M2	147,8	1
M3	10	1
M4	10	1
M5	59,2	1
M6	20	2
M7	20	0,5

La simulación de tensión V_{GS1} , que será la tensión de referencia, con respecto a la tensión de alimentación cuando esta varía desde 0 V hasta $1,8 \text{ V}$ se muestra en la Figura 2. Su variación resulta $\Delta V_{GS1}/\Delta V_{DD} = 3 \text{ mV/V}$. Se observa que la mínima tensión de alimentación para un correcto funcionamiento del circuito toma un valor aproximado de $0,75 \text{ V}$.

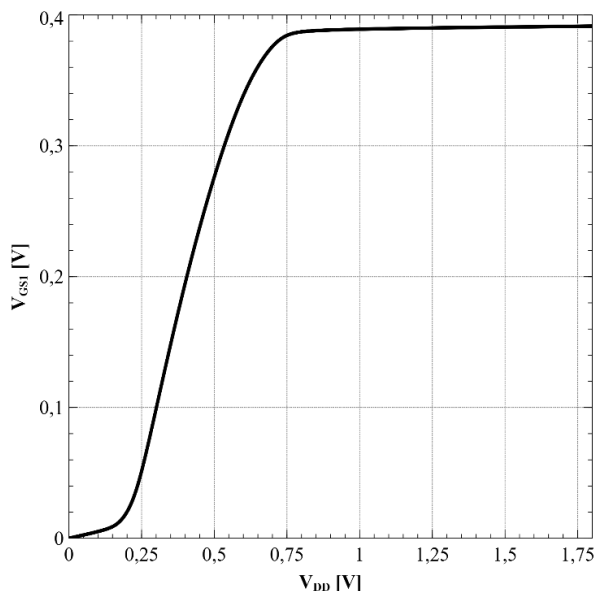


Figura 2: Referencia auto-polarizada - tensión de salida en función de la tensión de alimentación.

Por otra parte, la simulación de la tensión de salida con respecto a la temperatura, tomando un rango entre -10°C a 80°C , se muestra en la Figura 3, resultando una variación $\Delta V_{GS1}/\Delta T = 1,3 \text{ mV}/^\circ\text{C}$.

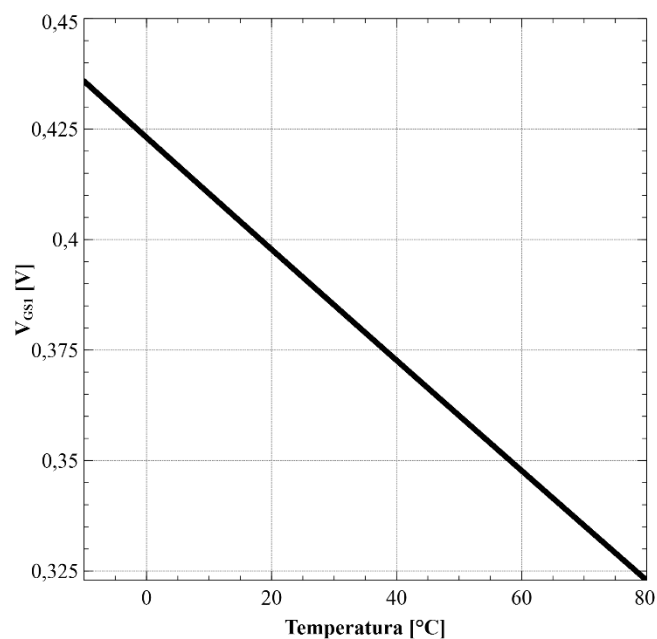


Figura 3: Referencia auto-polarizada - tensión de salida en función de la temperatura.

La distribución de V_{GS1} obtenida mediante una simulación de Monte Carlo con 400 corridas se presenta en la Figura 4. Se consideraron variaciones entre dispositivos y entre lotes de fabricación. De allí se puede obtener que la media es 0,39 V y el desvío estándar es de 10,9 mV.

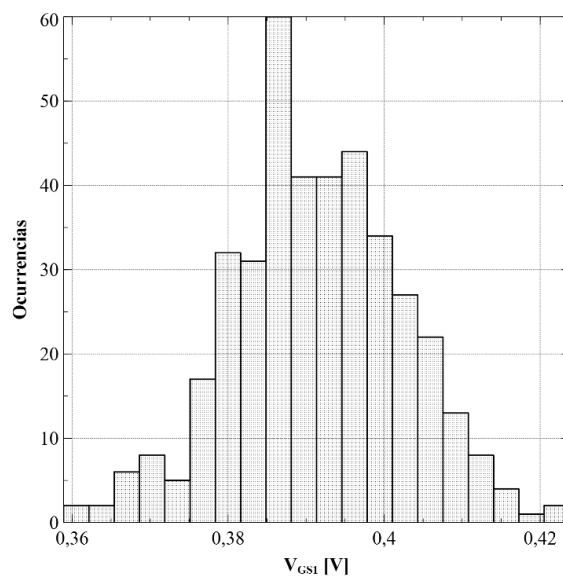


Figura 4: Referencia auto-polarizada - simulación de Monte Carlo para la tensión de referencia.

En la Figura 5 se presenta la densidad espectral de ruido. Integrando en todo el rango de frecuencias de la figura, es decir, de 0,01 Hz a 10 MHz, resulta un valor de 145,13 mV_{RMS}.

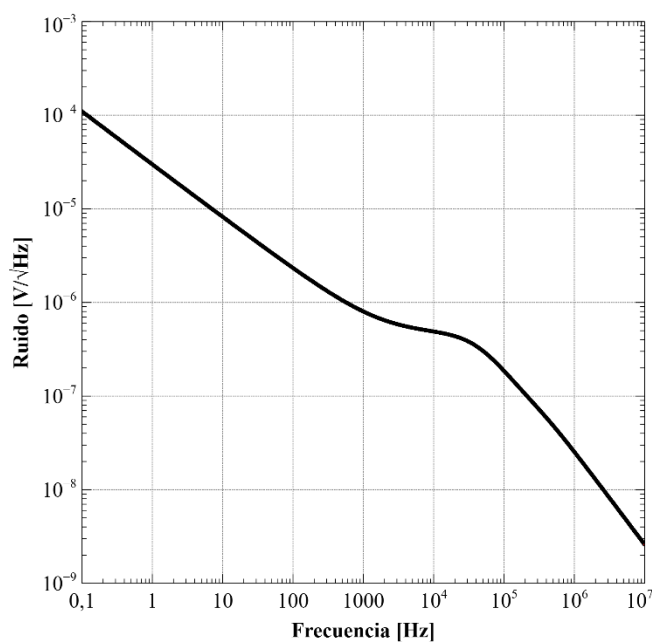


Figura 5: Referencia auto-polarizada – simulación de la densidad espectral de ruido a la salida.

En la Figura 6 se presenta la simulación de Power Supply Rejection Ratio (PSRR), con un capacitor de 1 pF a la salida y considerando temperatura ambiente. A 100 Hz resulta un valor de $-52,7\text{ dB}$.

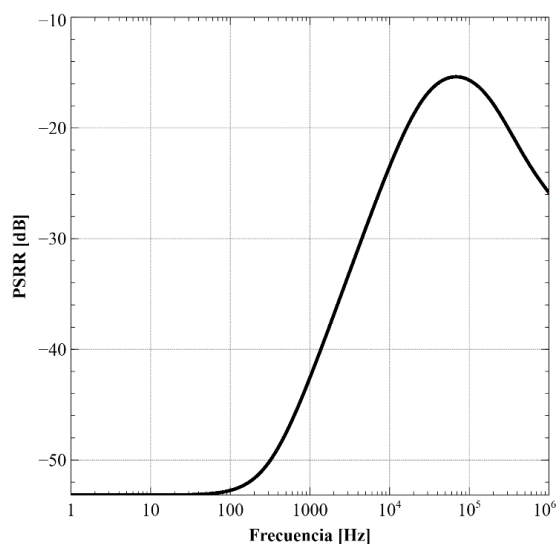


Figura 6: Referencia auto-polarizada – simulación de PSRR.

Finalmente, el consumo de corriente del circuito da un valor de 271 nA , por lo que considerando la tensión de alimentación de $1,8\text{ V}$ la potencia resulta $487,8\text{ nW}$.

Referencia auto-polarizada compensada en temperatura

Este circuito consiste en una referencia de tensión adaptada del trabajo [8] conformada esencialmente por una fuente de corriente y un circuito de polarización de tensión (Figura 7). La fuente de corriente está formada por los transistores M1, M2 y MR, generando una corriente I_P que luego se convierte en la tensión de referencia V_{REF} a través del circuito de polarización (M3 a M7). Los transistores MOS trabajan en la región subumbral, excepto por MR que opera en la región lineal. Los transistores M8 a M12 conforman las copias de corriente.

Este circuito resulta relevante porque genera dos tensiones con coeficientes térmicos opuestos, por lo que se pueden compensar y definir a partir de las dimensiones de los transistores una tensión de referencia que no varíe con la temperatura.

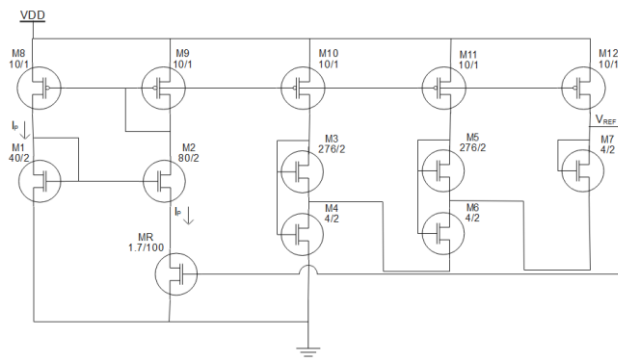


Figura 7: Referencia auto-polarizada compensada en temperatura.

Como la corriente por todas las ramas del circuito es la misma y el transistor MR actúa como resistencia (inversión fuerte, región lineal), la expresión de la corriente generada por la fuente está dada por:

$$I_P = S_R \mu C_{ox} \kappa T n \varphi_t \ln\left(\frac{S_2}{S_1}\right) \quad (4)$$

donde T es la temperatura absoluta, y S_R , S_1 y S_2 son las relaciones de aspecto de los transistores MR, M1 y M2, respectivamente. Además, κ es el coeficiente térmico de la tensión umbral V_{TH} , definida por $V_{TH} = V_{TH0} - \kappa T$, con V_{TH0} la tensión umbral a $0K$.

Planteando la expresión de la tensión de referencia, se observa que una parte, asociada a V_{TH} , tiene coeficiente térmico negativo, y la otra, relacionada con la tensión térmica, con coeficiente de temperatura positivo. Con las condiciones $V_{REF} - V_{TH0} \ll \kappa T$ y $n \varphi_t \ll \kappa T$ se llega a que el coeficiente térmico de V_{REF} es:

$$\frac{dV_{REF}}{dT} = -\kappa + \frac{nk_B}{q} \ln\left(\frac{6nq\kappa}{k_B(n-1)} \frac{S_R S_3 S_5}{S_4 S_6 S_7} \ln\left(\frac{S_2}{S_1}\right)\right) \quad (5)$$

Entonces para que el coeficiente de temperatura del circuito sea nulo tiene que valer que κ sea igual al segundo término de la ecuación precedente.

Eligiendo una corriente $I_P = 20 \text{ nA}$ y considerando temperatura ambiente $T = 25^\circ C$ es posible definir las dimensiones de los transistores del circuito, presentados en la Tabla 2.

Tabla 2: Dimensiones de los transistores de la referencia auto-polarizada compensada en temperatura.

Transistor	W [μm]	L [μm]
MR	1,7	100
M1	40	2
M2	80	2
M3	276	2
M4	4	2
M5	276	2
M6	4	2
M7	4	2
M8 – M12	10	1

Realizando un barrido de la tensión de alimentación entre 0 V y 1,8 V se obtiene a la salida una sensibilidad de línea de 6,34 mV/V, tal como se muestra en la Figura 8.

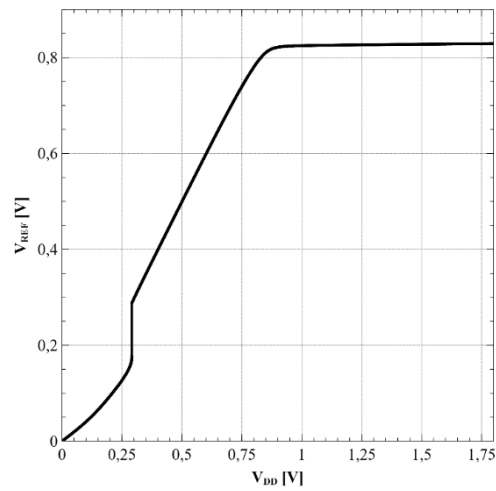


Figura 8: Referencia auto-polarizada con compensación en temperatura – sensibilidad de línea.

Por otra parte, el análisis de tensión de referencia en función de la temperatura entre -10°C y 80°C arroja una variación de $50\text{ ppm}/^{\circ}\text{C}$. En la Figura 9 es mostrada la variación de la tensión de referencia referida al valor mínimo, que resultó ser $0,829\text{ V}$, con respecto a la temperatura.

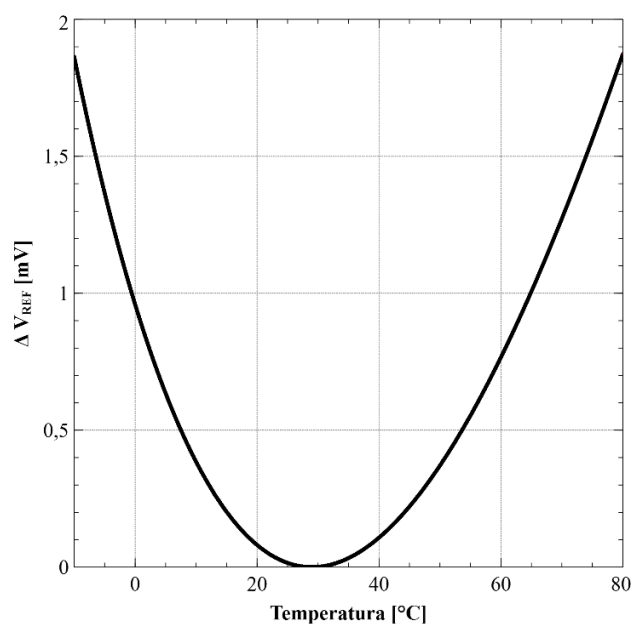


Figura 9: Referencia auto-polarizada con compensación en temperatura – variación de la tensión de salida con respecto al mínimo ($V_{REFmín} = 0,829\text{ V}$) en función de la temperatura.

Además, la distribución de la tensión de salida obtenida mediante una simulación de Monte Carlo con 400 ocurrencias muestra un valor de tensión V_{REF} con media $0,38\text{ V}$ y desvío estándar de 12 mV (Figura 10).

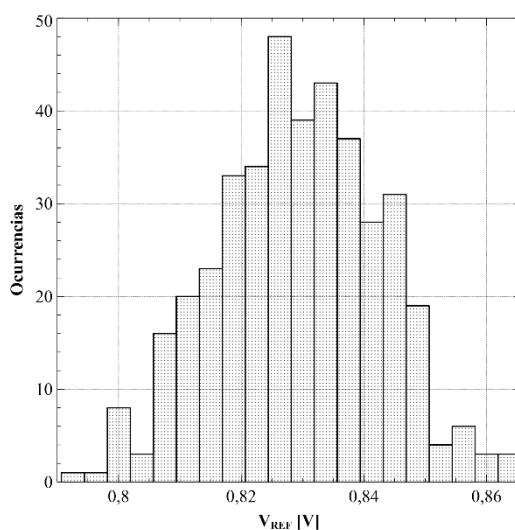


Figura 10: Referencia auto-polarizada con compensación en temperatura – simulación de Monte Carlo para V_{REF} .

Con respecto al análisis del ruido en el nodo de salida, la simulación de la densidad espectral de ruido entre $0,01\text{ Hz}$ y 10 Mhz resulta $87,75\text{ mV}_{RMS}$ (Figura 11).

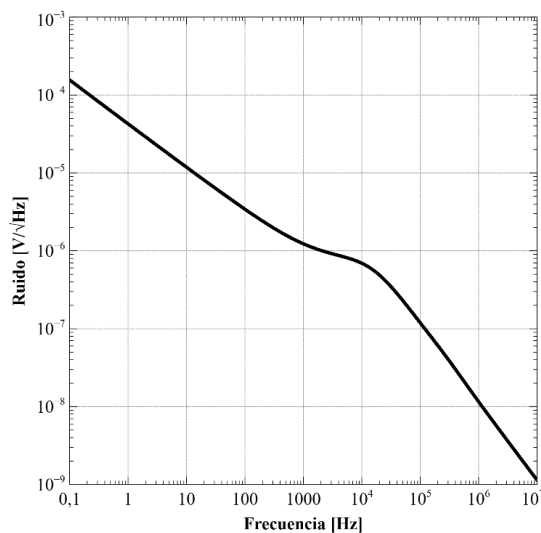


Figura 11: Referencia auto-polarizada con compensación en temperatura – simulación de la densidad espectral de ruido a la salida.

La simulación del PSRR para este circuito se muestra en la Figura 12. A 100 Hz y temperatura ambiente, empleando un capacitor de 1 pF, resulta $-48,4$ dB.

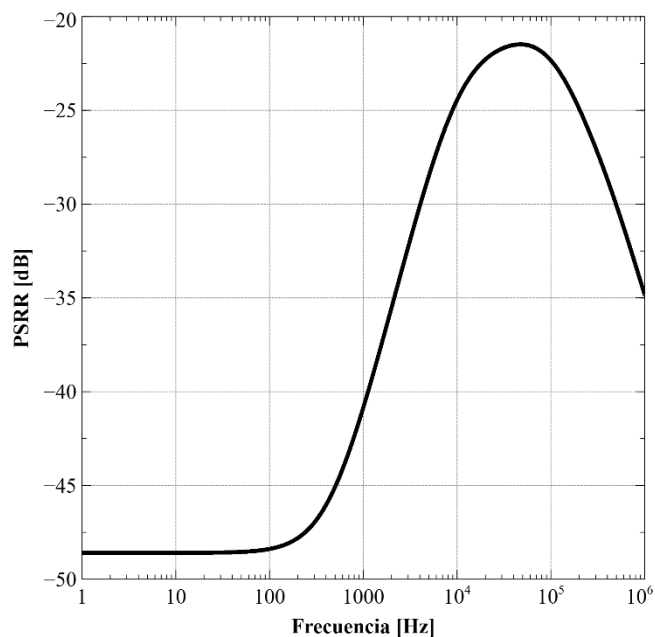


Figura 12: Referencia auto-polarizada con compensación en temperatura – simulación de PSRR.

Finalmente, el consumo de corriente de esta referencia es de 99,2 nA, por lo que la potencia resulta 178,6 nW.

Conclusiones

En la Tabla 3 se presentan los resultados de ambas referencias a modo de comparativa. Puede verse que efectivamente la variación con respecto a la temperatura disminuye considerablemente en la implementación con compensación. Asimismo, el consumo de esta segunda referencia disminuye a menos de la mitad. Por otro lado, esta última involucra más cantidad de transistores, algunos de ellos con dimensiones considerables, por lo que el área que ocupará el circuito en el chip será mayor.

Tabla 3: Comparativa.

	Referencia auto-polarizada	Referencia auto-polarizada con compensación en temperatura
Variación con T	1300 ppm/°C	50 ppm/°C
Variación con V _{DD}	3 mV/V	6,3 mV/V
Media de V _{REF}	0,38 V	0,39 V
Desvío estándar	10,9 mV	12 mV
PSRR @100Hz	-52,7 dB	-48,1 dB
Ruido total	145,1 mV _{RMS}	87,8 mV _{RMS}
Consumo	487,8 nW	178,6 nW
$\Sigma W_i L_i$	297 μm^2	1036 μm^2

Como trabajo futuro, se plantea la necesidad de analizar alguna otra variante de un circuito de referencia de tensión/corriente (como por ejemplo el análisis de una referencia de tipo bandgap [9]) para poder evaluar si la referencia autopolarizada con compensación en temperatura resulta suficiente para el transductor de un sensor resistivo.

Referencias

- [1] Brauer, M. (2016). *Poor air quality kills 5.5 million worldwide annually*. University of British Columbia. Online.
- [2] World Health Organization (2021). *Ambient (outdoor) air pollution*. Online.
- [3] Brauer, M; et al. (2016). Ambient air pollution exposure estimation for the global burden of disease 2013. *Environ. Sci. Technol.*, 50(1), 79-88.
- [4] Tsiulyanu, D.; Stratan, I.; Tsiulyanu, A.; Liess, H.-D; Eisele, I. (2007). Investigation of the oxygen, nitrogen and water vapour cross-sensitivity to NO₂ of tellurium-based thin films. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 121(2), 406-413.
- [5] Wüsten, J.; Potje-Kamloth, K. (2010). Chalcogenides for thin film NO sensors. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 145(1), 216-224.
- [6] Gardner, J.W.; Guha, P.K.; Udrea, F.; Covington, J.A. (2010). CMOS Interfacing for Integrated Gas Sensors: A Review. *IEEE Sensors Journal*, 10(12), 1833-1848.
- [7] Schneider, M.C.; Galup-Montoro, C. (2010). *CMOS Analog Design Using All-Region MOSFET Modeling*. Cambridge University Press. 199-224.

- [8] Ueno, K.; Hirose, T.; Asai, T.; Amemiya, Y. (2009). A 300 nW, 15 ppm/°C, 20 ppm/V CMOS Voltage Reference Circuit Consisting of Subthreshold MOSFETs. *IEEE Journal of Solid-State Circuits*, 44(7), 2047-2054.
- [9] Buck, A.E.; McDonald, C.L.; Lewis, S.H.; Viswanathan, T.R. (2002). A CMOS bandgap reference without resistors. *IEEE Journal of Solid-State Circuits*, 37(1), 81-83.

3

Marcos de referencia geodésicos, un enfoque bayesiano

Clavijo, Javier José ^a; Martínez, Julián Facundo ^b

^a Dto. de Agrimensura; Instituto de Geodesia y Geofísica Aplicadas, FI. Universidad de Buenos Aires

^b Dto. de Matemática, FI; CONICET Instituto de cálculo, FCEN. Universidad de Buenos Aires

jclavijo@fi.uba.ar

Resumen

Los parámetros que describen la geometría de posición y movimiento de un conjunto de sitios de observación geodésica sobre la tierra constituyen un marco de referencia geodésico. El modelo matemático que describe la relación entre esos parámetros y las observaciones realizadas es central para determinar la dinámica de la corteza terrestre. En los últimos años, con el avance en las mediciones geodésicas, el paradigma de trabajo ha migrado. Desde la búsqueda de un único marco de referencia, expresado en posiciones y velocidades, hacia a la creación de marcos de referencia regionales, recalculados en forma frecuente y agregando una mayor cantidad de consideraciones geofísicas. Nuestro trabajo se centra en desarrollar un enfoque bayesiano para la construcción de los marcos de referencia. Integramos en un solo modelo la geometría y la geofísica del problema. Esto incluye el modelado del movimiento tectónico, de la dinámica estacional de las posiciones geodésicas, y de errores introducidos por la incertidumbre del marco de referencia dentro del que se procesan las mediciones. Se propusieron diferentes descripciones para cada término involucrado, así como para las covarianzas regionales y globales de los diversos parámetros involucrados. El principal aporte del modelo bayesiano es obtener, junto con los parámetros que tradicionalmente describen un marco de referencia, una estimación de la incertidumbre y validez del modelo. No es menor considerar que esto permite obtener una metodología para evaluar si el marco de referencia mantiene su validez ante la ocurrencia de un evento disruptivo, como puede ser un sismo.

Abstract

Geodetic reference frames are formed by the parameters describing the geometry of a network of earth fixed observation sites, its positions and movements. The mathematical model describing the relation between those parameters and the geodetic observations is crucial for the determination of the earth crust's dynamics. In recent years, with the advances in geodetic measurement, there was a paradigm shift. From the determination of a unique global reference frame, expressed as a set of coordinates of known sites and its velocities, till the creation of regional reference frames, frequently recalculated and with more geophysics-aware trajectory models. This work is aimed to develop a bayesian formulation of the reference frame's determination problem. The model integrates both the geometric and geophysical aspects of the problem, including tectonic motion rates, seasonal dynamics and coordinate system uncertainties induced by the geodetic observation processing methods. Different descriptions for each term involved were proposed as well as for the

regional and global covariances of the parameters. The main contribution of a bayesian model is the simultaneous estimation of the parameters and its uncertainties. It is worth it to mention that this approach provides also a way to seamlessly test if the model holds valid after a disruptive event, such as an earthquake.

Palabras clave: Geodesia, Marco de Referencia, Inferencia Bayesiana, Regularización

Introducción

El presente trabajo se ordena de la siguiente manera. En primer lugar, se expone cuáles son las condiciones generales del problema de la determinación de un marco de referencia terrestre y del modelo matemático que define su relación con las observaciones geodésicas. Teniendo en cuenta este modelo, se describe la forma en que vienen dadas las observaciones geodésicas, como un sistema de ecuaciones normales y se observa cómo la definición del marco de referencia se relaciona a la regularización necesaria para resolver el sistema. Luego se mostrará que esta regularización tiene una conexión con el uso de un prior Bayesiano. Finalmente se propone un modelo Bayesiano para el problema y se analizan las ventajas y posibilidades que brinda, y su relación con otros modelos en uso.

Marcos de referencia geodésicos

Cuando hablamos de un marco de referencia geodésico, estamos hablando de la materialización de un sistema de referencia geodésico. Este último es el modelo matemático que describe la posición de un conjunto de puntos sobre la corteza terrestre con respecto a la ubicación de una terna cartesiana. Este sistema de referencia es un modelo paramétrico, y el cálculo de un juego de parámetros que se ajusten a un conjunto de observaciones geodésicas es lo que se conoce como materialización.

Considerando la dinámica de la corteza terrestre, es necesaria una definición del sistema de referencia que tenga en cuenta los movimientos de las placas tectónicas que la forman, de manera que la posición de un sitio quede definida para un período de tiempo largo. Esta característica se conoce como estabilidad del marco de referencia.

Es por esto que la geodesia materializa los marcos de referencia a partir de asignar a un conjunto de sitios de observación sobre la corteza terrestre un juego de posiciones, velocidades y en ocasiones también aceleraciones, tomadas en referencia a un tiempo - época- de definición del marco de referencia.

El principal obstáculo para esto es que ningún método de observación geodésica permite acceder en forma directa a coordenadas con respecto a una terna cartesiana fija, dado que en todos los casos hay una dependencia directa o indirecta de la observación en un sitio con respecto a la observación en otro u otros.

Modelo matemático del marco de referencia terrestre

Para poder describir el marco de referencia en términos de posiciones y velocidades, se construye un sistema de ecuaciones lineales que incluyen estos parámetros, junto con otros que contemplan las posibles indeterminaciones del sistema de coordenadas (en la forma de rotaciones, traslación o escala). Es importante notar que, para tener en cuenta la marea terrestre, efectos de carga, y otras señales geofísicas que pueden ser modeladas, el sistema de ecuaciones no modela directamente para cada sitio i la posición X^i sino un residuo con

respecto a una posición inicial r^i sumada a señales deterministas m^i calculadas según modelos físicos.

Cada conjunto de posiciones x_k^* provenientes del cálculo a partir de un conjunto de observaciones geodésicas se llama una solución individual. Cada una de ellas tiene asociado su propio sistema de coordenadas k , llamado marco de referencia de la solución individual, y su tiempo de observación t_k . El marco de referencia que es objeto de la materialización se conoce como marco de referencia de combinación.

El sistema de ecuaciones se expresa entonces como

$$\begin{aligned} x_k^i - r^i - m^i(t_k) &= x_0^i + (t_k^i - t_0) \dot{x}_0^i \\ &\quad + T_k + D_k x_0^i + R_k \mathcal{X}_0^i \\ &\quad + (t_k^i - t_0) [\dot{T}_k + \dot{D}_k x_0^i + \dot{R}_k \mathcal{X}_0^i]^{(1)} \\ \dot{x}_k^i &= \dot{x}_0^i T_k + \dot{D}_k x_0^i + \dot{R}_k \mathcal{X}_0^i, \end{aligned}$$

donde:

- x_k^i es la posición del sitio de observación i en el tiempo t_k , provisto por la k -ésima solución individual.
- x_0^i es la posición del sitio de observación i en el marco objetivo.
- r^i es la posición aproximada del sitio i , y es una constante.
- m^i es la función del tiempo que modela la señal determinista de efectos geofísicos sobre el sitio i .
- t_k es el tiempo de observación de la k -ésima.
- T_k, D_k, R_k son traslación, escala y rotación del sistema de coordenadas de la k -ésima solución para compatibilizarlo con el marco de referencia objetivo, $k = 0$.

Tomaremos este modelo como referencia, aún cuando hay modelos más complejos que incluyen términos periódicos o ecuaciones adicionales para los parámetros de orientación del eje terrestre. Esto no va en desmedro del desarrollo de las secciones que siguen, dado que se trata igualmente de modelos lineales. Ver por ejemplo el trabajo de Altamimi [1].

Es importante también considerar, que la validez de este modelo depende de la distribución de los puntos de observación, dado que hay zonas donde las características geológicas no permiten esta descripción del movimiento.

La naturaleza de las observaciones geodésicas

Las observaciones de posiciones geodésicas surgen de la resolución de problemas inversos con gran cantidad de parámetros. La solución de estos sistemas suele implementarse partiendo de valores aproximados. Las posiciones calculadas se obtienen como la solución de mínimos cuadrados de un problema lineal, $b = Ax$.

Sea x^* una solución del problema de mínimos cuadrados $\min_x \|b - Ax\|_2^2$, y $\Lambda^* := A^T A$. Observemos que, x^* es única si y sólo si $\ker(\Lambda^*) = \{0\}$. En dicho caso, tenemos que

$$x^* = \Sigma^* A^T b,$$

donde $\Sigma^* := \Lambda^{*-1}$ y Λ^* resulta ser la matriz de precisión de x^* .

Sin embargo, por la naturaleza de las observaciones geodésicas, en general $\ker(\Lambda^*) \neq \{0\}$. En consecuencia, en lugar de informar una solución del sistema, algunos centros de procesamiento informan Λ^* y $A^T b$.

Más frecuentemente, se considera la solución de mínimos cuadrados generalizados (GLS), la cual resuelve utilizando la distancia de Mahalanobis $\min_x \|b - Ax\|_{\Lambda_c}^2$. Como en el caso anterior, tomando como $\Lambda^* := A^T \Lambda_c A$, si $\ker(\Lambda^*) \neq \{0\}$ la única solución de dicho problema es:

$$x^* = \Sigma^* A^T \Lambda_c b, \quad \Sigma^* := \Lambda^{*-1}.$$

Esta versión generalizada puede obtenerse al suponerse cierta dependencia entre los errores de las observaciones; más precisamente,

$$b + \varepsilon_b = Ax, \quad \varepsilon_b \sim \mathcal{N}_n(0, \Sigma_c), \quad \Sigma_c := \Lambda_c^{-1}.$$

(2)

Indeterminación de las observaciones

Aún en el caso en que Λ_* no sea invertible, puede obtenerse una solución al problema de mínimos cuadrados utilizando la pseudo-inversa de Moore-Penrose y resulta ser, de todas las soluciones posibles, aquella que minimiza la norma L_2 . Sin embargo, en el contexto de marcos de referencia geodésicos debemos tener en cuenta que, dado que la solución está compuesta por posiciones de puntos sobre la tierra ($\approx 6.4 \times 10^6 m$) y con variaciones del orden de los centímetros o incluso menores ($\approx 10^{-2}$), la minimización de esta norma es un problema numéricamente inestable.

Aún si se obviarán las imprecisiones aritméticas, la indeterminación causada por la orientación del sistema de coordenadas continúa estando presente.

Regularización de las observaciones

Es por esto que, para regularizar el sistema de ecuaciones, debe incluirse alguna clase de conocimiento previo sobre el mismo. Entre las de mayor utilización, pueden encontrarse dos tipos de regularización.

Un método consiste en la regularización a partir de agregar ecuaciones de posición de puntos seleccionados (modificando A y b correspondientemente), usando posiciones aproximadas. El otro método consiste en operar sobre Λ^* para completar su rango.

Regularización por ecuaciones agregadas

Las ecuaciones GLS para el primer método mencionado son:

$$b = \begin{bmatrix} b_o \\ b_c \end{bmatrix}, \quad A = \begin{bmatrix} A_o \\ A_c \end{bmatrix}, \quad \Sigma^{-1} = \begin{bmatrix} \Sigma_o^{-1} & 0 \\ 0 & \Sigma_c^{-1} \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned} \Sigma^{*-1} &= A^T \Sigma^{-1} A \\ &= A_o^T \Sigma_o^{-1} A_o + A_c^T \Sigma_c^{-1} A_c, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} x^* &= \Sigma^* A^T b \\ &= (A_o^T \Sigma_o^{-1} A_o + A_c^T \Sigma_c^{-1} A_c)^{-1} (A_o^T \Sigma_o^{-1} b_o + A_c^T \Sigma_c^{-1} b_c), \end{aligned}$$

donde las letras o y c refieren a observaciones y regularización respectivamente.

Regularización descomponiendo el error en relativo al sistema de coordenadas e intrínseco

En el contexto de GLS, la descomposición del error en un término intrínseco a las observaciones y otro relativo al sistema de coordenadas [2], se traduce en descomponer Λ_c en la suma de dos términos Ψ y \mathcal{E} , obteniendo que

$$x^* = (A^T \Psi A + A^T \mathcal{E} A)^{-1} (A^T \Psi b + A^T \mathcal{E} b), \quad (3)$$

donde $\Psi = \Sigma_0^{-1}$, $\mathcal{E} = \mathcal{J}(\Sigma_{TRD}^{-1})$, siendo \mathcal{J} una transformación lineal, y Σ_{TRD} una matriz de covarianzas asociada a los parámetros de transformación entre el marco de referencia de la solución individual y el combinado. La transformación \mathcal{J} se define a partir de la linealización de una transformación de 7 o 14 parámetros aplicada sobre las coordenadas aproximadas de los sitios de observación, según está detallado en el trabajo de Sillard [2] (ecuación 8, sección 2.3)

La expresión (3) puede expresarse en términos de la solución del problema de mínimos cuadrados con regularización de Tikhonov, $\min_x \|b - Ax\|_P^2 + \|x - x_0\|_Q^2$, que es

$$x^* = (A^T P A + Q)^{-1} (A^T P b + Q x_0), \quad (4)$$

cuando se determinan

$$P = \Psi, \quad Q = A^T \mathcal{E} A, \quad x_0 = (A^T \mathcal{E} A)^{-1} A^T \mathcal{E} b. \quad (5)$$

Cabe observar que $x_0 = \operatorname{argmin}_x \|b - Ax\|_{\mathcal{E}}^2$, y puede interpretarse como una solución de GLS, donde Σ_c -ver (2)- contiene sólo información sobre los errores que provienen de la indeterminación del sistema de coordenadas.

Interpretación bayesiana

Consideremos el modelo de regresión lineal bayesiana,

$$b_i = a_i^T X + \varepsilon_i, \quad i = 1, \dots, n,$$

cuya forma matricial (conservando la notación de las secciones previas) es

$$b = AX + \mathcal{E}_b.$$

En el marco bayesiano, se agregan los siguientes supuestos:

$$X \sim \mathcal{N}_p(x_0, Q^{-1}), \quad \mathcal{E}_b \sim \mathcal{N}_n(0, P^{-1}),$$

siendo X y \mathcal{E}_b independientes.

Observemos que el MAP de este modelo bayesiano queda en correspondencia con la solución expresada en (4). Esto, en vistas del vínculo expresado en (5), nos da una interpretación bayesiana de los métodos basados en GLS con regularización.

Formulación bayesiana del marco de referencia terrestre

El análisis de los antecedentes nos muestra que la regularización aplicada sobre las observaciones, para utilizarlas en el modelo de las ecuaciones (1) puede reformularse según la forma de Tikhonov, y en consecuencia tiene una interpretación bayesiana.

Partiendo de esto, proponemos una nueva formulación bayesiana del problema, para luego poder realizar inferencia sobre los parámetros del modelo.

Modelo lineal

Planteamos el modelo a partir de (1), separando los parámetros en dos conjuntos de vectores aleatorios independientes, a los que llamamos Π^i y Γ_k . Los vectores Π^i corresponden a aquellos parámetros que describen el movimiento de cada estación, y los Γ_k a aquellos que compatibilizan los marcos de referencia. El modelo queda entonces expresado como

$$\begin{aligned} S_k^i &= X_k^i - r^i - m^{r^i}(t_k), \\ &= w_k^T \Pi^i + z^i{}^T \Gamma_k + \mathcal{E}_k^i, \end{aligned} \quad (6)$$

donde $\Pi^i: \{\mathcal{X}_0^i, \dot{\mathcal{X}}_0^i, \dots\}$, $\Gamma_k: \{T_k, R_k, D_k\}$, y z^i, ω_k son las características espaciales y temporales respectivamente, descriptas debajo.

w_k consiste en un vector de características temporales $\phi_1(t_k), \dots, \phi_f(t_k)$ conformado por un conjunto de f funciones del tiempo $\{\phi_1, \dots, \phi_f\}$. En el caso más simple $f = 2$; $\phi_1 = 1$; $\phi_2 = t_k - t_0$, pero suelen agregarse otro tipo de funciones.

z^i se corresponde con la transformación \mathcal{T} descripta anteriormente.

Las distribuciones a priori de todos los vectores Π , Γ y \mathcal{E} son normales multivariadas, siendo independientes entre sí. Las independencias asumidas tienen su base en que las trayectorias de los sitios de observación son independientes de la incertidumbre del marco de referencia. Sin embargo, sí se tienen en consideración dependencias presentes entre cada par de estaciones (correlaciones espaciales entre las trayectorias de los sitios) y entre cada par de tiempos.

La inferencia del modelo descripto en (6) se realizará mediante la resolución de dos modelos bayesianos de regresión lineal multi-respuesta, cuya descripción se detalla debajo.

Modelo bayesiano de regresión lineal multi-respuesta (MBLR)

Formulación del modelo

En el marco de regresión lineal, consideremos la situación en la cual tenemos n observaciones multivariadas $b_i = (b_{i,1}, \dots, b_{i,m})$, $i = 1, \dots, n$, las cuales dependen linealmente de vectores de k características a_i^T de la siguiente manera,

$$b_i^T = a_i^T X + \mathcal{E}_i^T, \quad (7)$$

dónde $X = [X_1 | \dots | X_m] \in \mathbf{R}^{k \times m}$ (m mecanismos distintos, uno por cada variable observada), y $\mathcal{E}_i = (\mathcal{E}_{i,1}, \dots, \mathcal{E}_{i,m})$ son los errores (correlacionados) de cada variable observada.

Para simplificar la notación, escribimos las ecuaciones en su forma matricial,

$$\mathbf{b} = AX + \mathbf{E}, \quad (8)$$

donde se asumen las siguientes distribuciones a priori:

$$\Sigma_{\mathcal{E}} \sim \mathcal{W}^{-1}(V_0, \nu_0), \quad \mathcal{E}_i | \Sigma_{\mathcal{E}} \sim \mathcal{N}_m(0, \Sigma_{\mathcal{E}}),$$

$$X|\Sigma_{\mathcal{E}} \sim \mathcal{MN}_{k \times m}(x_0, \Lambda_0^{-1}, \Sigma_{\mathcal{E}}).$$

Las letras \mathcal{W}^{-1} , \mathcal{N} , \mathcal{MN} hacen referencia a las distribuciones inversa de Wishart, Normal Multivariada y Normal Matricial, respectivamente.

Dicho modelo, puesto que es conjugado puede inferirse de manera exacta, siendo su posterior,

$$\begin{aligned} \Sigma_{\mathcal{E}}|\mathbf{b} &\sim \mathcal{W}^{-1}(V_n, \nu_n), \quad \nu_n = \nu_0 + n, \\ V_n &= V_0 + (\mathbf{b} - AX_n)^T(\mathbf{b} - AX_n) \\ &\quad + (X_n - X_0)^T \Lambda_0 (X_n - X_0), \\ X|\mathbf{b}, \Sigma_{\mathcal{E}} &\sim \mathcal{MN}_{k,m}(X_n, \Lambda_n^{-1}, \Sigma_{\mathcal{E}}), \quad \Lambda_n = A^T A + \Lambda_0, \\ X_n &= \Lambda_n^{-1}(A^T \mathbf{b} + \Lambda_0 X_0). \end{aligned}$$

Inferencia del modelo propuesto en dos etapas

A continuación, hacemos uso del modelo planteado en el apartado anterior para realizar inferencia de los parámetros presentes en (6). Se infieren los parámetros de dos problemas MBLR: uno espacial donde se condiciona sobre los parámetros temporales Γ_k y se infieren los parámetros espaciales Π^i ; y otro temporal donde los roles se intercambian.

Inferencia espacial: Condicionando a $\Gamma_k = \gamma_k$, para cada vector canónico $e_j, j = 1, 2, 3$, definimos

$$b_{k,i}^j := S_k^i e_j - z^i \gamma_k, \quad a_i^j := w_k, \quad X_i^j := \Pi^i e_j.$$

Es decir, cada observación para cada estación constituye una respuesta mientras que cada tiempo representa un dato.

Inferencia temporal: La inferencia de los parámetros Γ sigue de manera análoga condicionando a $\Pi^i = \pi^i$ y definiendo

$$b_{i,k}^j := S_k^i e_j - w_k^T \pi^i, \quad a_k^j := z^i, \quad X_k^j := \Gamma_k.$$

Luego de iterar este proceso de dos etapas, se obtiene una aproximación conjunta de los parámetros Π^i, Γ_k de la misma manera que sucede al realizar Gibbs Sampling.

Modelo lineal Gauss-Markov

Analizando la bibliografía podemos hallar un antecedente cercano a la formulación bayesiana del problema que estamos tratando. Se trata del trabajo descrito en [3] y analizado en profundidad en [4], que plantea una solución a la determinación del marco de referencia terrestre utilizando el filtro Kalman y el suavizado RTS [5]. Vale aclarar que estos trabajos parten de la interpretación de cuadrados mínimos de estos algoritmos, pero la formulación bayesiana queda implícita en su modelo. Este enfoque está entre los más actuales y sirve de referencia y punto de comparación.

Planteado un modelo lineal que describe la observación número k de un sistema como

$$Y_k = H\beta_k + \varepsilon_k,$$

siendo H una matriz de dimensión adecuada, β y $Y|\beta$ procesos con distribución gaussiana y propiedad de markov, se puede resolver en forma exacta, mediante los algoritmos de filtro de Kalman y suavizado RTS respectivamente, las distribuciones a-posteriori $P(\beta_k|y_{1:k})$, y $P(\beta_k|y_{1:T})$, donde $k \in \{1, \dots, T\}$.

formulación del modelo

Se parte de una representación de espacio de estados de la posición X_k^i , donde el vector de estados $\beta_k = \{X_k, V, S_k, S_{k-1}, \Gamma_k\}$, siendo V velocidades, $S = \{S_0, S_1, \dots, S_k\}$ una señal armónica observada en los tiempos t_0, t_1, \dots, t_k , y $\Gamma_k: \{T_k, R_k, D_k\}$ parámetros de transformación de los sistemas de coordenadas. Se define una transformación lineal $U \beta_k \rightarrow \beta_{k+1}$ de modo que

$$\beta_k | \{\beta_0, \dots, \beta_{k-1}\} = \beta_k | \beta_{k-1} \sim \mathcal{N}(U\beta_{k-1}, \Sigma_{\beta,k}). \quad (9)$$

Las posiciones observadas $y_k: \{x_k^{*0}, \dots, x_k^{*n}\}$ de n estaciones en la solución individual k , se modelan como

$$Y_k | \{\beta_0, \dots, \beta_k\} = Y_k | \beta_k \sim \mathcal{N}(H\beta_k, \Sigma_k), \quad (10)$$

con H una transformación lineal.

La principal diferencia de este modelo con (1) es que aparece un término $E^i = X_k^i - X_1^i - S_k^i - V_k^i t_k$ que representa un movimiento browniano, que tiene covarianza temporal.

Las expresiones (9) y (10) describen un modelo lineal de gauss-markov, sobre el que puede hacerse inferencia bayesiana para calcular las distribuciones a-posteriori $P(\beta_k|y_{1:k})$, y $P(\beta_k|y_{1:T})$.

distribuciones a-priori del modelo

Los algoritmos para hacer inferencia sobre este modelo son iterativos y parten de una distribución a priori de

$$\beta_0 \sim \mathcal{N}(\beta_0, \Sigma_0)$$

, donde los parámetros β_0 y Σ_0 son definidos por el usuario. Luego, en cada iteración utiliza la observación y_k y las matrices de covarianza $\Sigma_{\beta,k}$ y Σ_k de (9) y (10).

En las implementaciones citadas se utiliza una única $\Sigma_{\beta,k}$ para todo k , con una estructura que supone independencia de cada X_k^i . Para Σ_k se utiliza Λ_c^{-1} descrita anteriormente. Nótese que esto último, tal como ya se mencionó, implica suponer información a-priori sobre la distribución de Γ_k .

limitaciones de este modelo

Este modelo parte de fijar la distribución a-priori de β_0 , y no permite incluir explícitamente ningún tipo de conocimiento general sobre la distribución general de β . Esto sería útil en los casos en los que se necesita materializar un marco de referencia alineándolo a otro, como cuando se trabaja a nivel regional. El modelo tampoco permite parametrizar la covarianza de las observaciones, lo cual sería de utilidad para incluir en el modelo errores que en caso contrario deben ser filtrados en pasos posteriores [6].

También es importante notar que se necesita hacer supuestos adicionales para estimar la calidad con la que de los estimadores para β_k se aproximan a β . (Ver la sección 2.7 del trabajo de Wu y otros [3])

En conclusión, si bien esta solución tiene una interpretación bayesiana, sigue habiendo dificultades en cuanto al modelado de las covarianzas espacio-temporales, y a las estimaciones de los errores asociados a los parámetros del modelo, que podrían atacarse con otros modelos bayesianos.

Consideraciones y trabajo futuro

El modelo presentado en este trabajo constituye una primera propuesta para introducir información disponible sobre la dependencia entre los parámetros de las diferentes estaciones, así como también entre los errores de observación. Pensamos explorar otras maneras de agregar esta información, por ejemplo, mediante un modelo que incluya jerarquías sobre las variables espaciales Π , temporales Γ y los errores.

Al incluir la distribución a-priori de las posiciones y velocidades de los sitios de observación, la formulación bayesiana provee una forma natural de incluir la información necesaria para alinear la realización de un marco de referencia a otro al mismo tiempo que se la determina. El mismo principio puede utilizarse por ejemplo para incluir en la determinación un modelo geofísico de velocidades como el NNR-NUVEL-1A, utilizado en la materialización de ITRF2000 y, a través de la alineación con este, de las siguientes realizaciones de ITRF.

La formulación propuesta constituye un trabajo en progreso, donde además de enfocarnos en el modelado debemos enfocarnos en los métodos de inferencia, que en última instancia determinan las limitaciones que se imponen al momento de realizar el cálculo. Es por esto que partimos por un modelo multi-respuesta que tiene la ventaja de permitir realizar inferencia exacta con un costo computacional bajo. Sin embargo, estamos explorando distintos métodos de inferencia y evaluando los costos computacionales que se asocian a agregar complejidad al modelo.

Referencias

- [1] Altamimi, Z.; Rebischung, P.; Métivier, L.; Collilieux, X. (2016) Itrf2014: A New Release of the International Terrestrial Reference Frame Modeling Nonlinear Station Motions. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth* 121 (8): 6109–31.
- [2] Sillard, P.; Boucher C. (2001) A Review of Algebraic Constraints in Terrestrial Reference Frame Datum Definition. *Journal of Geodesy* 75 (2): 63–73.
- [3] Wu, X.; Abbondanza C.; Altamimi, Z.; Chin, T.M.; Collilieux X.; Gross R.S.; Heflin, M.B.; Jiang, Y.; Parker J.W. (2015) KALREF Filter and Time Series Approach to the International Terrestrial Reference Frame Realization. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth* 120 (5): 3775–3802.
- [4] Abbondanza C.; Toshio M.C.; Gross R.S.; Heflin M.B.; Parker J.W.; Soja B.S.; Wu X. (2020) A Sequential Estimation Approach to Terrestrial Reference Frame Determination. *Advances in Space Research* 65 (4): 1235–49.
- [5] Sarkka, S. (2013) *Bayesian Filtering and Smoothing*. Cambridge, Cambridge University Press. 51-62
- [6] Dong, D.; Fang P.; Bock, Y.; Webb, F.; Prawirodirdjo, L.; Kedar, S; Jamason, P. (2006) Spatiotemporal Filtering Using Principal Component Analysis and Karhunen-Loeve

Expansion Approaches for Regional GPS Network Analysis. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth* 111 (B3).

Simulación de desplazamiento agua-petróleo en medios porosos fracturados utilizando OpenFOAM

Fioroni, Soledad^{a,b}; Larreteguy, Axel E.^a, Savioli, Gabriela B.^c

^a Universidad Argentina de la Empresa (UADE), Instituto de Tecnología (INTEC). Buenos Aires, Argentina

^b CONICET. Buenos Aires, Argentina

^c Universidad de Buenos Aires, Facultad de Ingeniería, IGPUA, Buenos Aires, Argentina
sfioroni@uade.edu.ar

Resumen

Existen numerosos enfoques en la literatura cuando se trata de abordar problemas de flujos multifásicos en medios porosos fracturados. En este trabajo se implementó una variante del conocido método *Single Porosity* en el marco del modelo *Black Oil* en el paquete *porousMultiphaseFoam* del software de código abierto *OpenFOAM*. La técnica *Single Porosity* se basa en representar las fracturas de manera explícita en el dominio, con lo cual se vuelve imprescindible el uso de mallas con refinamientos locales muy importantes. Dado que esto se refleja en un alto costo computacional al intentar simularlas en detalle, se optó por calcular propiedades equivalentes en aquellas celdas que contienen fracturas para poder hacer uso de mallas menos densas y por lo tanto menos costosas. Así, se pudieron simular problemas disponibles en la literatura de flujo bifásico incompresibles en medios porosos con una o más fracturas, en donde se representan con extrema fidelidad tanto las curvas de producción acumulada como los mapas de saturación. Esta herramienta puede tener importantes aplicaciones en la simulación de reservorios convencionales y no convencionales.

Abstract

There are several approaches in the literature to engage multiphase flow in fractured porous media. In this work we implemented a modification of the well-known *Single Porosity* technique within the *Black Oil* model in *porousMultiphaseFoam* in the opensource software *OpenFOAM*. The *Single Porosity* technique is based on representing fractures explicitly in the domain, which implies the use of strong local mesh refinements. Since a detailed simulation of the fractures reflects on a high computational cost, we calculated equivalent

properties on those cells that contain fractures in order to use coarser and less expensive grids. Thus, we were able to simulate cases available in the literature regarding two-phase incompressible flow in porous media with one or more fractures, in which both cumulative oil production and saturation profiles are represented with extreme fidelity. This toolbox may have important applications in conventional and unconventional reservoirs.

Palabras clave: OpenFOAM, flujo bifásico, medio poroso fracturado.

Introducción

La simulación de flujo multifásico en medios porosos es una herramienta de gran interés en diferentes áreas de la ciencia y la ingeniería. Algunos ejemplos de aplicación se encuentran relacionados con estudios de biodegradación [1], tratamiento de desechos y contaminantes [2,3], minería [4], hidrología [5], y yacimientos de hidrocarburos [6-8]. En este trabajo nos enfocamos en este último tipo de problemas, que requieren resolver un sistema acoplado de ecuaciones diferenciales no lineales en derivadas parciales. En particular, para modelar el flujo de fluidos en reservorios de gas o petróleo, se suele implementar una formulación simplificada del modelo composicional, conocida como *black oil*. Dado que ésta es adecuada para describir el comportamiento de hidrocarburos no-volátiles, se la utiliza para simular procesos de recuperación tanto primaria como secundaria.

Esta formulación considera tres fases: gaseosa (g), oleosa (o) y acuosa (w) y no hay transferencia de masa entre la fase acuosa y las otras dos, por lo que la fase acuosa es sólo componente agua (W). Además, la fase oleosa está formada por dos componentes: el gas disuelto medido en condiciones estándar (G) y el petróleo residual (O) que queda cuando el gas es liberado [9].

El modelo matemático se basa en la combinación de las ecuaciones de conservación de masa para cada componente, junto con la ley empírica de Darcy, la cual describe el flujo en el medio poroso de cada fase. A éstas se les suman el modelo termodinámico basado en las mediciones PVT de laboratorio (factores volumétricos de las fases y la solubilidad del gas en el petróleo) [9] y una descripción del reservorio (modelo geológico) [8].

Por su parte, dentro del modelo geológico se define si el medio poroso se encuentra o no fracturado, ya sea con fracturas naturales o hidráulicas. Las formaciones fracturadas consisten en una combinación de un medio de alta permeabilidad y baja capacidad de almacenamiento (fracturas) y de otro de baja o ultra baja permeabilidad con gran capacidad de almacenamiento (matriz). Así, tanto estas fuertes heterogeneidades en el medio poroso, como la conectividad de las fracturas generan un gran impacto en los regímenes de flujo de los fluidos multifásicos [10].

A lo largo de los años se han desarrollado diversos modelos que permiten abordar estos casos. Entre los más tradicionales se encuentran el *Single Porosity* [11], el *Dual Porosity* (junto con sus variaciones) [12,13] y el *Discrete-Fracture Model* [14,15]. Cada uno de ellos busca, con distintas aproximaciones, encontrar un equilibrio entre precisión y costo computacional.

Teniendo esto en cuenta, hemos desarrollado una herramienta dentro del marco del *software* de código abierto *OpenFOAM* [16] que puede abordar problemas de flujo multifásico en medios porosos con y sin fracturas. Particularmente, en este trabajo analizamos casos simplificados de flujo bifásico incompresible agua-petróleo para validar tanto la herramienta como el uso de la misma, y poder luego extenderla a flujos con más fases y con compresibilidad en las mismas.

El trabajo se estructura de la siguiente manera: primero, se describe el modelo *black oil* junto con su implementación numérica en *OpenFOAM*, haciendo énfasis en el tratamiento de las fracturas. Luego, se presentan los resultados numéricos de dos casos de flujo bifásico incompresible que se comparan con una solución semi-analítica y con resultados tomados de la bibliografía.

Modelo matemático

El modelo *black oil* [8,17,18] considera tres fases compresibles: acuosa (w), oleosa (o) y gaseosa (g), y tres componentes: petróleo (O), gas (G) y agua (W).

A diferencia del enfoque general de *OpenFOAM* que consiste en resolver una ecuación modificada de Navier-Stokes, el paquete *porousMultiphaseFoam* establece que el flujo bifásico incompresible en medios porosos requiere la resolución de la ecuación de conservación de masa para cada componente. Extendiéndolo para tres fases compresibles, la ecuación queda expresada como

$$-\nabla \cdot (c_{ij} \rho_j \mathbf{v}_j) + q_i = \frac{\partial}{\partial t} (\phi c_{ij} \rho_j S_j). \quad (1)$$

Aquí, los subíndices i y j denotan los componentes ($i = G, O, W$) y las fases ($j = g, o, w$), respectivamente. Cada c_{ij} representa la fracción másica del componente i en la fase j . El término fuente/sumidero, q_i , representa el caudal másico del componente i por unidad de volumen total. Además, S_j , ρ_j y \mathbf{v}_j son la saturación, densidad y velocidad de Darcy de la fase j , donde

$$\mathbf{v}_j = -\mathbf{K} \frac{k_{rj}}{\mu_j} (\nabla p_j - \rho_j g \nabla D). \quad (2)$$

En la Ec. (2), k_{rj} y μ_j denotan la permeabilidad relativa y la viscosidad de la fase j , D es la profundidad y \mathbf{K} es el tensor de permeabilidad absoluta de la roca.

Por último, las fracciones másicas c_{ij} se determinan usando las hipótesis del modelo *black oil*, es decir, $c_{Wg} = c_{Wo} = c_{Gw} = c_{Ow} = c_{Og} = 0$, $c_{Ww} = c_{Gg} = 1$, y c_{Go}, c_{Oo} se calculan por medio de los parámetros PVT (los factores volumétricos, B_j , y la solubilidad del gas en el petróleo, R_s) de manera que: $c_{Go} = R_s \rho_{GS} / B_o \rho_o$, y $c_{Oo} = \rho_{OS} / B_o \rho_o$, con ρ_{GS} y ρ_{OS} representando las densidades de gas y de petróleo en condiciones estándar [8].

Combinando las Ecs. (1) y (2) se obtienen las llamadas *ecuaciones de saturación* para cada fase y la suma de ellas lleva a una *ecuación de presión*. Las incógnitas son las presiones y las saturaciones de cada fase. Para resolverlo, se introducen las presiones capilares, que dependen de las saturaciones. En un sistema bifásico, la presión capilar se define como la diferencia entre las presiones de las fases no-mojante y mojante. Así, en presencia de 3 fases, oleosa-gaseosa-acuosa, hay 2 presiones capilares independientes, $p_{cow} = p_o - p_w$ (en una roca mojable al agua) y $p_{cgo} = p_g - p_o$ (la fase gaseosa es siempre no-mojante).

Se reemplazan en las ecuaciones diferenciales las presiones de las fases gaseosa y acuosa en términos de la presión de la fase oleosa.

Por último, dado que la saturación de cada fase representa su fracción volumétrica sobre el volumen poral, se tiene que

$$S_g + S_o + S_w = 1. \quad (3)$$

De esta manera, el problema queda definido por las ecuaciones de saturación, la ecuación de presión y la Ec. (3).

Modelo numérico

El sistema de ecuaciones no lineales resultante es tratado de manera secuencial utilizando el método IMPES [9] para desacoplar la presión de las saturaciones. Sin embargo, el problema que suele aparecer cuando se trabaja con flujo trifásico es que la suma de las saturaciones rara vez cumple con la Ec. (3) y eso deriva en errores en el balance de masa.

Habitualmente, se calculan las saturaciones de $N - 1$ fases, y la última se obtiene de la restricción de la suma unitaria (Ec. (3)). El problema de este procedimiento es que lleva a campos de saturaciones inconsistentes con la presión. De esta manera, decidimos adoptar la técnica descrita en [19]. Primero, se resuelve la ecuación de presión de manera implícita, y luego, se calculan las saturaciones de las N fases de manera explícita. Se define $\Delta S = 1 - \sum_{i=1}^N S_i$ como el residuo de saturación relacionado a un cambio de presión por medio del método iterativo de la secante. Entonces,

$$p^{k+1} = p^k - \frac{p^k - p^{k-1}}{\Delta S^k - \Delta S^{k-1}} \Delta S^k, \quad (4)$$

donde p^{k+1} representa la presión a la cual el residuo satisface una tolerancia límite especificada. Dado que la iteración incluye tres puntos ($k - 1$, k y $k + 1$), es necesario contar con un valor inicial para la presión. Una aproximación razonable es $p^1 = p^0 \pm 0.1|\delta p|$, siendo δp el salto de presión original durante el paso temporal. Luego, se debe actualizar la presión y corregir las saturaciones de manera simultánea para mantener la consistencia de los campos.

Al utilizar este método, es importante respetar que los flujos calculados en las caras de las celdas al principio del paso temporal se mantengan sin cambios a lo largo del proceso iterativo. De esta manera, se logran reducir los errores en el balance de masa, conservando la consistencia de los cálculos (es decir, los cálculos conservan volumen y además se corrigen las masas de cada componente).

Por último, dadas las fuertes no linealidades (debidas a las funciones de permeabilidad relativa y de presión capilar), el tratamiento explícito de las ecuaciones puede llevar a inestabilidades numéricas. Por este motivo, se limita el paso temporal implementando tres restricciones diferentes. Las primeras dos corresponden simplemente a la imposición de un Δt_{\max} y de un ΔS_{\max} fijos definidos por el usuario. Para la tercera restricción, el usuario puede elegir entre los siguientes métodos: el primero está relacionado con el número de Courant [20], el segundo se basa en cálculos de los flujos (incluyendo propiedades de los fluidos y de la roca) [21], y el tercero está asociado con el criterio de estabilidad presentado

en [22]. Es importante notar que estas restricciones corresponden a aquellas presentadas en [6], y que aquí se han extendido para una formulación trifásica

Tratamiento de las fracturas

La capacidad de incluir fracturas en el dominio del reservorio es de gran interés en la industria, dado que se busca poder describir los regímenes de flujo de la manera más precisa posible, usando las mallas computacionalmente más eficientes.

En particular, el método *Single Porosity* se basa en representar las fracturas de manera explícita en el dominio, lo cual resulta en un enfoque de gran precisión. Sin embargo, la gran desventaja de este modelo es que, como las celdas de fracturas se tratan de la misma manera que las de la matriz, las heterogeneidades son fuertemente dominantes. Esta complejidad se puede manejar en dominios pequeños, donde los refinamientos de la malla no imponen grandes limitaciones en el paso temporal, mientras que, en problemas de campo, su implementación es prácticamente imposible.

En este trabajo, implementamos en el código una versión modificada del *Single Porosity* en la cual se utilizan propiedades equivalentes para las celdas que contienen fracturas. De esta manera, se puede prescindir del uso de refinamientos locales.

Para poder asegurar una representación física del problema, se define un conjunto de celdas estructuradas y alineadas entre sí que contienen a la fractura, como se muestra en la Figura 1. De esta manera, suponiendo un dominio de $1\text{ m} \times 1\text{ m}$, una fractura que se encuentre a 45° fuerza el uso de una malla no estructurada. Sin embargo, la ventaja más importante que tiene esta disposición es que puede asegurar la conectividad fractura-fractura.

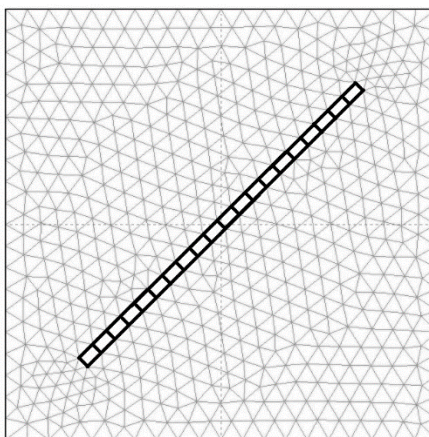


Figura 1: Ejemplo de malla para representar una fractura a 45° dentro del dominio

Por otro lado, dado que la permeabilidad de la fractura presenta una fuerte anisotropía (una permeabilidad muy alta en la dirección longitudinal y muy baja en la dirección transversal), esta manera de representarla permite definir un único tensor de permeabilidad absoluta para todo el “conjunto fractura”.

De todas maneras, el objetivo principal es no requerir fuertes refinamientos de malla para representar a la fractura, y al mismo tiempo tampoco sobrestimarla. Así, introducimos parámetros equivalentes para aquellas propiedades que producen mayor impacto en los

regímenes de flujo: la permeabilidad absoluta y la porosidad. Una aproximación bastante prudente es utilizar una ponderación volumétrica. Entonces, considerando que una celda de ancho (w) representa a una fractura de apertura (a) (siendo (w), a veces, varios órdenes de magnitud mayor), y que la longitud de la celda coincide con la longitud de la fractura, entonces estos parámetros se pueden calcular directamente con $b_{celda} = (a/w)b_{fractura}$, donde b representa tanto porosidad como permeabilidad absoluta.

Además, dado que se toma un conjunto de celdas para la fractura, el volumen de la matriz se ve reducido. Por esta razón, se debe corregir la porosidad de la matriz para mantener el mismo volumen poral: $\phi_m = \phi_{orig} V_{total} / (V_{total} - V_{frac})$.

Resultados

En este trabajo se presentan dos casos simplificados que permiten validar el código. Específicamente, consisten en problemas de desplazamiento de petróleo por agua, como ejemplos característicos de flujo bifásico incompresible en medios porosos.

En una primera instancia abordamos un caso 1D, sin fracturas, comparable con la solución analítica de Buckley-Leverett [23]. Luego, nos enfocamos en un caso 2D con una fractura simple y dos intersecadas, disponible en la literatura [24], y comparamos tanto los perfiles de saturación como la curva de producción acumulada de petróleo.

Caso 1D

Se abordó el clásico problema de Buckley-Leverett: un caso incompresible, bifásico, unidimensional con solución semi-analítica [23]. El objetivo es estudiar el desplazamiento de petróleo por inyección de agua. Consideramos un reservorio de longitud $L = 304.8 \text{ m}$ y área transversal $A = 929 \text{ m}^2$. El pozo inyector y el productor se encuentran en los contornos, $x = 0$ y $x = L$, respectivamente. La permeabilidad absoluta y la porosidad de la roca son $K = 4e - 13 \text{ m}^2$ y $\phi = 0.28$. Las propiedades de los fluidos vienen dadas por $\mu_o = 10 \text{ cp}$, $\mu_w = 1 \text{ cp}$, $\rho_o = 800 \text{ kg/m}^3$, y $\rho_w = 1000 \text{ kg/m}^3$. La saturación irreducible de agua es $S_{wc} = 0.25$ y la residual de petróleo, $S_{or} = 0.20$.

Para las permeabilidades relativas, se usó el modelo de Brooks-Corey [25] que se define como:

$$k_{rw} = k_{rw}^* \left(\frac{S_w - S_{wc}}{1 - S_{wc} - S_{or}} \right)^{n_w} \quad (5)$$

$$k_{ro} = k_{ro}^* \left(\frac{S_o - S_{or}}{1 - S_{wc} - S_{or}} \right)^{n_o} \quad (6)$$

con $k_{rw}^* = 0.3$, $k_{ro}^* = 0.9$, y $n_w = n_o = 2$. Además, se desestima la presión capilar. Inicialmente, se considera que la saturación de agua es mínima $S_w = S_{wc}$ y en $x = 0$ se

inyecta un caudal de agua constante por unidad de área transversal $q_{inj} = 2.13e - 6 \text{ m} / \text{s}$

La solución semi-analítica se caracteriza por una discontinuidad que representa un frente abrupto de avance del fluido desplazante. Así, para S_w mayores a la saturación del frente S_{wf} , se puede determinar una distribución de la saturación de agua que responde a la expresión

$$x_D |_{S_w} = t_D \left[\frac{df_w}{dS_w} \right]_{S_w} \quad (7)$$

donde $f_w = \lambda_w / (\lambda_w + \lambda_o)$ es el flujo fraccional de agua (con $\lambda_j = k_{rj} / \mu_j$), $t_D = q_{inj} t / AL\phi$ es el tiempo adimensional (volúmenes porales inyectados), y $x_D = x / L$ es la longitud adimensional. Además, para $S_w < S_{wf}$, S_w se mantiene constante e igual a la saturación de agua inicial S_{wc} . En este caso, $S_{wf} = 0.514$.

La solución numérica presenta, generalmente, un frente difundido por razones inherentes al tratamiento numérico, lo que hace a esta diferencia una candidata perfecta para efectos comparativos. De esta manera, estudiamos la evolución del problema durante 0.5 volúmenes porales inyectados, en un reservorio representado por una malla uniforme de 400 celdas, con un $\Delta t = 6 \text{ h}$ fijo. En la Figura 2 se muestran los perfiles de saturación de agua para los tiempos adimensionales $t_D = 0.1, 0.2$ y 0.4 , comparados con aquellos obtenidos a través de la solución semi-analítica.

Se puede observar que nuestro código no presenta dificultades para representar el problema, produciendo resultados en el cual el frente difiere de la solución semi-analítica dentro de un intervalo del 5% de error (norma $-L_2$).

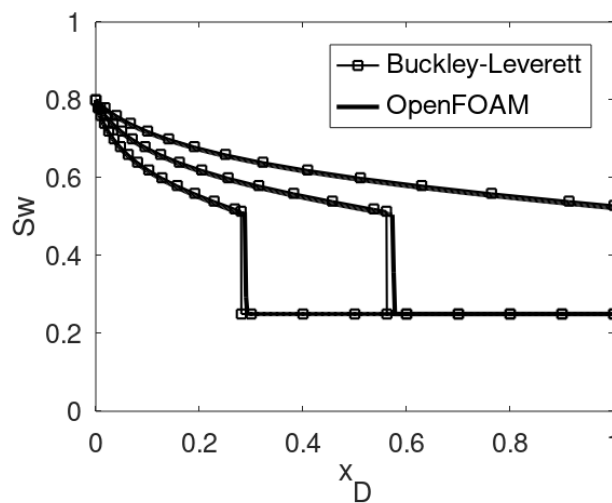


Figura 2: Caso 1D. Perfil de saturación de agua para tiempos adimensionales $t_D = 0.1, 0.2$ y 0.4

Caso 2D

Consideramos un medio fracturado con una fractura horizontal y dos verticales, tal como lo muestra la Figura 3. Este caso, desarrollado en [24], trabaja con un medio de $1\text{ m} \times 1\text{ m}$. La porosidad y permeabilidad de la matriz son $\phi_m = 0.20$ y $K_m = 1e-15\text{ m}^2$, respectivamente. La apertura de la fractura es $a = 0.1\text{ mm}$ ($K_f = a^2 / 12 \approx 844170\text{ mD}$). El medio se encuentra inicialmente saturado con petróleo ($\mu_o = 0.45\text{ cp}$). Se inyecta agua desde la coordenada $(0,0)$ a un ritmo de 0.01 volúmenes porales (PV) por día. Por el vértice opuesto se produce a presión constante. Las permeabilidades relativas siguen una relación lineal, tanto para la matriz como para las fracturas.

Por la orientación que tienen las fracturas, se puede trabajar con mallas tanto estructuradas como no estructuradas. En este caso, mostramos los resultados obtenidos con una malla no estructurada, ya que es la que presenta mayores desafíos a la hora de analizarlo numéricamente.

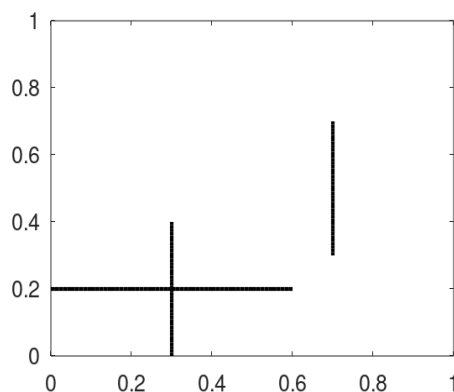


Figura 3: Caso 2D. Representación geométrica del medio poroso fracturado.

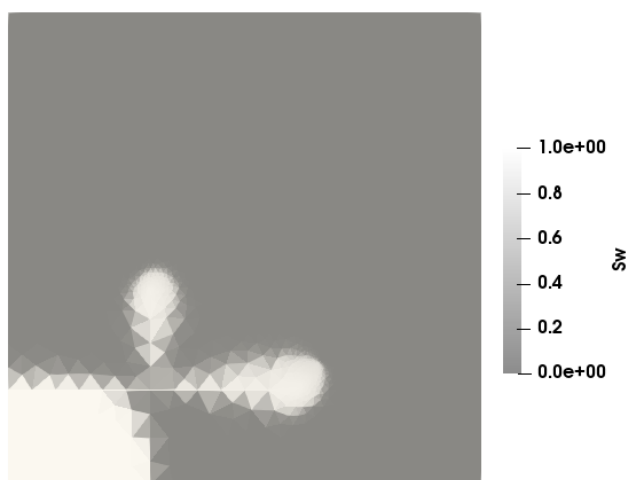


Figura 4: Caso 2D. Perfil de saturación a 0.1 PV inyectados

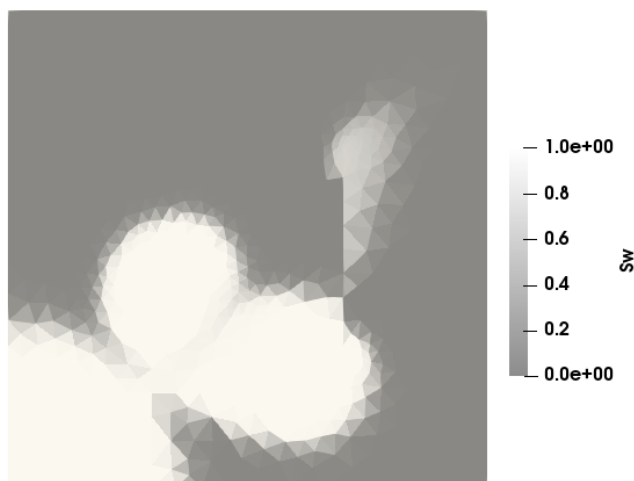


Figura 5: Caso 2D. Perfil de saturación a 0.3 PV inyectados

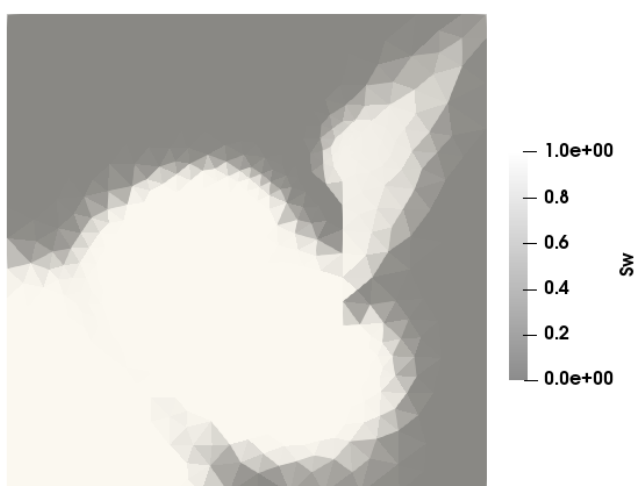


Figura 6: Caso 2D. Perfil de saturación a 0.5 PV inyectados

En las Figuras 4-6 se muestran los mapas de saturación de agua a diferentes tiempos, medidos en cantidad de volúmenes porales inyectados: 0.1, 0.3 y 0.5 PVI. Se puede apreciar que los resultados obtenidos con nuestro código presentan una leve difusión en el frente, con respecto a lo publicado en la referencia (ver [24]). Un frente difundido, generalmente es sinónimo de menor eficiencia, ya que el desplazamiento de una fase por la otra es de menor calidad. Sin embargo, en la Figura 7 se muestran las curvas de producción acumulada de petróleo a lo largo de 2 PVI y de allí se puede deducir que la difusión en el frente resultante en nuestro simulador puede despreciarse.

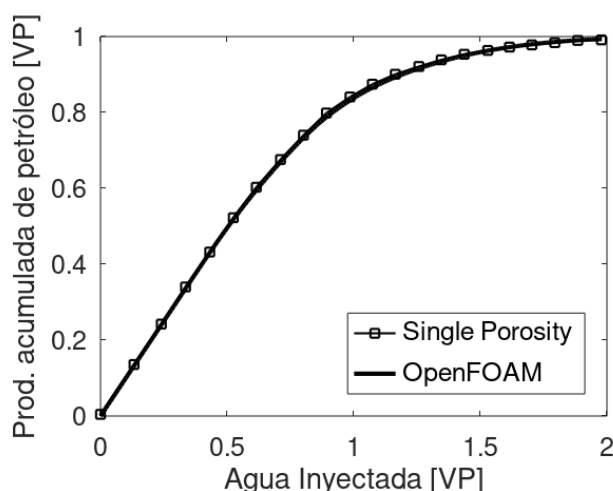


Figura 7: Caso 2D. Producción acumulada de petróleo comparada con Single Porosity [24]

Conclusiones

Se presentaron los primeros resultados de una versión extendida del código *porousMultiphaseFoam*. Esta nueva herramienta, desarrollada para poder abordar problemas del tipo *black oil*, presenta una gran habilidad para reproducir casos simplificados de flujo bifásico incompresible en medios porosos con y sin fracturas.

En particular, se abordó un caso 1D con solución semi-analítica, pudiendo representar una discontinuidad con un nivel extremadamente bajo de error. También se lo probó con un caso 2D tomado de la bibliografía, donde se probó que el *software* desarrollado es capaz de trabajar con fuertes heterogeneidades, como las resultantes de la presencia de fracturas.

Como trabajo futuro, se buscará analizar problemas con flujo multifásico, en donde tanto los fluidos como la roca sean compresibles, incluyendo variaciones de la porosidad con la presión. Como objetivo final, se buscará que esta herramienta sea apta para simular casos de reservorios convencionales y no convencionales fracturados hidráulicamente.

Agradecimientos

Esta investigación fue solventada por la Universidad Argentina de la Empresa y CONICET a través de la beca doctoral ACyT D16T02. G. Savioli agradece a ANPCyT, Argentina (PICT 2015 1909) y Universidad de Buenos Aires (UBACyT 20020190100236BA).

Referencias

- [1] Amani, A., Jalilnejad, E., & Mousavi, S. M. (2018). Simulation of phenol biodegradation by *Ralstonia eutropha* in a packed-bed bioreactor with batch recycle mode using CFD technique. *Journal of industrial and engineering chemistry*, 59, 310-319.
- [2] Baek, S. H., Kim, S. S., Kwon, J. S., & Um, E. S. (2017). Ground penetrating radar for fracture mapping in underground hazardous waste disposal sites: A case study from an underground research tunnel, South Korea. *Journal of Applied Geophysics*, 141, 24-33.
- [3] Klint, K. E. S., Gravesen, P., Rosenbom, A., Laroche, C., Trenty, L., Lethiez, P., ... & Tsakiroglou, C. D. (2004). Multi-scale characterization of fractured rocks used as a means for the realistic simulation of pollutant migration pathways in contaminated sites: A case study. *Water, Air and Soil Pollution: Focus*, 4(4), 201-214.

- [4] Zhang, T., Yuan, L., Yang, K., Liu, Y., Wei, F., & Yu, X. (2021). Modeling of Multiphysical–Chemical Coupling for Coordinated Mining of Coal and Uranium in a Complex Hydrogeological Environment. *Natural Resources Research*, 30(1), 571-589.
- [5] Deng, B., & Wang, J. (2017). Saturated-unsaturated groundwater modeling using 3D Richards equation with a coordinate transform of nonorthogonal grids. *Applied Mathematical Modelling*, 50, 39-52.
- [6] Horgue, P., Soulaire, C., Franc, J., Guibert, R., & Debenest, G. (2015). An open-source toolbox for multiphase flow in porous media. *Computer Physics Communications*, 187, 217-226.
- [7] Pereira, G. G. (2019). Fluid flow, relative permeabilities and capillary pressure curves through heterogeneous porous media. *Applied Mathematical Modelling*, 75, 481-493.
- [8] Fanchi, J. R. (2005). *Principles of applied reservoir simulation*. Elsevier.
- [9] Aziz, K., Settari, A. (1985). *Petroleum reservoir engineering*. Elsevier.
- [10] Mirzaei-Paiaman, A., & Masihi, M. (2013). Scaling equations for oil/gas recovery from fractured porous media by counter-current spontaneous imbibition: from development to application. *Energy & fuels*, 27(8), 4662-4676.
- [11] Sonier, F., Souillard, P., & Blaskovich, F. T. (1988). Numerical simulation of naturally fractured reservoirs. *SPE reservoir engineering*, 3(04), 1114-1122.
- [12] Warren, J. E., & Root, P. J. (1963). The behavior of naturally fractured reservoirs. *Society of Petroleum Engineers Journal*, 3(03), 245-255.
- [13] Elfeel, M. A., Al-Dhahli, A., Geiger, S., & van Dijke, M. I. (2016). Fracture-matrix interactions during immiscible three-phase flow. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 143, 171-186.
- [14] Kim, J. G., & Deo, M. D. (2000). Finite element, discrete-fracture model for multiphase flow in porous media. *AIChE Journal*, 46(6), 1120-1130.
- [15] Jaffré, J., Mnejja, M., & Roberts, J. E. (2011). A discrete fracture model for two-phase flow with matrix-fracture interaction. *Procedia Computer Science*, 4, 967-973.
- [16] OpenCFD (2014), *OpenFOAM - The Open Source CFD Toolbox - User's Guide*, OpenCFD Ltd. United Kingdom, 2nd Edition.
- [17] Chen, Z. (2000). Formulations and numerical methods of the black oil model in porous media. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 38(2), 489-514.
- [18] Fioroni, S., Larreteguy, A. E. & Savioli, G. B. (2021). An OpenFOAM Application for Solving the Black Oil Problem. *Mathematical Models and Computer Simulations*, 13(5), 907-918.
- [19] Daltaban, T. S., Issa, R. I., & Wall, C. G. (1985). Simulation of recovery processes in gas condensate reservoirs. In *Colloque européen sur l'amélioration de la récupération du pétrole*. 3 (pp. 209-218).
- [20] Jasak, H. (1996). Error analysis and estimation for the finite volume method with applications to fluid flows.
- [21] Coats, K. H. (2003). IMPES stability: selection of stable timesteps. *SPE Journal*, 8(02), 181-187.
- [22] Todd, M. R., O'dell, P. M., & Hirasaki, G. J. (1972). Methods for increased accuracy in numerical reservoir simulators. *Society of Petroleum Engineers Journal*, 12(06), 515-530.
- [23] Buckley, S. E., & Leverett, M. (1942). Mechanism of fluid displacement in sands. *Transactions of the AIME*, 146(01), 107-116.
- [24] Karimi-Fard, M., Durlofsky, L. J., & Aziz, K. (2004). An efficient discrete-fracture model applicable for general-purpose reservoir simulators. *SPE journal*, 9(02), 227-236.
- [25] Brooks, R. H., & Corey, A. T. (1964). Hydraulic properties of porous media and their relation to drainage design. *Transactions of the ASAE*, 7(1), 26-0028.

5

Nanopartículas magnéticas para recuperación mejorada en medio poroso 2d

Fossati, Ana B.^a; Roht, Yanina L.^b; Ippolito, Irene^b; Jacobo, Silvia E.^a

^a Universidad de Buenos Aires, Facultad de Ingeniería, Laboratorio Químico de Materiales Magnéticos Aplicados a la Ingeniería, Instituto de Química Aplicada a la Ingeniería, Buenos Aires, Argentina.

^b Universidad de Buenos Aires, Facultad de Ingeniería, Grupo de Medios Porosos, Buenos Aires, Argentina.

afossati@fi.uba.ar

Resumen

Luego de la recuperación primaria y secundaria de petróleo, queda entre el 60-70% del crudo atrapado en el yacimiento. Por ello, existen numerosas investigaciones basadas en la inyección de sustancias en el pozo para aumentar el factor de recobro, dando lugar a los métodos de recuperación mejorada (EOR). Si bien suele inyectarse químicos (CEOR), tanto polímeros como surfactantes, éstos sufren degradación en condiciones de pozo debido a la alta salinidad y temperatura. Por este motivo, el empleo de nanopartículas es una buena alternativa ya que no sufren la degradación originada en polímeros y surfactantes. Además, por su pequeño tamaño acceden al crudo residual ubicado en las gargantas porales del reservorio, logrando reducir la tensión interfacial agua-petróleo, modificar la mojabilidad de la roca y cambiar la viscosidad del fluido de inyección.

En este trabajo se prepararon ferrofluidos acuosos con buena estabilidad usando nanopartículas magnéticas, los cuales se utilizaron para realizar barridos de aceite en una celda de Hele-Shaw que posee una distribución aleatoria de obstáculos con una ocupación del 12%. Se estudió el mejoramiento de la recuperación de aceite se efectuando barridos a diferentes caudales de inyección con ferrofluido a concentración constante de nanopartículas. Se encontró que el volumen de aceite desplazado aumenta un 4% al incrementar el caudal de inyección 5 veces.

Abstract

Around 60-70% of the crude remains stranded after primary/secondary oil recovery. There are several investigations based on the addition of fluid substances to the injection water to

increase the recovery factor, leading to enhanced oil recovery methods (EOR). Although chemicals (CEOR) are usually injected, both polymers and surfactants suffer degradation in reservoir conditions due to high salinity and temperature. For this reason, the use of nanoparticles is a good alternative since they do not suffer degradation like polymers and surfactants. In addition, due to their small size, they access the residual crude located in the poral gorges of the reservoir, reducing the water-oil interfacial tension, modifying the rock wettability and changing the injected fluid viscosity.

In this research, aqueous ferrofluids with good stability were prepared using magnetic nanoparticles, which were used to perform oil scans in a Hele-Shaw cell that has a random distribution of obstacles with a cover 12% of the area of the cell. The improvement of oil recovery was studied by injection with ferrofluid at constant nanoparticle concentration at different flow rates. It was found that the volume of oil displaced increases by 4% when increasing the injection flow 5 times.

Palabras clave: nanopartículas, ferrofluidos, recuperación, medio poroso 2D.

Introducción

La nanotecnología involucra trabajar la materia a escala nanométrica (un nanómetro equivale a la millonésima parte de un milímetro), obteniendo materiales novedosos con diferentes propiedades que se utilizan en diversos campos como la medicina, biotecnología, tratamiento y saneamiento de agua, alimentos, dermatología, la industria textil y la petrolera. Smith y col. [1] realizan un análisis sobre la aplicación de nanotecnología en inmunología, considerando que podría aplicarse en la prevención o tratamiento de enfermedades. En su trabajo, Mehta [2] describe la síntesis y caracterización de nanopartículas magnéticas aplicadas en biotecnología y medicina. Qu y col. [3] proporcionan una descripción general de los avances recientes de la nanotecnología aplicada en el tratamiento de aguas y aguas residuales. Rashidi y col. [4] abordan los usos de la nanotecnología en la producción y procesamiento de alimentos en Estados Unidos. DeLouise [5] describe las interacciones entre las nanopartículas y la piel, y sus aplicaciones terapéuticas. En la industria del petróleo y gas se emplea la nanotecnología para exploración, perforación, refinamiento y tratamiento de aguas residuales. También se aplican para recuperación mejorada de petróleo (Enhanced Oil Recovery: EOR) [6]-[9] ya que solucionan el problema de degradación de productos químicos a escala macroscópica al trabajar en condiciones de pozo a altas temperaturas y salinidades.

En este trabajo se realizan barridos con ferrofluidos (FF) elaborados con nanopartículas a tres caudales diferentes y a concentración constante para estudiar el mejoramiento en la recuperación de aceite obtenida en un medio poroso 2D.

Parte experimental

Síntesis de nanopartículas magnéticas

Las nanopartículas magnéticas utilizadas en este trabajo (MNPs: magnetic nanoparticles) se sintetizaron siguiendo el método de coprecipitación descrito según Fossati y col. [10] preparando las nanopartículas de magnetita (Fe_3O_4) a partir de soluciones acuosas de sulfato ferroso heptahidratado ($\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$) y de cloruro férrico hexahidratado ($\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$) incorporando lentamente una solución acuosa de hidróxido de potasio (KOH) y nitrato de potasio (KNO_3), hasta pH 12.

Preparación de los ferrofluidos

Los ferrofluidos se prepararon dispersando las MNPs en solución salina preparada disolviendo 50 g de cloruro de sodio (NaCl) en 1 litro de agua destilada a 25 °C (pH 5,5 \pm 0,1). Se sonica la solución durante 16 hs para obtener un ferrofluido estable.

Técnicas de caracterización

Las propiedades estructurales de las nanopartículas se analizaron mediante difracción de rayos X (DRX) por medio de un difractómetro Rigaku, empleando radiación CuK α . Las imágenes de microscopía electrónica de transmisión (TEM: transmission electron microscopy) se obtuvieron empleando un equipamiento TALOS F200A. El análisis termogravimétrico (TGA: thermogravimetric analysis) se realizó en un analizador termogravimétrico Shimadzu, DTG-50 en atmósfera de nitrógeno, a 10 Kmin⁻¹. Los espectros de transformada de Fourier en infrarrojo (FTIR: Fourier transform infrared) se midieron con un instrumento 510P Nicolet FTIR y se prepararon pastillas con las nanopartículas y con bromuro de potasio (KBr). Las mediciones magnéticas se llevaron a cabo a temperatura ambiente utilizando un magnetómetro de muestra vibrante (VSM: vibrating simple magnetometer), equipamiento Lakeshore, con ampo externo de hasta 1,5 T. Los ensayos BET (Brunauer–Emmett–Teller) se llevaron a cabo utilizando un analizador de adsorción Micromeritics ASAP 2020 V4.00 (V4.00 H).

Ensayos de desplazamiento de aceite en celda de Hele-Shaw con obstáculos

Se construyó un medio poroso 2D transparente utilizando dos placas de acrílico, sobre una de ellas se fresó numéricamente una distribución aleatoria de obstáculos cilíndricos de 1,4 mm de diámetro y 400 μ m de altura. Estos se encuentran en contacto con ambas placas estableciendo la apertura de la celda H=400 μ m con una fracción de ocupación del 12%, porosidad igual a 0,88.

La celda se colocó horizontalmente sobre un panel luminoso, que posee la característica de emitir luz fría, homogénea y constante en el tiempo. Utilizando una cámara Cool Snap® CF monocromática de 12 bits con una lente Nikon de 20 mm, posicionada en la parte superior, se pudo registrar la intensidad de luz transmitida a través de la celda en niveles de gris y el intervalo de tiempo Δt entre imágenes. En el extremo de la celda se conectó una bomba de jeringas Harvard® Modelo 22 la cual genera un flujo a caudal constante. En la Figura 1 se esquematiza el dispositivo experimental utilizado.

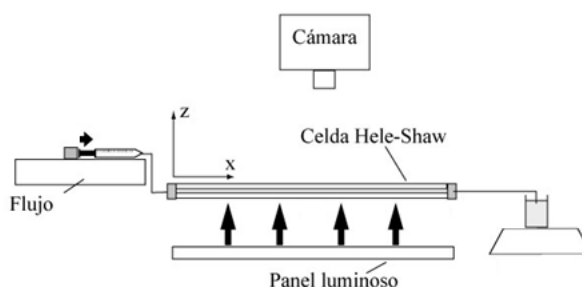


Figura 1: Esquema del dispositivo experimental.

El protocolo experimental que se utilizó consiste en: 1) saturar la celda con aceite de girasol comercial; 2) simular una recuperación secundaria realizando un barrido

inyectando 3 volúmenes porales de solución salina a caudal constante; 3) simular una recuperación mejorada o terciaria inyectando nuevamente 3 volúmenes porales de FF preparados con MNPs, con una concentración de 0,0125 %w/w. Se trabajó a tres caudales diferentes: 0,36; 1,80 y 3,60 mL/min.

Del análisis de las imágenes obtenidas se logró calcular el área ocupada por solución salina luego de su inyección (A_{salina}), el área ocupada por ferrofluido luego del barrido con el mismo (A_{FF}), y además, se conoce el área libre de la celda (A_{libre}) por lo cual se tiene la fracción de ocupación después de cada barrido. Como la apertura de la celda es uniforme, la información de las áreas obtenidas es proporcional a los volúmenes. A partir de la relación entre las áreas ocupadas por cada fluido inyectado se obtuvo la recuperación de aceite extra por la utilización de FF ($\% Rec_{aceite}$), empleando la siguiente ecuación:

$$\% Rec_{aceite} = \left(\frac{A_{FF} - A_{salina}}{A_{libre}} \right) \cdot 100\% \quad (1)$$

Resultados y análisis

Caracterización de las nanopartículas

La Figura 2 presenta el difractograma de las MNPs a fin de analizar la estructura cristalina.

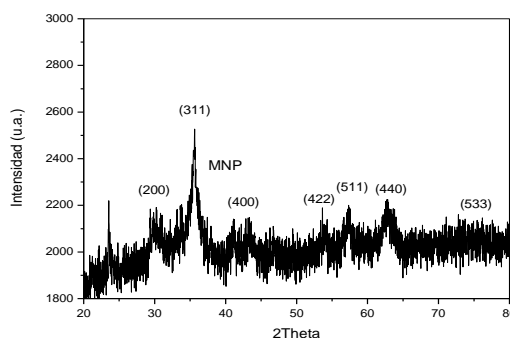


Figura 2: Patrones de difracción de MNPs.

La muestra presenta picos de Bragg correspondientes a la estructura cristalina cúbica espinela, indicando que las muestras presentan fase simple (JCPDS 19-629). Entre paréntesis se identifican los picos de reflexión de Bragg característicos de las ferritas espinelas.

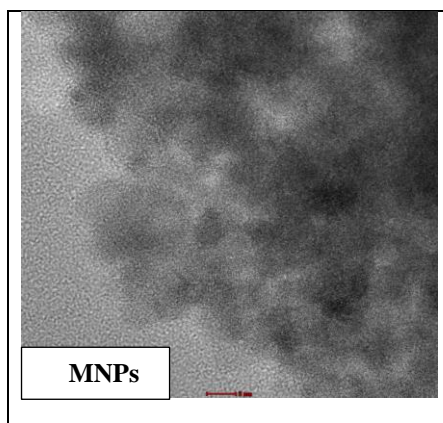


Figura 3: Imagen TEM de MNPs.

La posición de los picos angulares de la fase óxido se corresponden tanto a Fe_3O_4 como a la maghemita ($\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$). El ensanchamiento de los picos (relacionado con el pequeño tamaño de los cristalitos) no permite discriminar entre estas dos estructuras.

En la Figura 3 se muestran las imágenes de las MNPs, y se puede ver una distribución homogénea de tamaños. Las MNPs presentan un tamaño promedio de $7,50 \pm 0,16$ nm.

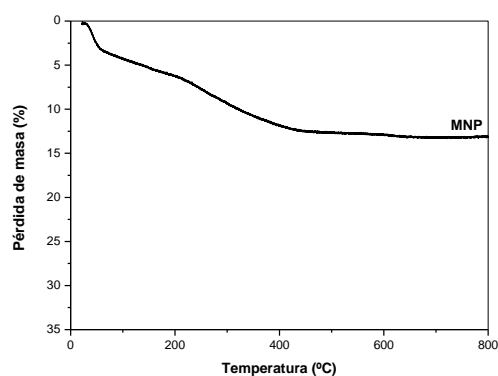


Figura 4: Perfil termogravimétrico de MNPs.

El perfil termogravimétrico de las MNPs se presenta en la Figura 4. La pérdida de masa entre la temperatura ambiente y los 400 °C podría deberse a la pérdida de agua. A partir de los 400 °C la pérdida de masa de las MNPs permanece prácticamente sin variación.

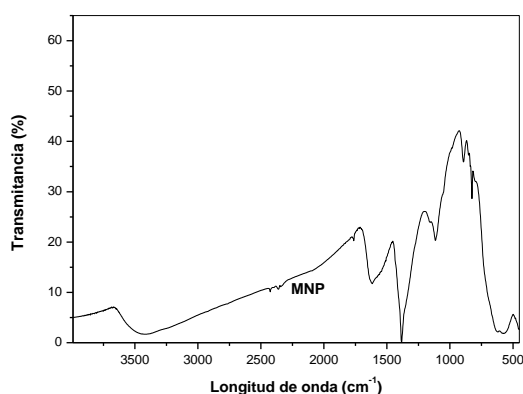


Figura 5: Perfiles FTIR de MNPs.

La Figura 5 muestra el espectro infrarrojo de las MNPs. Se observan los principales picos de adsorción alrededor de los 550 cm^{-1} correspondientes a los enlaces Fe-O [11]. Los picos de las MNPs a 1100 y 800 cm^{-1} pueden deberse a la presencia de Fe-OH superficiales [11], [12]. Y el pico a 3400 cm^{-1} puede corresponderse con el estiramiento O-H y el de 1600 cm^{-1} con el H-O-H, ambos consistentes con la presencia de agua.

El perfil magnético de MNPs (Figura 6) presenta comportamiento superparamagnético con elevado valor de magnetización (Ms) de 92 emu/g y muy bajos valores de campo coercitivo. La curva de saturación muestra una buena estructura cristalina y las líneas se pueden asignar a magnetita y/o maghemita.

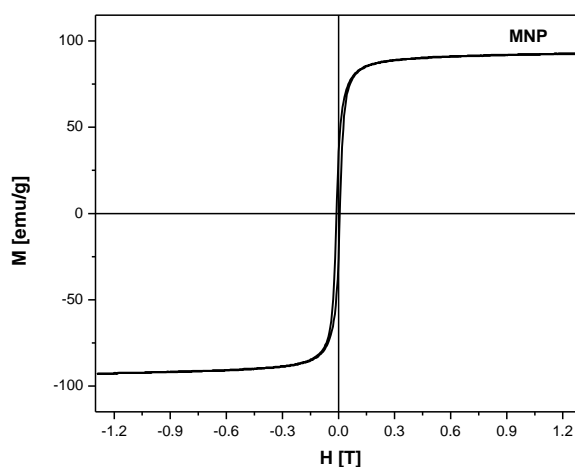


Figura 6: Perfil magnético de MNPs.

La superficie de las MNPs se analizó mediante las isotermas de adsorción y desorción de nitrógeno (N_2) como se muestra en la Figura 7. El área superficial BET de las MNPs se calculó en aproximadamente $80,7\text{ m}^2\text{ g}^{-1}$.

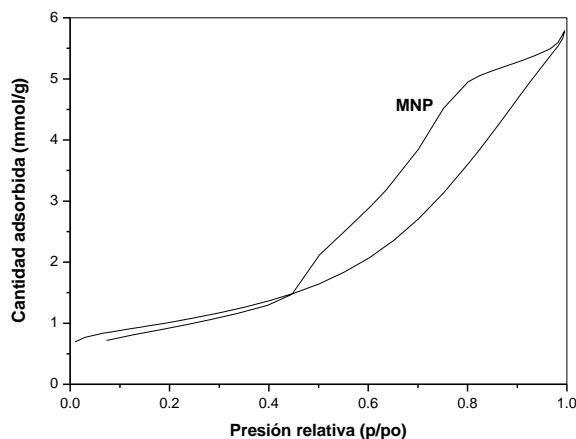


Figura 7: Isotermas de adsorción/desorción de N₂ para MNPs.

Hasta un valor de presión relativa de 0,45 la isoterma representa adsorción en monocapa. A partir de $p/p_0 = 0,45$ se observa un ciclo de histéresis (las curvas de adsorción y desorción difieren), correspondiente a la adsorción en multicapas de sólidos mesoporosos, seguido por condensación capilar, comportamiento típico de las isotermas del Tipo IV. Este tipo de materiales presentan un valor límite en la cantidad de N₂ adsorbida para valores de presión relativa elevados.

Tabla 1: Parámetros obtenidos del análisis BET.

Parámetros MNPs	
Área superficial (m ² g ⁻¹)	80,7
Volumen poral total (cm ³ g ⁻¹)	0,2007
Ancho medio de adsorción poral (Å)	99,5
C	210,4

El parámetro C, que representa la entalpía de adsorción [13], indica la interacción entre las moléculas de adsorbato (N₂) y la superficie de las partículas (Tabla 1).

Ensayos de recuperación mejorada

Una vez que se caracterizaron los MNPs, se probaron los FF para la recuperación de aceite. En la Figura 8 se presentan 3 imágenes obtenidas en una experiencia a caudal 1,80 mL/min: a) celda saturada con aceite, b) final del barrido con agua salina y c) final de la inyección de FF.

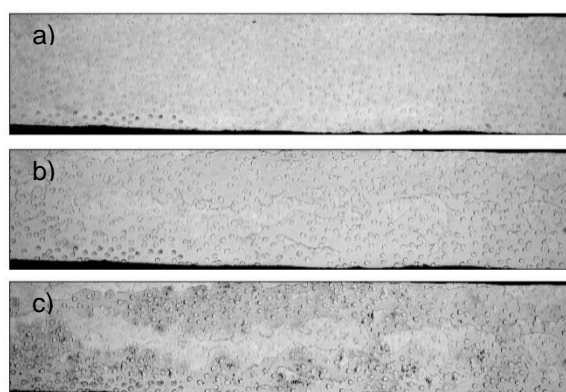


Figura 8: Imágenes de la celda, a) saturada con aceite; b) Luego del barrido con agua salina; c) Luego del barrido con FF, a caudal de inyección de 1,80 mL/min.

En estas imágenes se puede observar que el agua salada irrumpe en el medio y arrastra el aceite dejando zonas aisladas (islas) de aceite de diferentes tamaños. Luego, al inyectar el FF éste fluye preferencialmente por las zonas donde el agua salada desplazó al aceite. Y además logra movilizar aceite extra aumentando la recuperación del mismo.

Mediante el análisis de imágenes, se calcularon las áreas correspondientes y sus fracciones de ocupación; luego con ellas, el porcentaje de aceite extra recuperado por la utilización de FF para los diferentes caudales propuestos. En la Figura 9 se muestran las fracciones de ocupación al finalizar cada barrido en función del caudal de inyección. Se encontró que, para los caudales menores la fracción de ocupación de FF es mayor a la del agua. Mientras que, para el mayor caudal estudiado las fracciones encontradas son iguales. Esto podría deberse a que el caudal de inyección es demasiado alto; el ferrofluido sigue únicamente el camino que recorrió el agua salina y no entra en contacto con el aceite para desplazarlo.

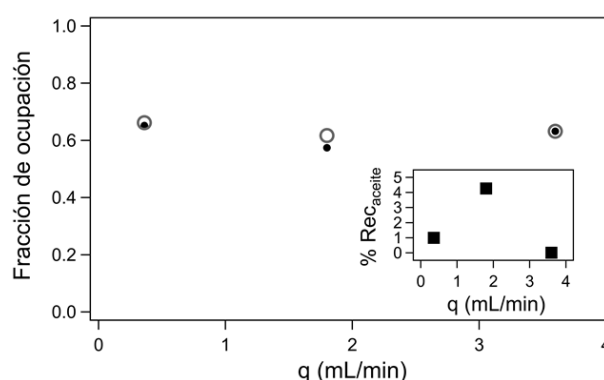


Figura 9: Fracción de ocupación en función del caudal, ● Agua; ○ FF. Inset: Recuperación de aceite en función del caudal.

De esta manera se obtuvo una recuperación de aceite extra luego del barrido de agua salina que simula la recuperación terciaria para los caudales menores (inset Figura 9). Esto podría deberse a que el agregado de las nanopartículas al agua salina genera un aumento de la viscosidad del fluido, mejorando la relación de movilidades agua salina-aceite. Por lo tanto, según las experiencias realizadas, podríamos considerar que sería óptimo realizar las inyecciones a caudal constante de 1,80 mL/min.

Conclusiones

Se sintetizaron de forma exitosa nanopartículas magnéticas y se utilizaron para preparar ferrofluidos que probaron ser sistemas promisorios para barrer aceite de una celda 2D a diferentes caudales de inyección. Se encontró una recuperación extra de aceite para los caudales menores propuestos, resultando el caudal óptimo de inyección 1,80 mL/min para el esquema de trabajo propuesto. Por lo tanto, puede considerarse al FF como potencial material para la recuperación de aceite en medios porosos. Además, consideramos que puede ser prometedora la recuperación de las nanopartículas utilizadas, aprovechando sus propiedades magnéticas, y su reutilización en los barridos con ferrofluidos.

Agradecimientos

El trabajo forma parte del Proyecto UBACyT 2018-2022 (UBACyT N°: 20020170100668BA). Agradecemos a la Dra. Paula Bercoff por las mediciones magnéticas.

Referencias

- [1] Smith, D.; Simon, J.; Baker Jr. (2013). Applications of nanotechnology for immunology. *Nature Reviews Immunology*, 13, 592-605.
- [2] Mehta, R. V. (2017). Synthesis of magnetic nanoparticles and their dispersions with special reference to applications in biomedicine and biotechnology. *Materials Science & Engineering C*, 79, 901-916.
- [3] Qu, X.; Alvarez, P. J.; Li, Q. (2013). Applications of nanotechnology in water and wastewater treatment. *Water Research*, 47(12), 3931-3946.
- [4] Rashidi, L.; Khosravi-Darani, K. (2011). The applications of nanotechnology in food industry. *Critical Reviews in Food Science and Nutrition*, 51(8), 723-730.
- [5] DeLouise, L. A. (2012). Applications of nanotechnology in dermatology. *Journal of Investigative Dermatology*, 132(3), 964-975.
- [6] Mokhatab, S.; Araujo Fresky, M.; Rafiqul, M. (2006). Applications of nanotechnology in Oil and Gas E&P. *Journal of Petroleum Technology*, 58(4), 48-51.
- [7] Kamal, M. S.; Adewunmi, A. A.; Sultan, A. S.; Al-Hamad, M. F., Mehmood, U. (2017). Recent advances in nanoparticles enhanced oil recovery: rheology, interfacial tensión, oil recovery and wettability alteration. *Journal of Nanomaterials*, 2017, 1-15.
- [8] Shamsijezei, H.; Miller, C. A.; Wong, M. S.; Tour, J. M.; Verduzco, R. (2014). Polymer-coated nanoparticles for enhanced oil recovery. *Journal of Applied Polymer Science*, 131(15), 1-13.
- [9] Agista, M. N.; Guo, K.; Yu, Z. (2018). A state of the art review of nanoparticles application in petroleum with a focus on enhanced oil recovery. *Applied Science*, 8(6), 871.
- [10] Fossati, A. B.; Martins A. M.; Jacobo, S. E. (2018). Polymer-functionalized nanoparticles for improving oil displacement. *Advances in Natural Science: Nanoscience and Nanotechnology*, 9, 1-9.
- [11] Huang, X.; Schmucker, A.; Dyke, J.; Hall, S. M., Retrum, J.; Stein, B.; Baxter, D. V.; Dragnea, B.; Bronstein, L. M. (2009). Magnetic nanoparticles with functional silanes: evolution of well-defined shells for anhydride containing silane. *Journal of Material Chemistry*, 19, 4231-4239.
- [12] Chen, W.; Tseng, Y.; Hsieh, S.; Liu, W.; Hsieh, C.; Wu, C.; Huang, C.; Lin, H.; Chen, C.; Lin, P.; Chau, L. (2014). Silanization of solid surfaces via mercaptopropylsilatrane: a new approach of constructing gold colloid monolayers. *RSC Advances*, 4, 46527-46535.
- [13] Brunaur, S.; Emmett, P. H.; Teller, J. E. (1938). Adsorption of gases in multimolecular layers. *Journal of The American Chemical Society*, 60, 309-319.

6

Clasificación de ríos de Argentina utilizando cuantificadores de información

Suriano, Micaela ^a; Caram, Facundo Leonidas ^b

^a. Laboratorio de Hidráulica - Facultad de Ingeniería de la Universidad de Buenos Aires e Instituto Nacional del Agua,

^b. Laboratorio de Redes y Sistemas Móviles - Facultad de Ingeniería de la Universidad de Buenos Aires.

Contacto: msuriano@fi.uba.ar

Resumen

En este trabajo se propone analizar las evoluciones temporales de los caudales de diferentes ríos de Argentina, a partir de cuantificadores de información como la complejidad estadística y la entropía de Shannon. Estas herramientas permiten identificar detalles esenciales de la dinámica de los procesos y cuantificarlos para poder diferenciar los grados de aleatoriedad y caos. Se utiliza la Entropía de Permutación con la distribución de probabilidad de Patrones Ordenados y la divergencia de Jensen-Shannon para calcular el desequilibrio y la complejidad estadística. Se analizan series de caudales diarios en distintas estaciones de ríos de Argentina con el objetivo de identificar en el plano de causalidad complejidad-entropía y poder clasificar los distintos sistemas hidrológicos. Los resultados obtenidos permiten caracterizar el comportamiento de las series elegidas aportando información clave para la modelación hidrológica.

Abstract

This study analyzes the temporal evolution of the discharges of different rivers in Argentina, based on information quantifiers such as statistical complexity and Shannon entropy. The methodology allows to identify essential details of the dynamics of the processes and quantify them, in order to differentiate the degrees of randomness and chaos. Permutation Entropy is used with the probability distribution of Ordinal Patterns and the Jensen-Shannon divergence to calculate the disequilibrium and statistical complexity. Series of daily discharges in different river stations in Argentina are analyzed with the objective of identifying in the complexity-entropy causality plane and being able to classify the different hydrological systems. The results obtained allow characterizing the behavior of the series providing key information for hydrological modeling.

Palabras clave: Complejidad estadística, Entropía de permutación, Hidrología, Recursos Hídricos.

Introducción

El manejo del agua ha sido siempre importante para el progreso de las sociedades, motivo por el cual, a lo largo de la historia, las ingenieras y los ingenieros han desarrollado soluciones con el objetivo de modificar su disponibilidad espacial y temporal y adaptarla a las necesidades humanas. Bajo un contexto mundial de cambio climático que afecta la región y nuestro país, surge la necesidad de evaluar los recursos hídricos disponibles actualmente y en el futuro para optimizar su gestión y planificación.

El ciclo hidrológico es una interacción coordinada y equilibrada entre la atmósfera, el océano y la tierra que controla, entre otras cosas, la temperatura del planeta moviendo grandes cantidades de materia y energía, siendo un sistema complejo con retroalimentaciones activas que actúan a escalas variables [1].

El plano de causalidad de complejidad-entropía (CECP) es un diagrama de diagnóstico que traza la entropía versus la complejidad estadística considerando el desequilibrio, introducido en el análisis de dinámica no lineal para clasificar señales según sus grados de aleatoriedad y complejidad [2]. Tiene varias aplicaciones en el área de hidrología, como es el análisis de 80 series de caudales diarios en distintas estaciones en los Estados Unidos durante un período de 75 años [3].

Hay aplicaciones de la metodología para analizar el comportamiento en la serie de caudales con respecto a cambios en la cuenca, como puede ser la construcción de obras o usos del suelo, como también la influencia del clima y fenómenos de largo plazo. Un ejemplo de aplicación es el trabajo [4] donde estudian la influencia de la construcción de la presa Sobradinho en la serie de caudales diarios del Río São Francisco en Brasil, encontrando los patrones de complejidad y entropía diferentes. Además se confirma la estrecha relación entre la dinámica de los caudales y el fenómeno El Niño Oscilación del Sur.

También se utilizó la complejidad estadística como una métrica de alteración hidrológica a escala de cuenca [5]. A partir de registros diarios de caudales de 22 cuencas urbanas en las ciudades de Estados Unidos, se utilizó la urbanización para representar la alteración hidrológica. Los resultados mostraron que la medida de complejidad en las cuencas urbanas tiende a disminuir con el aumento de la alteración hidrológica mientras que aumenta la entropía.

Metodología

Dada una distribución de probabilidad arbitraria $P = \{p_i: i = 1, \dots, N\}$, la medida de información logarítmica de Shannon está definida por:

$$S[P] = - \sum_{i=1}^N p_i \ln(p_i) , \quad (1)$$

y se considera como la medida de la incertidumbre asociada a los procesos físicos descritos por P . Si $S[P] = 0$ significa que podemos predecir con certeza cuál de los posibles escenarios i cuyas probabilidades están dadas por p_i tomará realmente lugar. En cambio, nuestra ignorancia es máxima para una distribución uniforme. Lamberti [6] introdujo una medida de complejidad estadística capaz de detectar detalles esenciales de la dinámica, esta se define a través del producto:

$$C_{JS}[P] = Q_J[P, P_e]H_S[P], \quad (2)$$

siendo la entropía generalizada de Shannon:

$$H_S = S[P]/S_{m\acute{a}x}, \quad (3)$$

con $S_{m\acute{a}x} = S[P_e] = \ln(N)$, ($0 \leq H_S \leq 1$) y $P_e = 1/N, \dots, 1/N$ la distribución uniforme.

El desequilibrio se define en términos de la divergencia de Jensen-Shannon:

$$Q_J[P, P_e] = Q_0 J[P, P_e], \quad (4)$$

siendo Q_0 una constante de normalización igual a la inversa del valor máximo posible de $J[P, P_e]$ y la divergencia de Jensen-Shannon:

$$J[P, P_e] = S\left[\frac{P+P_e}{2}\right] - \frac{S[P]}{2} - \frac{S[P_e]}{2}. \quad (5)$$

Para la función de distribución de probabilidad se utiliza la metodología propuesta por Bandt and Pompe [7] denominada Patrones Ordinales, que tiene en cuenta la causalidad temporal de la dinámica del proceso. Este enfoque se basa en las secuencias de símbolos que ocurren naturalmente en la serie temporal, reemplazando la serie observada con la secuencia del rango correspondiente. Dada una serie de tiempo $\{x_t: t = 1, \dots, N\}$, y una dimensión de embedding $D \geq 2$ ($D \in \mathbb{N}$) y el tiempo de delay τ ($\tau \in \mathbb{N}$), se consideran el patrón ordinal de orden D generado por $s \rightarrow \{X_{s-(D-1)\tau}, X_{s-(D-2)\tau}, \dots, X_{s-\tau}, X_s\}$, (6)

Para cada instante de tiempo s , se asigna un vector D -dimensional que resulta de la evaluación para la serie en los instantes $s - (D - 1)\tau, \dots, s - \tau, s$. Un valor más grande de D implica mayor información sobre el pasado que se incorpora en el vector resultante. Cuando se habla del patrón ordinal de orden D en relación al instante s se está haciendo referencia a la permutación $\pi = \{r_0, r_1, \dots, r_{D-1}\}$ de $\{0, 1, \dots, D - 1\}$ definido por

$$x_{s-r_0\tau} \geq x_{s-r_1\tau} \geq \dots \geq x_{s-r_{D-2}\tau} \geq x_{s-r_{D-1}\tau}. \quad (7)$$

De esta manera el vector definido en la ecuación 6 se convierte en un símbolo único π . Con el objetivo de encontrar un resultado único se considera que $r_i < r_{i-1}$ si $x_{s-r_i\tau} < x_{s-r_{i-1}\tau}$.

Esto se justifica si el valor de x_t tiene una distribución continua, por lo que los valores iguales son muy inusuales. Para todos los $D!$ posibles ordenamientos (permutaciones) π_i de orden D , sus frecuencias relativas asociadas pueden computarse como el número de veces que aparece esa secuencia particular de orden dividida por el total de números de secuencias. De esta manera obtenemos la distribución de probabilidad de patrones ordinales $P = \{p(\pi_i), i = 1, \dots, D!\}$ para la serie de tiempo dada.

Los algoritmos se programaron en Python a partir de los obtenidos de <https://github.com/srk-srinivasan/Permutation-Entropy/>

Datos

Se aplicó la metodología a series de caudales medios diarios en distintas estaciones del país, obtenidos de la Red Hidrológica Nacional a partir del Sistema Nacional de Información Hídrica, de la Secretaría de Infraestructura y Política Hídrica.

Se determinó la serie de anomalías, o también llamados caudales desestacionalizados, que se obtienen a partir de la ecuación:

$$Q_{desest_{i,j,k}} = \frac{Q_{i,j,k} - \bar{Q}_{i,j}}{S_{i,j}}, \quad (8)$$

donde $Q_{desest_{i,j,k}}$ es el caudal desestacionalizado del día i , mes j y año k , $Q_{i,j,k}$ es el caudal medio diario observado el día i , mes j y año k , $\bar{Q}_{i,j}$ es la media de todos los días i del mes j y $S_{i,j}$ es el esvío estándar de todos los días i del mes j para la totalidad de los años de registro.

Tabla 1: Estaciones hidrológicas estudiadas

Río	Estación	Área de cuenca (km ²)	Registro
Colorado	Buta Ranquil	15300	1990-2019
Pilcomayo	La Paz	96000	1960-2019
Paraguay	Puerto Pilcomayo	800000	1910-2017
Paraná	Corrientes	1950000	1904-2019
Bermejo	Pozo Sarmiento	25000	1940-2019
Mendoza	Guido	8180	1956-2019
Carrenleufú	La Elena	1500	1954-2019
Uruguay	Paso de los Libres	189000	1908-2019
Atuel	La Angostura	3800	1931-2019
Bermejo	El Colorado	65736	1968-2019
Paraná	Itatí	1600000	1910-2019
Bermejo	Aguas Blancas	4850	1944-2019
Paraná	Túnel Subfluvial	2302000	1904-2019
Bermejo	Balapuca	4420	1971-2019

Se muestran en la Figura 1 a modo de ejemplo la serie de caudales diarios y sus anomalías, para la estación Balapuca en el río Bermejo. El mismo procedimiento se realizó para todas las series de las estaciones mencionadas en la Tabla 1.

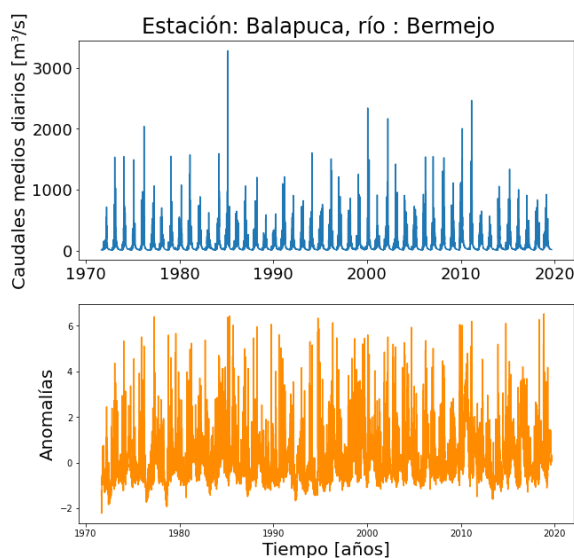


Figura 1: Serie de caudales medios diarios (arriba) y anomalías para el río Bermejo en la estación Balapuca.

Resultados

A continuación, se muestran los resultados obtenidos a partir de aplicar la metodología a la serie de caudales medios diarios y serie de anomalías diarias. Se obtuvieron los valores de entropía y complejidad utilizando $\tau=1$ y variando el parámetro D de 3 a 7 (Figura 2 a 5).

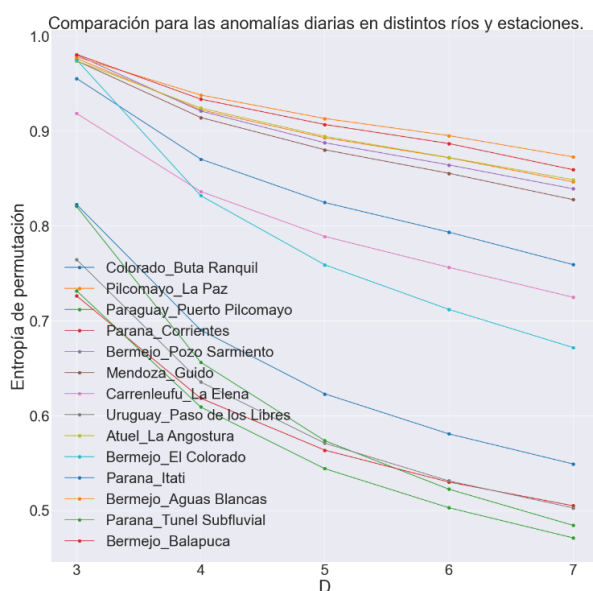


Figura 2: Entropía de permutación para las series de anomalías variando el parámetro D .

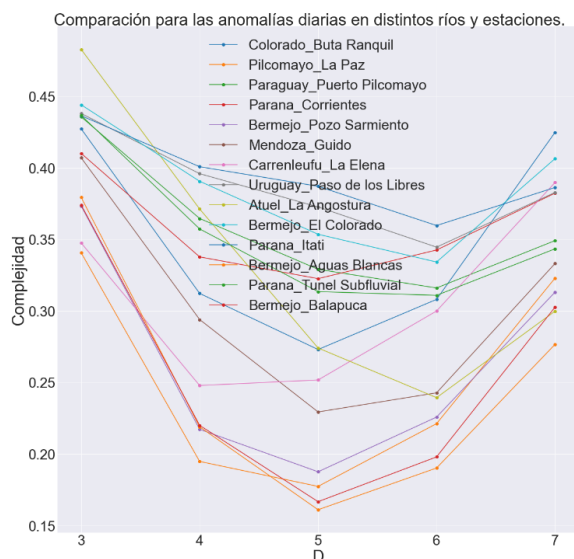


Figura 3: Complejidad estadística para las series de anomalías variando el parámetro D .

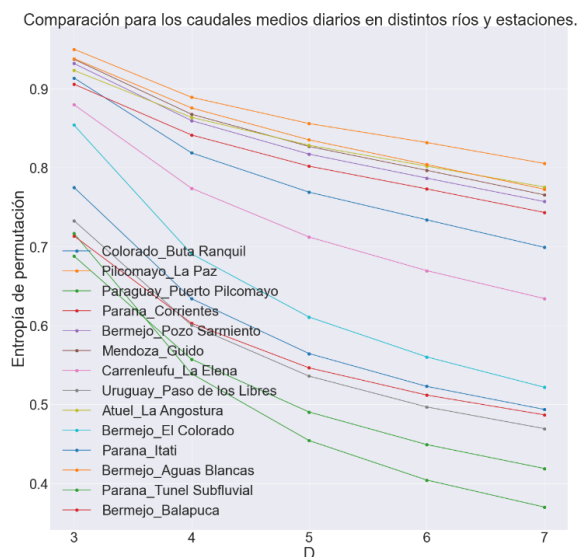


Figura 4: Entropía de permutación para las series de caudales variando el parámetro D .

Se puede observar que, para la entropía de permutación, tanto para la serie de caudales como para la serie de anomalías, que a medida que aumenta de baja la entropía de permutación.

En el caso de la medida de complejidad se observa un comportamiento distinto, ya que en la mayoría de los casos se ve que el menor valor ocurre en $D=5$ y aumenta para los dos extremos.

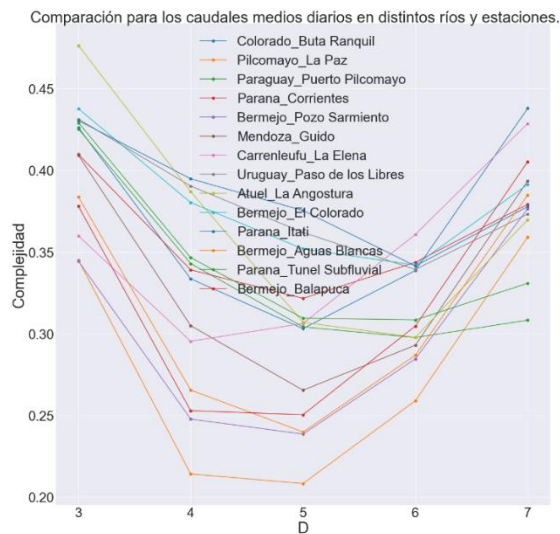


Figura 5: Complejidad estadística para las series de caudales variando el parámetro D .

En las Figuras 6 y 7 se muestra el plano complejidad-entropía para las series de caudales medios diarios y para las anomalías, respectivamente.

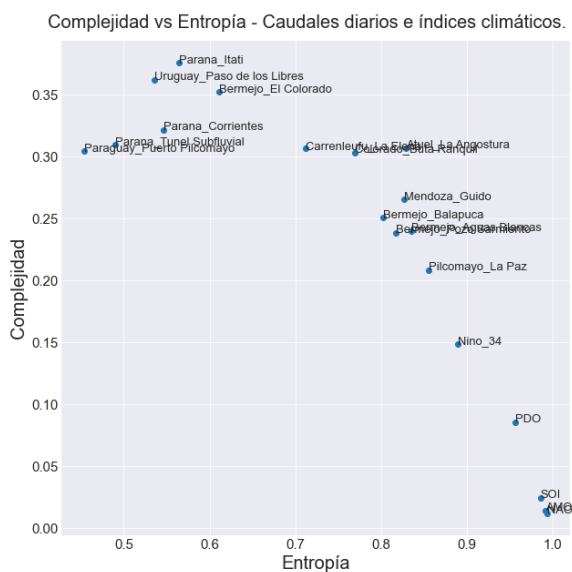


Figura 6: Complejidad estadística para las series de caudales variando el parámetro d .

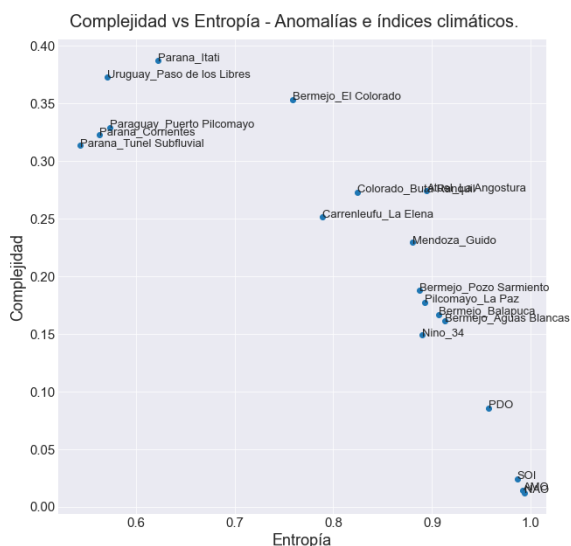
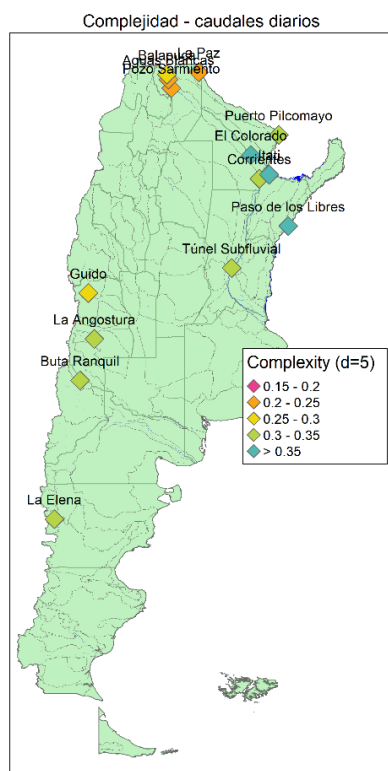


Figura 7: Complejidad estadística para las series de caudales variando el parámetro d .

Se agregan en el gráfico los pares de valores complejidad – entropía para las series de índices climáticos obtenidos de la Oficina Nacional de Administración Oceánica y Atmosférica de Estados Unidos (NOAA).

Se toman los indicadores del Niño -Oscilación del Sur: Niño 3.4 y SOI (Southern Oscillation Index), la Oscilación Decadal del Pacífico (PDO), Oscilación del Atlántico Norte (NAO) y la Oscilación Multidecadal del Atlántico (AMO).

Se puede observar que los índices climáticos tienen una alta entropía, cercana a 1 en la mayoría de los casos y una baja complejidad, poniendo en evidencia las características estocásticas de las series climáticas.



Finalmente se realizó un análisis espacial ubicando las estaciones geográficamente e identificando los valores de entropía y complejidad con distintos colores para poder identificar si existe algún patrón en los resultados obtenidos.

Figura 8: Complejidad estadística para las series de caudales.

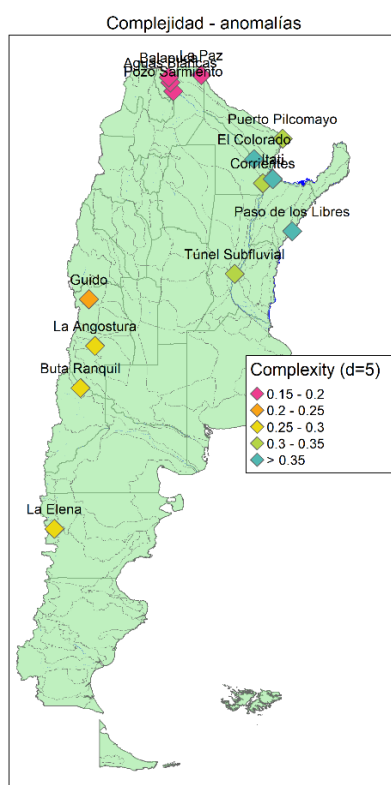


Figura 9: Complejidad estadística para las series de anomalías.

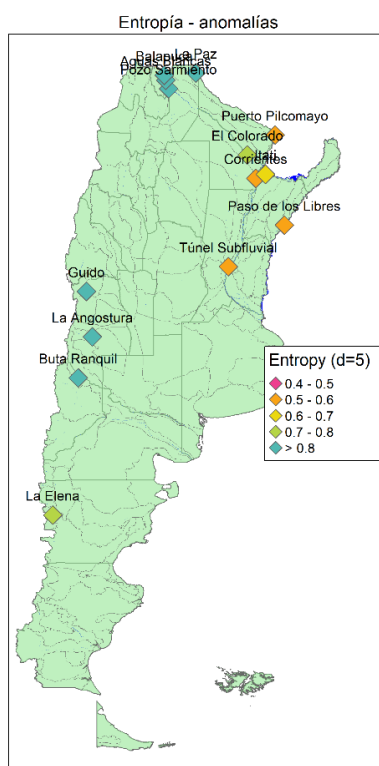


Figura 10: Entropía para las series de anomalías.

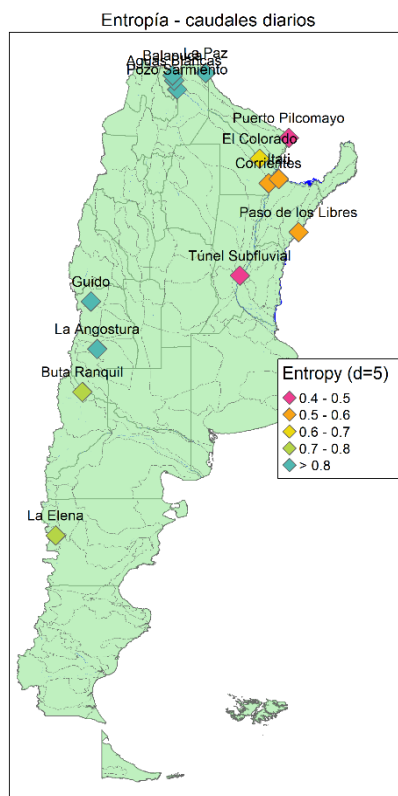


Figura 11: Entropía estadística para las series de caudales.

Analizando las Figuras 8 a 10 se puede observar que para la variable entropía los resultados son similares tanto para la serie de caudales como para la serie de anomalías, encontrando valores más altos de entropía en estaciones que se ubican al Oeste y con cuencas más pequeñas, con excepción de la estación La Elena, y disminuyendo hacia el Este. Con respecto a la variable complejidad, los valores parecerían ser en términos generales mayores para serie de caudales que para la serie de anomalías, y en el primer caso no se ve tan clara la diferencia con respecto a la ubicación de las estaciones, como si en las anomalías, encontrando una mayor complejidad en el Este que en el Oeste.

Conclusiones

En estos primeros resultados se puede observar que la entropía de permutación y la complejidad estadística permiten caracterizar distintas series hidrológicas en ríos de Argentina.

La ubicación geográfica de los resultados permitió ver que en la mayoría de los casos, tanto en la serie de caudales como anomalías, la entropía crece de Oeste a Este para las estaciones analizadas. Esta relación es menos clara en el caso de la complejidad estadística, sin embargo en el análisis de las anomalías, se observa que los valores disminuyen de Oeste a Este.

Estos resultados permiten analizar la posibilidad de que exista un patrón en función de la ubicación geográfica, que junto a posteriores análisis permitirán estudiar cuáles son los forzantes que generan diversos comportamientos en la dinámica de las series temporales, a partir de identificar los principales procesos en las cuencas de estudio.

Referencias

- [1] Bras, R. L. (2015), Complexity and organization in hydrology: A personal view, *Water Resour. Res.*, 51, 6532– 6548, doi:10.1002/2015WR016958.
 - [2] Martin M.T., Plastino A., Rosso O.A., (2006) Generalized statistical complexity measures: Geometrical and analytical properties, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, Volume 369, Issue 2, Pages 439-462, ISSN 0378-4371, <https://doi.org/10.1016/j.physa.2005.11.053>.
 - [3] Serinaldi, F., Zunino, L. & Rosso, O.A. (2014), Complexity–entropy analysis of daily stream flow time series in the continental United States. *Stoch Environ Res Risk Assess* 28, 1685–1708, <https://doi.org/10.1007/s00477-013-0825-8>.
 - [4] Stosic, T.; Telesca, L.; Vicente de Souza Ferreira D. y Stosic B (2016), Investigating anthropically induced effects in streamflow dynamics by using permutation entropy and statistical complexity analysis: A case study, *Journal of Hydrology*, Volume 540, 1136-1145, <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2016.07.034>.
 - [5] Jovanovic, T., García, S., Preisendanz, H. y Mejía, A. (2017). Complexity as a streamflow metric of hydrologic alteration. *Stochastic Environmental Research and Risk Assessment*. 31. 10.1007/s00477-016-1315-6.
 - [6] Lamberti P.W., Martín M.T., Plastino A. , Rosso O.A. (2004), Intensive entropic non-triviality measure, *Physica A* 334, 119-131.
- Bandt C, Pompe B. (2002) Permutation entropy: a natural complexity measure for time series. *Phys Rev Lett*. 2002 Apr 29;88(17):174102. doi: 10.1103/PhysRevLett.88.174102. Epub

7

Estudio termodinámico del proceso de adsorción de azul de metileno en adsorbente de bajo costo proveniente de la industria algodonera

Tenev, M. D. ^a; Torre, C. ^a; Fontana, G ^a; Boeykens, S. ^b

^a. GISTAQ, UTN FRR

^b. Laquishe, FIUBA

mdtenev@gmail.com

Resumen

La cascarilla de algodón proveniente de la limpieza de la fibrilla de una desmotadora se limpió y acondicionó para ser utilizada como biomaterial de bajo costo para la remoción de azul de metileno de efluentes textiles. Se realizaron experimentos en batch de adsorción para estudiar el efecto de la temperatura sobre la capacidad de adsorción del biomaterial. Los estudios mostraron que la isoterma de adsorción de Langmuir es la que mejor representa al sistema a todas las temperaturas evaluadas. A partir de esos resultados, se calcularon los parámetros termodinámicos del proceso, como energía libre, entalpía y entropía, los cambios en la energía libre de Gibbs ΔG^0 y la variación de entalpía ΔH^0 indican que el proceso de adsorción es espontáneo y endotérmico, respectivamente, si bien la temperatura no influye significativamente en el proceso adsorptivo.

Abstract

Cotton husk from the cleaning of the fiber from a gin mill was cleaned and conditioned to be used as a low-cost biomaterial for the removal of methylene blue from textile effluents. Batch adsorption experiments were conducted to study the effect of temperature on the adsorption capacity of the biomaterial. The studies showed that the Langmuir adsorption isotherm best represents the system at all temperatures evaluated. In addition, the thermodynamic parameters of the process, such as free energy, enthalpy and entropy, were calculated, the changes in Gibbs free energy ΔG^0 and enthalpy variation ΔH^0 indicate that the adsorption process is spontaneous and endothermic, respectively. The temperature does not significantly affect the adsorption process.

Palabras clave: Adsorción, azul de metileno, cascarilla de algodón, efluentes textiles.

Introducción

La cadena algodonera-textil se compone de una fase primaria de producción de algodón y una fase industrial que se subdivide en cuatro segmentos: la producción de fibra, los manufacturados textiles, las tintorerías y por último el segmento de confecciones e indumentaria [1].

En las tintorerías se realiza el teñido de los tejidos produciendo efluentes coloreados. En la actualidad, los tintes aromáticos y heterocíclicos que se utilizan en la industria poseen una estructura complicada y estable la cual plantea una mayor dificultad en la degradación cuando están presente en los efluentes textiles [2] En la industria textil, los colorantes se clasifican en aniónicos (directos y reactivos), catiónicos (básicos) y no aniónicos (dispersos); los básicos y reactivos son los más extensamente empleados [3].

El interés actual está en tecnologías que pueden producir agua reutilizable, eliminar la toxicidad, mineralizar compuestos aromáticos o recuperar los tintes, recuperar la sal, etc. La mineralización de tintes, compuestos orgánicos y, por tanto, la toxicidad de las aguas residuales generadas por la industria textil y la industria de fabricación de tintes plantean un desafío para su recuperación [2].

La provincia del Chaco sigue liderando el parque de desmotadoras del país con un total de 37 plantas en actividad, seguido por Santiago del Estero con 13. En el proceso de desmote el 30% del peso del algodón procesado se separa como residuo [4]. Este residuo del proceso de desmote denominados "cascarilla" (CA), compuestos por fibrilla, cárpelos, materias extrañas, etc., aún no posee un destino previsto, desde el punto de vista de la economía circular se podría utilizar estos residuos para lograr su valorización y transformar la economía lineal del desmote de algodón en una economía circular [5].

Para la remoción del color de los efluentes textiles se han utilizado diferentes métodos como ser la precipitación por floculación, la electrólisis, la fotocatalisis, el intercambio de iones y la adsorción. Sin embargo, estos métodos distintos de la adsorción son bastante complejos, tienen poca eficacia en la decoloración y también pueden generar subproductos fáciles de producir. La adsorción es una técnica eficaz y más completa, que se ha utilizado para la eliminación de colorantes de aguas residuales industriales, debido a su capacidad para eliminar colorantes en cualquier concentración, fácil de diseñar y de aplicación de bajo costo [6].

La estimación de los parámetros termodinámicos característicos del proceso correlacionado con los probables mecanismos de adsorción para los diferentes sistemas permitirá evaluar la influencia de la variación de la temperatura en el proceso adsorptivo [7]. En este sentido se deben evaluar la constante de equilibrio de adsorción (K_d), los cambios en la energía libre de Gibbs ΔG^0 (J.mol⁻¹), la variación de entalpía ΔH^0 (J.mol⁻¹) y entropía ΔS^0 (J.mol⁻¹K⁻¹) de adsorción. Que el proceso de adsorción sea termodinámicamente factible o no factible, se puede determinar a partir del signo del cambio de energía libre ΔG^0 . Si $\Delta G^0 < 0$ entonces el proceso adsorptivo será siempre factible y espontáneo, mientras que si $\Delta G^0 > 0$ entonces el proceso de adsorción será no factible y no espontáneo [8]. El signo y la magnitud del ΔG^0 depende de los parámetros termodinámicos ΔH^0 y ΔS^0 :

1. Si el proceso de adsorción es exotérmico ($\Delta H^0 < 0$) y ocurre con un incremento en el desorden de la interfase sólido-líquido ($\Delta S^0 > 0$), entonces el proceso será siempre espontáneo para toda temperatura.
2. Si el proceso de adsorción es exotérmico ($\Delta H^0 < 0$) y ocurre con un descenso del desorden en la superficie sólido-líquido ($\Delta S^0 < 0$), el proceso será espontáneo si y sólo si $\Delta H^0 > T\Delta S^0$.

3. Si el proceso de adsorción es endotérmico ($\Delta H^0 > 0$) y ocurre con un incremento en el desorden en la superficie sólido-líquido ($\Delta S^0 > 0$), el proceso será espontáneo si y sólo si $\Delta H^0 < T\Delta S^0$.
4. Si el proceso de adsorción es endotérmico ($\Delta H^0 > 0$) y ocurre con un descenso en el desorden de la interfase sólido-líquido ($\Delta S^0 < 0$), entonces el proceso será espontáneo para ninguna temperatura.

También se puede determinar a partir de la magnitud de la variación de entalpia de un proceso adsorptivo, qué tipo de adsorción hay entre el adsorbato y el adsorbente. Cuando la magnitud del valor ΔH^0 se encuentra en el rango de 2,1-20,9 y 80-200 kJ/mol para las adsorciones físicas y químicas, respectivamente [9].

Metodología

Isotermas de adsorción

La CA fue acondicionada según la metodología previamente ensayada [10]. Se realizaron ensayos batch por triplicado a diferentes temperaturas (10, 25 y 50°C). Para ello, se pusieron en contacto 100mg de CA con 50ml de soluciones sintéticas de AM a diferentes concentraciones iniciales (500, 400, 300, 250, 200, 150 y 50mg.L⁻¹). Los sistemas se agitaron durante 24 horas a 200rpm para alcanzar el equilibrio de acuerdo con trabajos previos [10]. Luego, se dejaron decantar las muestras y se tomaron 10ml del sobrenadante para determinar la concentración final de AM mediante espectrofotometría [11].

Para las curvas de equilibrio, se graficó la masa (mg) de colorante adsorbido por gramo de adsorbente (q_e) frente a la concentración de la solución sobrenadante (C_{eq}). Para el cálculo de q_e se utilizó la ecuación 1:

$$q_e = \frac{(C_i - C_{eq}) \cdot V}{M} \quad (1)$$

Donde C_i : concentración inicial de AM (mol.L⁻¹); C_{eq} : concentración de equilibrio de AM (mol.L⁻¹); V : volumen de solución (L) y M : masa de adsorbente (g).

Para obtener los parámetros del proceso de adsorción se utilizaron los modelos de Langmuir (Ec. 2) [12], Freundlich (Ec. 3) [13] y Redlich Peterson (Ec. 4) [14]. La ecuación 2 representa el modelo de Langmuir:

$$q_e = \frac{q_m K_L C_e}{1 + K_L C_e} \quad (2)$$

Donde, q_m : capacidad de adsorción de la monocapa (mol_{AM}.g_{CA}⁻¹) y K_L : constante termodinámica de equilibrio [15].

El modelo de la ecuación de Freundlich (Ec. 3) es:

$$q_e = K_F * C_{eq}^{\frac{1}{n}} \quad (3)$$

Donde K_F y n son constantes de Freundlich.

La Ec. 4 representa la ecuación de Redlich Peterson:

$$q_e = \frac{K_{RP} C_{e,q}}{1 + \alpha C_e^\beta} \quad (4)$$

Donde K_{RP} es la constante de Redlich–Peterson y β es un exponente cuyos valores varían entre 0 y 1, para valores de b iguales a 1 el modelo se acerca al modelo de Langmuir y para valores de b de 0 el modelo se aproxima al modelo de Freundlich [16]. Para identificar el tipo de fenómeno de adsorción presente en los sistemas evaluados se comparó los coeficientes de correlación de los tres modelos utilizados.

En el equilibrio, la velocidad de adsorción del adsorbato en el adsorbente es igual a la velocidad de desorción del adsorbato desde la superficie del adsorbente. La concentración del adsorbato en la superficie del adsorbente y en una solución acuosa se vuelve prácticamente constante. La razón entre la concentración efectiva de adsorbato y la del adsorbente sólido en la solución acuosa líquida, es una constante llamada constante de equilibrio K del proceso de adsorción:

$$K = \frac{a_s}{a_e} = \frac{\tau_s C_s}{\tau_e C_e} \quad (5)$$

Donde a_s y a_e son la actividad del adsorbato adsorbido en la superficie del adsorbente y la del adsorbato no-adsorbido en el seno del líquido en equilibrio, respectivamente. τ_s y τ_e son los coeficientes de actividad del adsorbato adsorbido y del no-adsorbido en la solución en equilibrio, respectivamente. C_s y C_e son las concentraciones de equilibrio del adsorbato en la superficie del adsorbente y en solución acuosa, respectivamente. Asumiendo que los coeficientes de actividad son iguales a la unidad, la ecuación se vuelve:

$$K = \frac{C_s}{C_e} \quad (6)$$

Desde la termodinámica clásica, se correlaciona la constante de equilibrio (K) a temperatura constante (T) con el cambio en la energía libre (ΔG) como:

$$\Delta G = \Delta G^\circ + RT \ln(K) \quad (7)$$

En el equilibrio, el ΔG es cero, por lo tanto, la ecuación previa se reduce a:

$$\Delta G^\circ = -RT \ln(K) \quad (8)$$

Esta es la ecuación más importante usada en la termodinámica de adsorción para predecir la viabilidad del proceso adsorptivo y su relación con la temperatura T . El cambio en la energía libre estándar es el cambio de energía libre del proceso adsorptivo a concentraciones

unitarias de adsorbato y a sitios activos unitarios de adsorbente. El parámetro termodinámico ΔG^0 está relacionado a su vez con el delta entalpía estándar (ΔH^0) y el delta entropía estándar (ΔS^0) a temperatura constante, según la ecuación:

$$\Delta G^0 = \Delta H^0 - T\Delta S^0 \quad (9)$$

La ecuación de Van't Hoff permite calcular la entalpía y entropía del proceso adsorptivo. Esta ecuación relaciona la variación de la temperatura absoluta con la variación de la constante de equilibrio K definida anteriormente, que está dada por la diferencia de entalpía ΔH .

$$\frac{d \ln \ln K}{dT} = \frac{\Delta H^0}{RT^2} \quad (10)$$

Resolviendo esta ecuación diferencial asumiendo que el calor de reacción no varía en el intervalo de temperatura en estudio y teniendo en cuenta las relaciones termodinámicas entre la energía libre de Gibbs y la constante de equilibrio K, la ecuación de Van't Hoff se puede escribir de la siguiente manera:

$$\ln Kd = \frac{-\Delta H^0}{RT} + \frac{\Delta S^0}{R} \quad (11)$$

Los valores del ΔH^0 y ΔS^0 para el proceso de adsorción son determinadas a partir de la pendiente y la ordenada al origen de un gráfico de $\ln(K)$ vs $1/T$, respectivamente.

En este trabajo como en otros [8], [15], [17], [18] se utiliza la constante de equilibrio obtenida del modelo de Langmuir para el cálculo de los parámetros termodinámicos.

Resultados y discusiones

En la Figura 1, 2 y 3 se muestran las isotermas obtenidas experimentalmente a 10°C, 25°C y 50°C, respectivamente, y los ajustes correspondientes de los tres modelos utilizados.

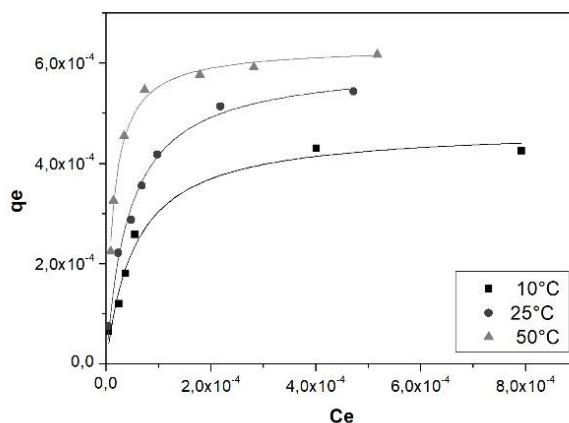


Figura 1: Representación de las curvas de equilibrio a diferentes temperaturas.

Los modelos Langmuir, Freundlich y Redlich Peterson para cada una de las temperaturas evaluadas se muestran las Figuras 2, 3 y 4 respectivamente.

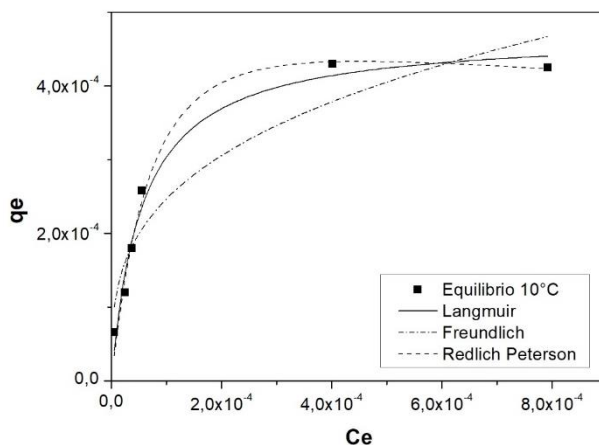


Figura 2: Representación de lo modelo de Langmuir, Freundlich y Redlich Peterson a 10°C.

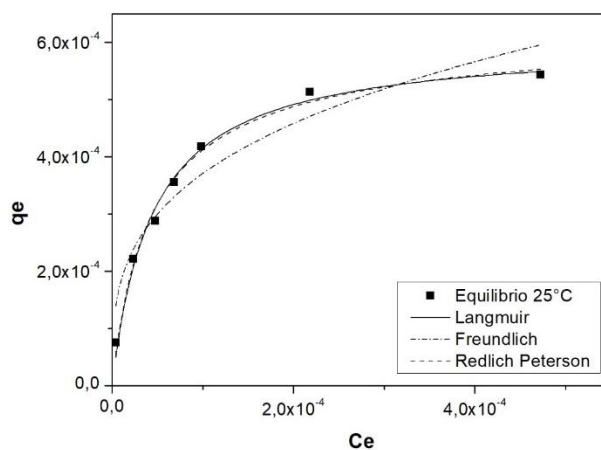


Figura 3: Representación de lo modelo de Langmuir, Freundlich y Redlich Peterson a 25°C

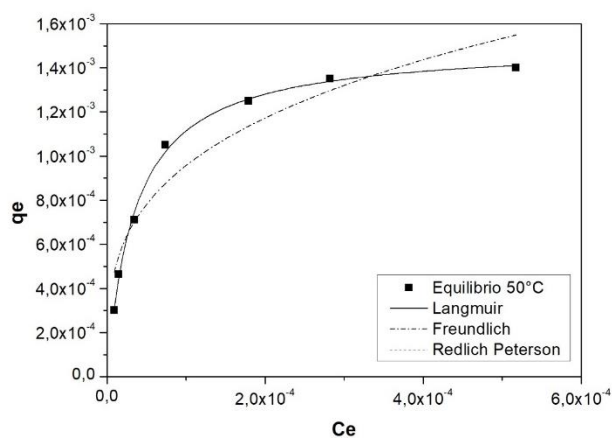


Figura 4: Representación de lo modelo de Langmuir, Freundlich y Redlich Peterson a 50°C.

En la Tabla 1 se detallan los parámetros obtenidos por cada modelo estudiado y para cada temperatura.

En la Figura 5 se muestra el gráfico de la ecuación (11) para determinar los ΔH^0 , ΔS^0 y ΔG^0 del proceso.

Tabla 1: Parámetros de los modelos de Langmuir, Freundlich y BET para cada temperatura.

		10°C	25°C	50°C
Langmuir	qm	4,71E-4	6,01E-4	0,0015
	KL	18.131,04	22.457,79	28.474,98
	R ²	0,9755	0,9871	0,9965
Freundlich	n	3,2510	3,2779	3,4191
	K _F	0,0042	0,0062	0,0142
	R ²	0,8955	0,9122	0,8926
Redlich-Peterson	α	48.153,99	19.159,59	28.477,29
	β	1,1687	0,9667	1,0001
	K _{RP}	6,6471	14,8463	42,8665
	R ²	0,9782	0,9845	0,9957

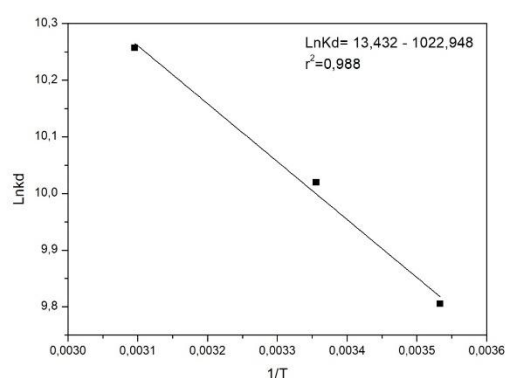


Figura 5: Representación de la ecuación de Van't Hoff

A partir de los datos obtenidos de la curva de ajuste se determinó ΔH^0 y ΔS^0 y con la ec 9 se calcularon los valores de ΔG^0 para cada una de las temperaturas evaluadas. Tabla 2.

T (K)	Kd	ΔG^0 (J/mol)	ΔH^0 (J/mol)	ΔS^0 (J/molK)
283	18.131,05	-5.520,49		
298	22.457,79	-5.920,83	2.032,60	26,69
323	28.474,98	-6.588,06		

El valor negativo de ΔG^0 confirma el hecho que el proceso de adsorción entre el AM y la CA se produce de forma espontánea.

Este proceso presenta una temperatura de inversión de la espontaneidad que corresponde a valores $T < 76,2K$. A su vez, la disminución del ΔG al aumentar la temperatura, indicaría que el proceso está favorecido por altas temperaturas.

El bajo valor obtenido de $\Delta H^0 = 1,03 \text{ kJmol}^{-1}$ indicaría que en la adsorción predomina un proceso de fisisorción, endotérmico, lo cual es consistente con el efecto de la temperatura mencionado anteriormente. En resultados presentados en otros trabajos se reporta un comportamiento similar del AM sobre diferentes adsorbentes como ser turba [17], cáscaras de trigo [18], arcilla Pakistani [19]. En todos los casos se obtuvieron valores negativos de ΔG^0 que disminuyen con el incremento de la temperatura de 298 a 333K, lo que indica que el proceso adsorptivo sería factible y espontáneo. Comparando los valores de ΔG^0 obtenido para CA ($\Delta G^0_{298} = -5,52 \text{ kJmol}^{-1}$) con los obtenidos para la cáscara de trigo ($\Delta G^0_{303} = -22,64 \text{ kJmol}^{-1}$) y turba ($\Delta G^0_{308} = -24,20 \text{ kJmol}^{-1}$) se observa que la adsorción en turba estaría favorecida.

Comparando el valor de ΔH^0 obtenido $2,03 \text{ kJmol}^{-1}$ con los valores de ΔH^0 $24,9 \text{ kJmol}^{-1}$ para la turba, $33,41 \text{ kJmol}^{-1}$ para la cáscara de trigo y $14,25 \text{ kJmol}^{-1}$ para la arcilla Pakistani, observamos que existe una menor interacción entre CA y el AM que entre el AM y los adsorbentes mencionados. En todos los casos el proceso de adsorción sucede con un incremento en el desorden de la interfase sólido-líquido. Estos resultados indican que el proceso no resulta espontáneo a temperaturas inferiores a la $76,2K$.

Conclusiones

En este trabajo se realizó un estudio del proceso adsorptivo del AM sobre CA variando la temperatura con el objetivo de estudiar los valores de las funciones termodinámicas (ΔH^0 , ΔS^0 y ΔG^0). El análisis de estos parámetros termodinámicos permitió verificar que la adsorción es espontánea a temperaturas mayores a $76,2K$. Los bajos valores de entalpía indicarían que en el proceso se produce la adsorción debido a fuerzas físicas, fisisorción.

Estos estudios alentarían la utilización de CA para adsorber colorantes presentes en los efluentes coloreados provenientes de la industria textil, para lo cual deberían hacerse pruebas con efluentes reales para comprobar el proceso adsorptivo de los colorantes presentes en los mismos sobre CA.

Agradecimientos

Al apoyo financiero de la Universidad de Buenos Aires (UBACyT 2018-2020 N ° 20020170200204BA) y de la Universidad Tecnológica Nacional (2019-2021 Código MSUTIRE0005259TC), así como la colaboración de Las Marías Textil SRL, con el material residual.

Referencias

- [1]. Ackerman, C., & Busellini, L. (2017). *Informes de Cadena de Valor*. Retrieved from <http://economia.gob.ar>
- [2]. Holkar, C. R., Jadhav, A. J., Pinjari, D. v., Mahamuni, N. M., & Pandit, A. B. (2016, November 1). A critical review on textile wastewater treatments: Possible approaches. *Journal of*

Environmental Management. Academic Press.
<https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2016.07.090>

- [3]. Alemán, A., Hormaza, A., & Álvarez, M. (2011). Remoción de rojo básico de un efluente textil simulado : un caso de aplicación de la cascarilla de arroz. *Producción + Limpia*, 6(1), 66–75.
- [4]. Argento, R. S., Ferreyra, J., Anderson, A. M., Carrasco, M. F., González, A., & Grether, R. M. (2019). Residuos de desmote de algodón aglomerados: su producción y aplicación en la construcción de viviendas. *Ambiente Construído*, 19(3), 127–145. <https://doi.org/10.1590/s1678-86212019000300329>
- [5]. Minson, A. J. (2020). Circular economy. *Indian Concrete Journal*, 94(1), 19–23. <https://doi.org/10.4324/9781315270326-38>
- [6]. Hizal, J., Kanmaz, N., & Yılmazoğlu, M. (2021). Adsorption efficiency of sulfonated poly (ether ether ketone) (sPEEK) as a novel low-cost polymeric adsorbent for cationic organic dyes removal from aqueous solution. *Journal of Molecular Liquids*, 322. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2020.114761>
- [7]. Scheufele, F. B., Módenes, A. N., Borba, C. E., Ribeiro, C., Espinoza-Quiñones, F. R., Bergamasco, R., & Pereira, N. C. (2016). Monolayer-multilayer adsorption phenomenological model: Kinetics, equilibrium and thermodynamics. *Chemical Engineering Journal*, 284, 1328–1341. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2015.09.085>
- [8]. Azizian, S., Eris, S., & Wilson, L. D. (2018). Re-evaluation of the century-old Langmuir isotherm for modeling adsorption phenomena in solution. *Chemical Physics*, 513, 99–104. <https://doi.org/10.1016/j.chemphys.2018.06.022>
- [9]. Ramalho, R. S. (1996). *Tratamiento de Aguas Residuales* (2da Edición). Buenos Aires: Editorial Reverte SA.
- [10]. Tenev, M. D., Farías, A., Torre, C., Fontana, G., Caracciolo, N., & Boeykens, S. (2019). Cotton Industry Waste as Adsorbent for Methylene Blue. *Journal of Sustainable Development of Energy, Water and Environment Systems*, 7(4), 667–677. <https://doi.org/10.13044/j.sdewes.d7.0269>
- [11]. Giles, C. H., MacEwan, T. H., Nakhwa, S. N., & Smith, D. (1960). 786. Studies in adsorption. Part XI. A system of classification of solution adsorption isotherms, and its use in diagnosis of adsorption mechanisms and in measurement of specific surface areas of solids. *Journal of the Chemical Society (Resumed)*, 846, 3973. <https://doi.org/10.1039/jr9600003973>
- [12]. Langmuir, I. (1918). The Adsorption of Gases on Plane Surfaces of Mica. *Journal of the American Chemical Society*, 40(9), 1361–1403. <https://doi.org/10.1021/ja01269a066>
- [13]. Freundlich, H. (1907). Über die Adsorption in Lösungen. *Zeitschrift Für Physikalische Chemie*, 57U(1), 385–470. <https://doi.org/10.1515/zpch-1907-5723>
- [14]. Redlich, O., & Peterson, D. L. (1959). A Useful Adsorption Isotherm. *The Journal of Physical Chemistry*, 63(6). <https://doi.org/10.1021/j150576a611>
- [15]. Liu, Q. S., Zheng, T., Wang, P., Jiang, J. P., & Li, N. (2010). Adsorption isotherm, kinetic and mechanism studies of some substituted phenols on activated carbon fibers. *Chemical Engineering Journal*, 157(2–3), 348–356. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2009.11.013>
- [16]. Foo, K. Y., & Hameed, B. H. (2010, January 1). Insights into the modeling of adsorption isotherm systems. *Chemical Engineering Journal*. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2009.09.013>
- [17]. Ferreira, A. M., Coutinho, J. A. P., Fernandes, A. M., & Freire, M. G. (2014). Complete removal of textile dyes from aqueous media using ionic-liquid-based aqueous two-phase systems. *Separation and Purification Technology*, 128, 58–66. <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2014.02.036>

- [18]. Bulut, Y., & Aydin, H. (2006). A kinetics and thermodynamics study of methylene blue adsorption on wheat shells. *Desalination*, 194(1–3), 259–267. <https://doi.org/10.1016/j.desal.2005.10.032>
- [19]. Rehman, M. U., Manan, A., Uzair, M., Khan, A. S., Ullah, A., Ahmad, A. S., Wazir, A. H., Qazi, I., & Khan, M. A. (2021). Physicochemical characterization of Pakistani clay for adsorption of methylene blue: Kinetic, isotherm and thermodynamic study. *Materials Chemistry and Physics*, 269. <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2021.124722>

8

Estudio de transiciones de conciencia utilizando información integrada

Baglivo, F.H. ^{a+}; Campora, N. ^{b+}; Mininni, C. ^{a,c}, Kochen, S. ^b,
Lew, S. ^{a, c}

^a. Instituto de Ingeniería Biomédica, Universidad de Buenos Aires, Buenos Aires, Argentina

^b. Neurociencias, Hospital El Cruce, Estudio en Neurociencias y Sistemas Complejos (EnyS), CONICET. Universidad de Buenos Aires, Buenos Aires, Argentina

^c. Instituto de Biología y Medicina Experimental – CONICET, Buenos Aires, Argentina.
slew@fi.uba.ar

Resumen

La conciencia es uno de los aspectos más complejos de la cognición humana. El estudio de los mecanismos involucrados en los distintos niveles de conciencia y la transición entre ellos supone uno de los desafíos más importantes de la neurociencia contemporánea. En el presente trabajo utilizamos el método propuesto por Barret [1] basado en la medición de la información integrada mediante un sistema autorregresivo (Φ_{AR}) para estudiar cómo se reflejan los cambios de la dinámica en las transiciones de los estados de conciencia. Para ello aplicamos este operador a una base de datos de registros de electroencefalografía intracraneal (iEEG) tomados en pacientes ($n = 6$) que padecen epilepsia refractaria. De cada paciente se obtuvieron una serie de registros durante el estado de reposo y durante la crisis, en vigilia y durante el sueño. Se tomaron sets de electrodos para armar redes que están por fuera de la zona epileptogénica para poder estudiar la evolución del índice Φ_{AR} (información integrada) cuando se manifiesta una crisis epiléptica. Durante la crisis se obtiene un modelo único para estudiar diferentes estados de conciencia ya que también se cuenta con la valoración de la alteración de conciencia (CSS) realizada por los médicos. Los resultados muestran que los cambios en el índice están significativamente correlacionados a los distintos estados de conciencia.

Abstract

Consciousness is one of the most complex aspects of human cognition. Studying the mechanisms involved in transitions and in different levels of consciousness is one of the greatest challenges of neuroscience. In this study a measure proposed by Barret [1] that is based on computing the integrated information using an autoregressive system (Φ_{AR}) is used to evaluate dynamic changes during consciousness transitions. This index is applied to an intracranial electroencephalography (iEEG) dataset collected from 6 patients that suffer from refractory epilepsy. These records were obtained during resting state and during the crisis in two different conditions, wakefulness and dreamless sleep. Networks outside epileptogenic regions were created in order to study the Φ_{AR} index evolution when a crisis is detected. Consciousness Seizure Scale (CSS) were also obtained from the medical staff.

Our results show that changes on the index are significantly correlated with changes in the states of consciousness.

Palabras clave: conciencia, información integrada, epilepsia

Introducción

El estudio de los estados y las transiciones de la conciencia atrajo la atención de muchos neurocientíficos en las últimas décadas, no sólo por razones clínicas y de diagnóstico, sino también debido al rol preponderante que ocupa en la comprensión del funcionamiento del cerebro humano. De acuerdo con Tononi [2] la conciencia se corresponde con la capacidad de un sistema para integrar información. Según esta teoría la cantidad de conciencia del sistema se puede medir con el índice Φ que mide la información efectiva del sistema. Lo que plantea es que el índice es mayor a medida que el sistema es funcionalmente más especializado (i.e los patrones de conexión son distintos para cada nodo del sistema) y más integrado (i.e todos los nodos de un sistema pueden ser alcanzados por todos los otros nodos, de manera directa o indirecta). Este índice no fue diseñado para ser aplicado a señales biológicas continuas, por lo que en el presente estudio se propone utilizar la medida de análisis computacional (Φ_{AR}) desarrollada por Barret [1] como herramienta para medir la relación entre la información integrada y las variaciones de los estados de conciencia. Este índice permite estudiar casos en que una red genera más información integrada que la generada por la suma de sus partes. Esta variación del índice fue especialmente diseñada para poder utilizarse tanto en modelos neuronales realistas como en series de tiempo obtenidas de señales biológicas, como por ejemplo los registros de electroencefalograma intracraneal (iEEG). La hipótesis a contrastar en este trabajo es que el valor Φ_{AR} es sensible a los cambios en los estados de conciencia, que son evaluados por un profesional en el momento en que la crisis epiléptica está ocurriendo. Además estas variaciones se evaluarán durante sueño y vigilia ya que se conoce que en estos estados los niveles de conciencia son diferentes.

Materiales y métodos

Para realizar el presente trabajo se utilizaron registros de encefalografía intracraneal (iEEG) que se obtuvieron a partir de la cirugía exploratoria en pacientes que sufren epilepsia refractaria. Esta cirugía es exploratoria y tiene motivaciones clínicas. Los pacientes fueron intervenidos, hospitalizados y monitoreados las 24 hs por una semana mientras tenían los electrodos implantados directamente en el cerebro (Figura 1). Este tipo de cirugías brinda una oportunidad única para el estudio de transiciones de conciencia ya que durante las crisis puede haber distintos niveles conciencia e incluso la pérdida total momentánea de esta. De la base de datos se separaron 20 registros en los que los médicos identificaron crisis epilépticas de 6 pacientes distintos. De estas crisis 13 se dieron durante vigilia y 7 durante sueño. Además, al momento de la crisis los médicos realizaron la valoración del estado de conciencia (CSS). De cada registro se seleccionaron 6 electrodos de zonas que fueron calificadas como no-epileptógenas por los neurólogos. En cada uno de los registros se marcó el inicio de la crisis basándose en las imágenes de la cámara de monitoreo y las variaciones en las señales. Las señales fueron filtradas en la banda de 4 y 20 Hz (comprendiendo las bandas Theta, Alfa y Beta) utilizando un filtro FIR bidireccional de cuadrados mínimos provisto por el framework EEGLAB [3]. Los extractos se normalizaron restando a cada señal su media y dividiéndola por su desvío estándar (z-score). Posteriormente se calculó el índice Φ_{AR} en función del tiempo de utilizando el toolbox distribuido en [1], y se buscó el valor mínimo dentro de una ventana de 1 segundo posterior al inicio de la crisis. Al valor obtenido se lo comparó con el valor basal que se obtuvo

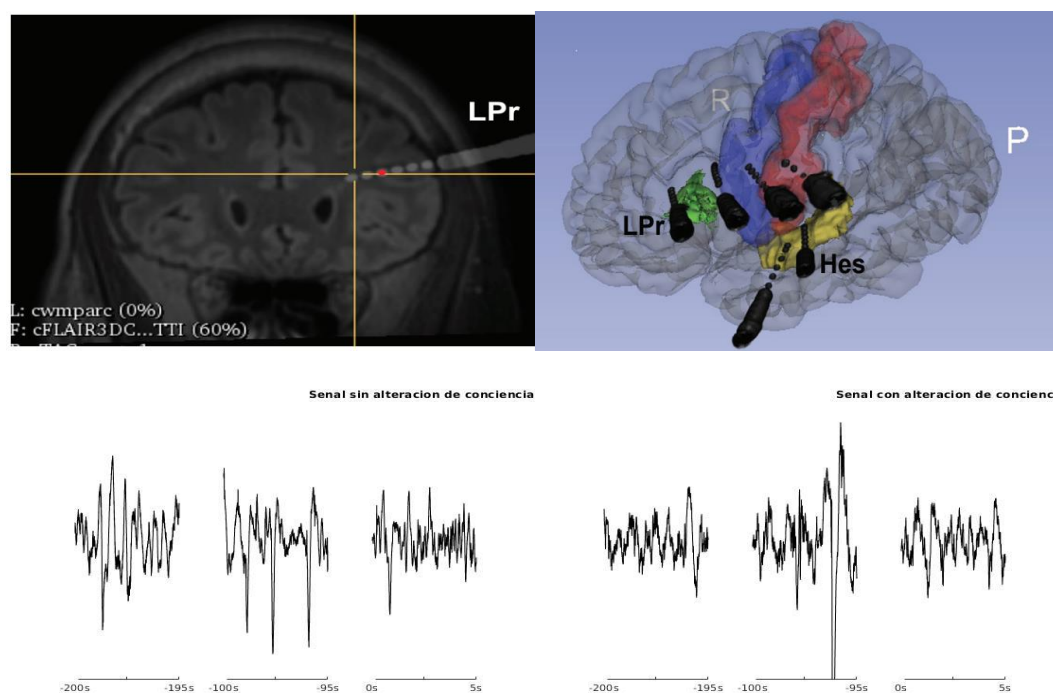


Figura 1. Arriba a la izquierda: fusión entre MRI y tomografía que muestra usada para obtener la localización real de los electrodos. Arriba a la derecha: esquema del cerebro humano mostrando la identificación de distintas regiones analizadas. Abajo: muestras de 5 segundos en instantes anteriores y posteriores al inicio de la crisis (0s) de las señales obtenidas. Derecha: paciente que no presentó alteraciones en la conciencia durante la crisis. Izquierda: paciente que presentó alteraciones en la conciencia durante la crisis.

promediando 1 segundo a los 10 minutos previo de la crisis, obteniendo así la variación $\Delta\Phi_{AR}$. El mismo criterio se utilizó para calcular la potencia de la señal (P) y el ΔP . Los valores de $\Delta\Phi_{AR}$ (Figura 2) y de ΔP (Figura 3) se correlacionaron con los valores de índice de conciencia (CSS) para cada una de las crisis.

Resultados

En la Figura 2 se observa una correlación de -0.72 con $p = 3.041e-04$ cuando se toman todos las crisis, mientras que si se separan los casos entre vigilia y sueño la correlación es de -0.77 con $p = 0.0019$ para los casos de vigilia, mientras para sueño se observa correlación de -0.79 con $p = 0.0322$. En la figura 3 se observa una correlación de 0.34 con p de 0.1433 cuando se agrupan todos los casos y una correlación de 0.56 con $p = 0.0440$ para vigilia y de 0.85 con $p = 0.015$ para sueño.

[1] Conclusiones

Los resultados obtenidos muestran que existe una correlación alta entre el índice (Φ_{AR}) y el índice de conciencia (CSS) y que esta alcanza valores de significancia menores a 0.0005 . Valores de ($\Delta\Phi_{AR}$) grandes en módulo se corresponden con los valores más grandes de CSS que indican pérdida de conciencia durante la crisis. También se aprecia que la correlación entre las diferencias en potencia ΔP y el $\Delta\Phi_{AR}$ no alcanzan valores de significancia. Estos resultados permiten concluir que el índice propuesto, que mide los

cambios en la integración y/o la especialización del sistema, es sensible a los cambios de conciencia. Por otro lado, la falta de correlación entre la potencia y

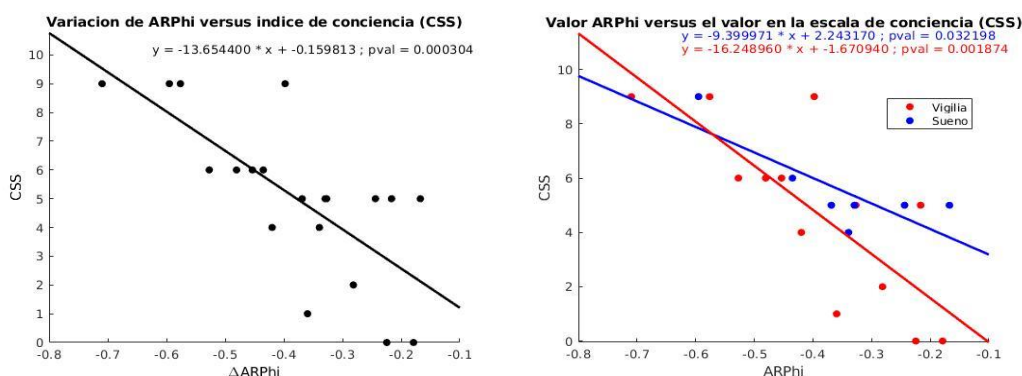


Figura 2. Correlación entre $\Delta\Phi_{AR}$ y el índice de conciencia (CSS). Arriba: todos los casos analizados. Abajo: crisis durante estado de vigilia en rojo, crisis durante sueño en azul.

CSS descarta la posibilidad de que los resultados en ($\Delta\Phi_{AR}$) se expliquen a partir de cambios en la potencia de las señales. Siguiendo esta línea de investigación los próximos pasos sugieren agregar más pacientes y crisis al estudio y comparar el comportamiento del índice $\Delta\Phi_{AR}$ en electrodos que sí se encuentran en zona epileptógenas.

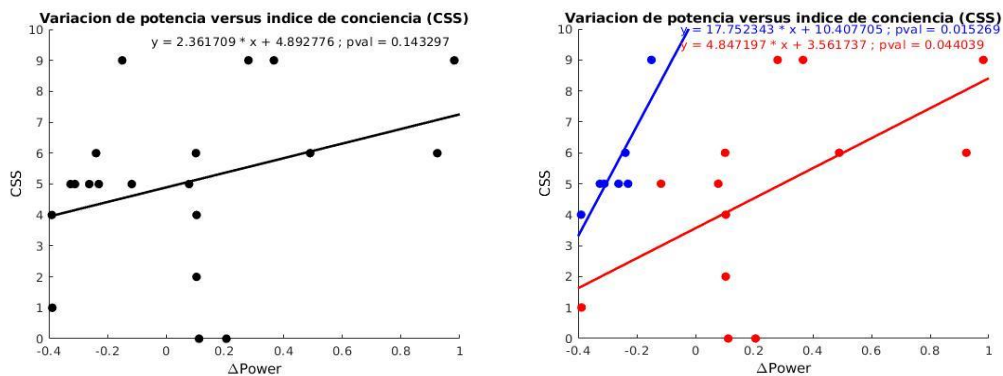


Figura 3. Correlación entre ΔP y el índice de conciencia (CSS). Arriba: todos los casos analizados. Abajo: crisis durante estado de vigilia en rojo, crisis durante sueño en azul.

Referencias

- [2] Barrett AB, Seth AK (2011) Practical Measures of Integrated Information for Time-Series Data. PLoS Comput Biol 7(1): e1001052.
- [3] Tononi, G. (2004). An information integration theory of consciousness. BMC Neurosci 5, 42
- [4] Delorme A & Makeig S (2004) EEGLAB: an open-source toolbox for analysis of single-trial EEG dynamics, Journal of Neuroscience Methods 134:9-21

9

Estimación rápida de la mediana en tiempo real.

Burman, Ariel^a; Bongiovanni, Cristian^a; Lew, Sergio^a

^a Instituto de Ingeniería Biomédica, Universidad de Buenos Aires.
slew@fi.uba.ar

Resumen

La eliminación de ruido en señales electrofisiológicas extracelulares es clave para la determinación de la ocurrencia de potenciales de acción. Uno de los métodos más empleados es el descarte de muestras que caen por debajo de un determinado umbral. En la mayoría de los casos este umbral está directamente relacionado con la estimación de la mediana de los datos, proceso que debe realizarse de manera online. En este trabajo presentamos un método para estimar la mediana de datos registrados en tiempo real que, en condiciones de estacionariedad, resulta más rápido y eficiente que el método tradicional de ventana deslizante. Se analizan diferentes situaciones de cambio de mediana y se muestra que, ante cambios bruscos el método actualiza el valor estimado con la misma velocidad que el tradicional mientras que ante cambios pequeños introduce un retardo que es función de la longitud del buffer interno. La eficiencia en la estimación, causada por una sobrepoblación del buffer con valores cercanos a la mediana real, hace al método menos sensible a variaciones de la señal en ventanas cortas. Con esta nueva manera de calcular la mediana en tiempo real, se hizo posible su implementación en un sistema embebido (FPGA) que registra hasta 64 canales muestreados a 30 kHz por canal y posibilita la determinación de la tasa de disparo neuronal en tiempo real. Si bien la aplicación aquí mostrada refiere a la supresión de ruido en señales electrofisiológicas, el método es general.

Abstract

Noise subtraction is critical for action potentials detection in extracellular electrophysiological signals. One of the most common methods consists in discarding samples that fall below a given threshold. In most cases, this threshold is directly related to the median estimation of the data, a process that must be carried out on-line. In this work we present a method to estimate in real time the median of recorded data that, under stationarity conditions, is faster and more efficient than the traditional sliding window method. We analyze different scenarios of median change and we show that, in the event of sudden changes, the proposed method updates the estimated value with the same speed as the traditional one, while in the event of small changes it introduces a delay that is a function of the length of the internal buffer. The efficiency in the estimation, caused by an overpopulation of the buffer with values close to the true median, makes the method less sensitive to variations in the signal in short

windows. We implemented the proposed median estimator in an embedded system (FPGA) that records up to 64 channels sampled at 30 kHz per channel enabling the detection of the neural firing rate in real time. Although the application shown here refers to the suppression of noise in electrophysiological signals, the method is general.

Palabras clave: mediana, estimador, tiempo real.

Introducción

La observación de la actividad neuronal es imprescindible para comprender de qué manera el sistema nervioso codifica información.

Uno de los métodos más empleados consiste en la detección de los potenciales de acción (PA) producidos por neuronas individuales.

A partir del año 1950 ha crecido exponencialmente el número de neuronas registradas y actualmente se pueden observar cientos de neuronas en simultáneo [1].

Los PA que se desean registrar requieren una tasa de muestreo de 20 a 30 kS/s. Los algoritmos actuales desarrollados sobre sistemas *off-line* se encuentran al límite de su capacidad para procesar eficientemente el volumen de datos de múltiples canales. Si se agrega la complejidad de requerir una implementación en tiempo real para realizar aplicaciones comandadas por la información neuronal, como por ejemplo manejar un mouse o brazo robótico, se hace imposible utilizar una computadora convencional [2].

Para alcanzar la tasa máxima de muestreo mencionada es necesario procesar la información realizando gran parte de las tareas en simultáneo. Esto puede llevarse a cabo utilizando una FPGA (*Field Programmable Gate Array*) que mediante su programación en HDL (*Hardware Description Language*) permite interconectar internamente el hardware para realizar el trabajo en forma paralela. Otra ventaja de utilizar una FPGA, como sistema de adquisición y procesamiento es su bajo consumo y portabilidad, permitiendo su uso fuera de un laboratorio y facilitando su aplicación en interfaces cerebro computadora o Brain Computer Interface (BCI) [2].

El método clásico de detección de PA consiste en que, si la señal registrada supera un determinado umbral de tensión, se considera que se ha producido el disparo de una neurona. El umbral puede ser determinado con anterioridad a registrar la señal (calculado a partir de una muestra preliminar de los datos) o puede ser calculado y actualizado en tiempo real.

La señal neuronal se caracteriza por ser una señal de ruido blanco sumada a los potenciales de acción que suceden con frecuencia entre 0,5 y 100 Hz.

El detector por umbral suele establecerse en una cantidad N de desvíos estándar σ asociado al nivel de ruido en la señal. Entonces el problema consiste en obtener una buena estimación de dicho σ . Cuando el ruido sigue una distribución gaussiana, con media cero, al aplicar valor absoluto, el desvío se relaciona con la mediana del valor absoluto según [3]

$$\sigma = \text{medianax}0.6745 \quad (1)$$

El umbral suele tomarse en 4 desvíos estándar y si bien la probabilidad de que una muestra supere 4 desvíos (considerando que se utiliza el valor absoluto de una distribución gaussiana) es $P(x > 4\sigma) = 6,7 \cdot 10^{-5}$, en general un potencial de acción tendrá al menos 2 muestras seguidas superando el umbral lo cual la probabilidad de considerar un falso

positivo es $4,5 \cdot 10^{-9}$. Esto es, a una tasa de 30 kS/s, se espera un falso positivo cada 2 horas de registro.

A medida que la tecnología permite realizar registros por tiempos más prolongados, se hace imprescindible poder determinar el umbral de detección en forma dinámica, ya que las características del ruido van cambiando a lo largo del tiempo de adquisición en función de las condiciones de registro (como la posición de los electrodos en relación a las neuronas detectadas).

Por lo tanto, en este trabajo se desarrolló un método para estimar la mediana de un conjunto de datos, y bajo la hipótesis de que el ruido en las señales neuronales sigue una distribución gaussiana, esta mediana permite estimar el desvío y ajustar en tiempo real el umbral de detección de los PA

Desarrollo

Algoritmo

El estimador de mediana se compone de un buffer B de L posiciones, con L impar. Los elementos en el buffer se denominan b_i con $i \in I = \{0, 1, \dots, L-1\}$. Estos elementos siempre se encuentran ordenados en forma creciente, es decir $\forall i, j \in I / i < j \Rightarrow b_i \leq b_j$. Como L es impar y el buffer está ordenado, el elemento b_m en la posición $m = (L-1)/2$ corresponde a la mediana del conjunto de datos almacenados en el buffer.

El buffer se actualiza con cada muestra de la población que se intenta caracterizar.

Regla de actualización

Siendo $B_t = [b_0, \dots, b_m, \dots, b_{L-1}]$ el buffer en el instante t , x_n la nueva muestra que se inserta en el buffer y B_{t+1} el buffer luego de actualizarse, el algoritmo de actualización sigue las siguientes reglas: si $x_n < b_m$, como el buffer está ordenado, el nuevo elemento se inserta a la izquierda de b_m . Se encuentran dos opciones: en la primera opción existe $k < m$ tal que $b_k \leq x_n$. En este caso el elemento x_n se inserta entre los elementos b_k y b_{k+1} . Todos los elementos mayores a b_{k+1} se desplazan una posición hacia la derecha, y se descarta el último elemento del buffer. El estado del buffer luego de la actualización es:

$$B_{t+1} = [b_0, \dots, b_k, x_n, b_{k+1}, \dots, b_{m-1}, b_m, \dots, b_{L-2}]$$

En la segunda opción, x_n es menor que cualquier otro elemento del buffer, con lo cual x_n se inserta en la primera posición, todos los elementos del buffer se desplazan una posición a la derecha y se descarta el último elemento:

$$B_{t+1} = [x_n, b_0, \dots, b_{m-1}, b_m, \dots, b_{L-2}]$$

En ambas situaciones el elemento que se ha descartado es b_{L-1} y el elemento b_{m-1} pasó a ocupar la posición m .

Si $x_n > b_m$ se procede con el caso análogo. En este caso el elemento que se descarta es b_0

Finalmente si $x_n = b_m$, se descarta aleatoriamente x_0 o x_{L-1} y se desplaza el buffer consecuentemente.

Como observación, los casos de comparación de igualdad son relevantes cuando x pertenece a un conjunto discreto.

Características

Las principales características de este algoritmo son:

- Con este método de inserción y descarte, el buffer siempre se encuentra ordenado.
- Cada nueva muestra se ingresa al buffer.
- Siempre se descarta una muestra que es ó la menor ó la mayor del buffer.
- La muestra que se descarta no está relacionada con el orden de llegada (como sí sucede en un estimador de mediana móvil).
- Luego de actualizar, x_m (el elemento en la posición m) siempre es la mediana del buffer.
- El orden computacional del algoritmo es $O(\log N)$ (con $N = L$) ya que solo requiere una búsqueda en un *array* ordenado y luego una inserción.

Estimador

Sea $p(x)$ una función de densidad de probabilidad unimodal de la cual se toman muestras, con media μ y mediana M .

Se toma como estimador de la mediana $M_t = b_m t$.

Para analizar la dinámica del algoritmo, se considera el caso donde el buffer está poblado de elementos mayores a la mediana de forma tal que la estimación M_t será mayor que la mediana de la distribución: $M_t > M$. En esta condición, la probabilidad de que el elemento nuevo sea menor a M_t es mayor a $1/2$. Es decir, en las sucesivas iteraciones habrá más elementos donde $x_n < b_m$. De esta forma, los x_n ingresarán por la izquierda de b_m , y se irá descartando siempre el elemento más grande del buffer, con lo cual la estimación de la mediana se irá reduciendo.

El caso donde $M_t < M$ es análogo, con lo cual el algoritmo encuentra un punto estable cuando $M_t = M$. Es decir, $P_{x_n > b_m} = P_{x_n < b_m} = 1/2$.

Resultados

Eficiencia

Para mostrar la eficiencia del estimador, se realizó la siguiente simulación: se utiliza como datos de entrada muestras de población con distribución gaussiana de media $\mu = 10$ y desvío $\sigma = 1$. Se compara el algoritmo propuesto en este trabajo con un buffer de $L = 63$ (NM-63) contra un estimador clásico de mediana de ventana deslizante (CMM) de diferentes longitudes de ventana $L = \{63, 127, 255, 511, 1023\}$

Con $N = 107$ datos se registra la estimación que provee cada algoritmo luego de cada iteración. En la Figura 1 se presenta un extracto de los datos generados, la estimación obtenida por el método propuesto y por una ventana deslizante, en ambos casos con buffer de longitud 63. En la Figura 2 se presenta el histograma de las estimaciones de cada método. En esta Figura se observa que a medida que se aumenta la longitud del buffer con el estimador clásico, el desvío estándar del estimador se va reduciendo (es decir, el estimador se vuelve más eficiente). Esta Figura muestra que el estimador propuesto con un

buffer de 63 posiciones es tan eficiente como el estimador clásico de ventana deslizante con un buffer de 1023 posiciones.

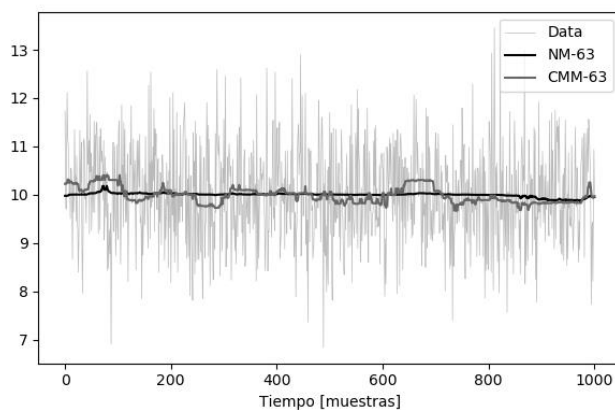


Figura 1: Estimador propuesto y estimador clásico de mediana móvil con buffer de 63 posiciones.

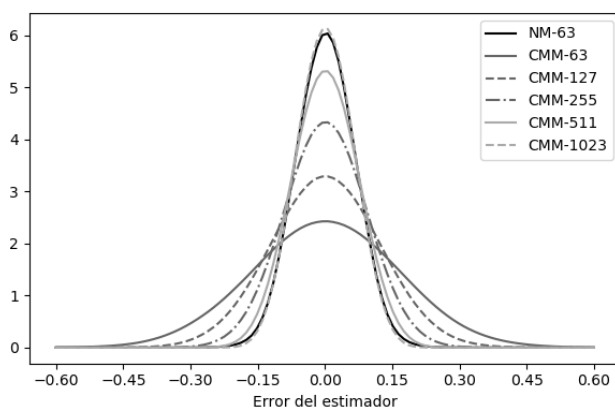


Figura 2: Error de estimación en función de la longitud de buffer.

En la Figura 3 se presenta la relación de desvío estándar de los estimadores, para los datos generados. En esta Figura se observa que el método propuesto es siempre más eficiente que el método clásico para la misma longitud de buffer.

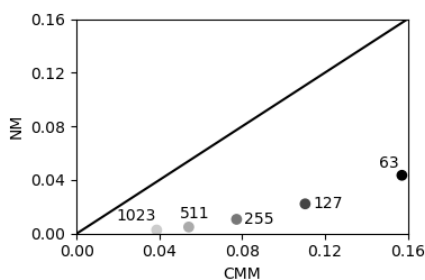


Figura 3: Relación de desvío estándar entre el estimador propuesto y el estimador clásico, para distintas longitudes de buffer.

Discriminación

Uno de los puntos más importantes es la posibilidad de discriminar cuándo hay un cambio en el nivel de ruido (que es equivalente a un cambio en el desvío estándar σ de los datos de entrada). Para evaluar el desempeño del estimador se realizó la siguiente simulación: se generaron datos de una población con distribución gaussiana, con $\sigma = 1$ y con medias $\mu - \delta/2$ y $\mu + \delta/2$, para valores de $\mu = 10$ y $\delta \in [0,1]$.

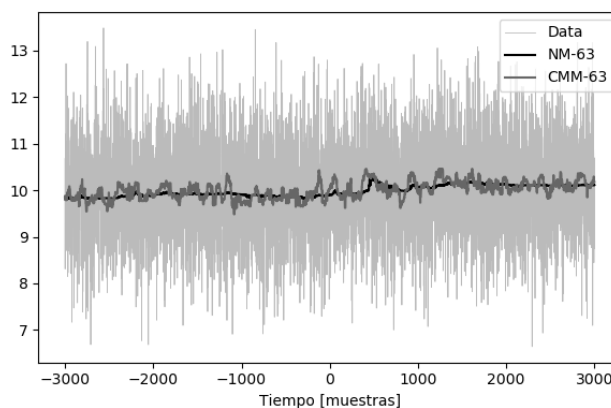


Figura 4: Ejemplo de variación en el valor medio del ruido con $\delta = 0.2$.

En la Figura 4 se ejemplifica el caso $\delta = 0.2$. El cambio en la media se produce al instante $n = 0$. Un análisis visual de los datos no permite distinguir dicho cambio. En la Figura 5 se presenta en línea continua el histograma de todas las estimaciones obtenidas por cada método. En línea cortada se muestra por separado el histograma antes y después del cambio de media.

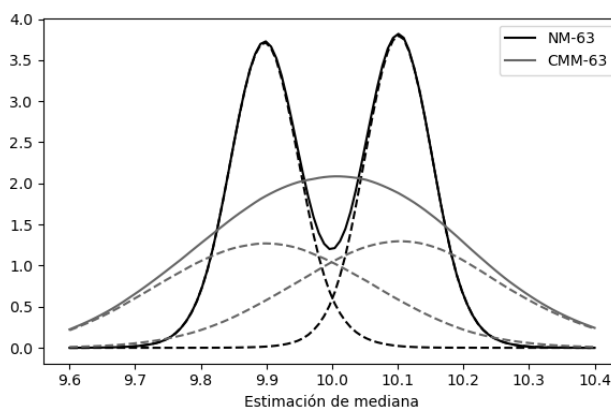


Figura 5: Selectividad de ambos estimadores para el caso $\delta = 0.2$.

Este ejemplo en particular muestra una muy buena discriminación para el estimador propuesto mientras que, utilizando el estimador clásico, no podría distinguirse en forma significativa un cambio en la mediana real de los datos.

Esta mejor discriminación del estimador propuesto en relación al estimador clásico de mediana deslizante se ve representada en la curva ROC (*Receiver Operating Characteristic*) presentada en la Figura 6.

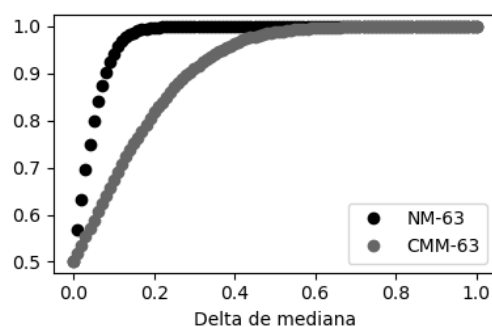


Figura 6: Curva ROC para los dos estimadores con igual longitud de buffer.

Dinámica

También se estudió qué tan rápido el algoritmo se estabiliza ante un cambio abrupto del valor de la mediana. Para esto se generaron datos con $\sigma = 1$, $\mu_1 = 8$ y $\mu_2 = 10$. En la Figura 7 se muestra un extracto de los datos cuando se produce el cambio de mediana. Se muestra también cómo es la dinámica de los estimadores CMM-511 y CMM-1023.

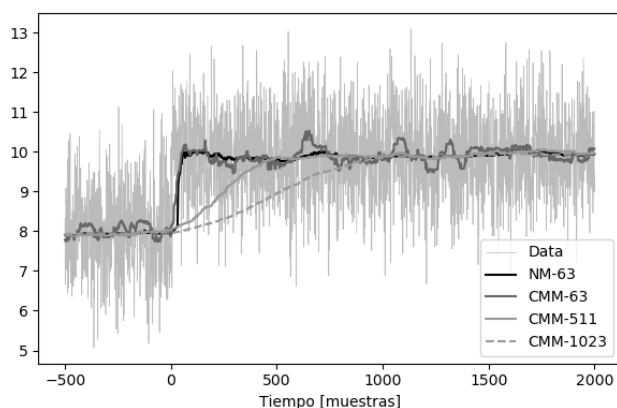


Figura 7: Cambio abrupto en la mediana

Se considera que el estimador converge al nuevo valor cuando ha alcanzado un 95% del cambio de mediana impuesto (en este caso cuando supera 9.9).

Esta simulación se repitió 10.000 veces y se promedia el tiempo de establecimiento y el desvío obtenido por el conjunto de estimaciones hechas. En la Figura 8 se presenta la comparación entre el estimador NM-63 y el estimador clásico con distintas longitudes de buffer. En esta figura se puede ver que el estimador NM-63 tiene una eficiencia tan buena como el estimador CMM-1023 (como ya se había observado en la Figura 2) y al mismo tiempo, el tiempo de establecimiento se encuentra en el mismo orden que los estimadores CMM-63 y CMM-127.

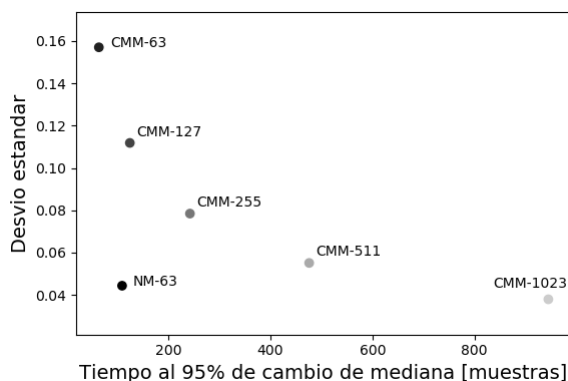


Figura 8: Tiempo de establecimiento de los estimadores

Distribuciones

En estas simulaciones se utilizó siempre una señal con distribución gaussiana donde la mediana coincidía con la media de la distribución. En la detección de PA, la señal de ruido tiene usualmente media igual a 0. Por ese motivo, la estimación del desvío se hace a partir de la mediana como se indicó en la ecuación (1).

Para validar el correcto comportamiento del estimador se generaron muestras provenientes de una población con distribución gaussiana con $\mu = 0$ y $\sigma = 50$. Al aplicar el valor absoluto a la señal el valor teórico de la mediana de la nueva distribución es 33.7 que, con el factor 0.6745 como se indica en la ecuación (1), coincide con el desvío estándar de la distribución original.

En la Figura 9 se presentan los resultados de dicha simulación. En línea continua se encuentra el histograma de los datos generados (valor absoluto de una distribución gaussiana) y el histograma de la salida del estimador. En línea punteada se indica la mediana teórica de los datos generados mostrando que el estimador no presenta sesgo en su estimación.

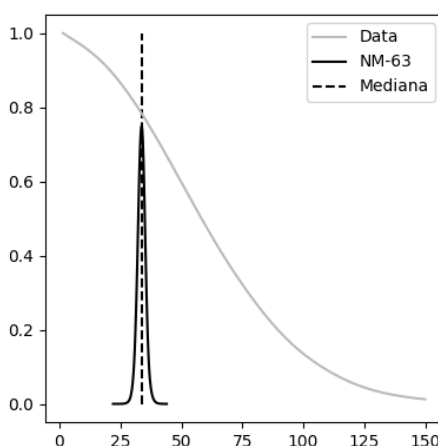


Figura 9: Resultado del algoritmo de estimación propuesto con una señal con distribución asimétrica

Sub-muestreo

Para validar el desempeño del estimador de mediana para su uso en la detección de PA se generó una señal de ruido blanco con distintos niveles de σ sumada a potenciales de acción en tiempos aleatorios. En la Figura 10 se muestra un ejemplo de esta señal incluyendo el umbral $th = -4\sigma$ con sigma determinado por los estimadores NM-63 y CMM-63.

Los potenciales de acción suelen tener una duración entre 1 a 2 ms. Con una tasa de muestreo de 30 kS/s, esto representa entre 30 a 60 muestras. Esto hace que el buffer tanto del estimador NM-63 como CMM-63 se llenen de muestras asociadas al potencial de acción, lo que afecta la estimación de la mediana del nivel de ruido. En la Figura 10 se muestra un ejemplo de este efecto donde ambos estimadores se ven alterados por el PA.

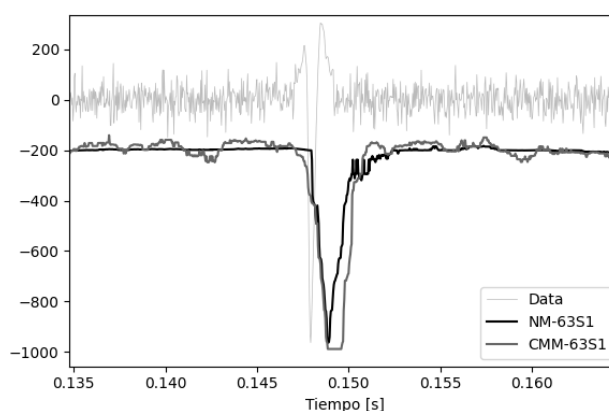


Figura 10: Efecto de un potencial de acción en ambos estimadores.

Para resolver este inconveniente, se puede utilizar un buffer de longitud más grande lo cual hará que las muestras de un PA no terminen por ocupar todo el buffer y se descarten rápidamente por ser valores extremos. Esto tiene la desventaja de que la implementación en FPGA requiere espacio de almacenamiento extra.

Como alternativa puede realizarse un sub-muestreo de la señal de entrada. Debido a que el ruido es estacionario, este seguirá siendo muestreado con las mismas propiedades (lo cual permitirá estimar correctamente el desvío del ruido), mientras que los PA que son eventos aislados o esporádicos a lo sumo influirán en 1 o 2 muestras. De esta forma, se logra el mismo efecto que un buffer de mayor longitud, pero manteniendo el mismo uso de recursos en la FPGA, además de que se reduce el consumo computacional, ya se procesan menos muestras.

En la Figura 11 se observa el efecto de diferentes tasas de sub-muestreo de la señal de entrada. Para el caso de PA, a partir de las tasas de sub-muestreo de 1:8 (NM-63S8) o 1:16 (NM-63S16) son suficientes para evitar que los PA alteren la estimación de la mediana.

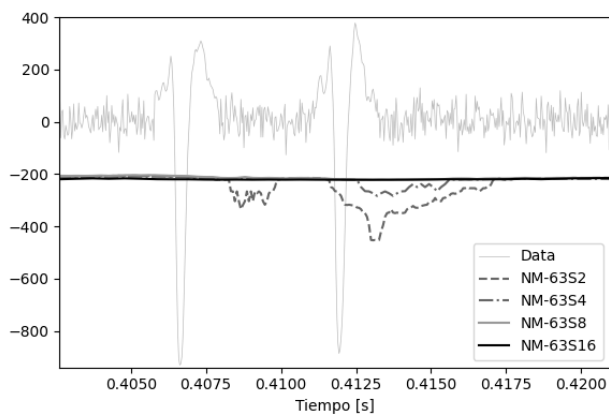


Figura 11: Efecto del sub-muestreo para tasas de sub-muestreo de 2, 4, 8 y 16.

Detección

Para evaluar el desempeño del estimador en relación a la detección de PA a partir de un umbral se generaron datos con PA en tiempos aleatorios sumados a una señal con ruido de distribución gaussiana. Se emplearon distintos niveles de desvío estándar siempre utilizando la misma amplitud de PA. Esto se traduce en señales con distinto SNR (relación entre la amplitud máxima del promedio de PA, y el desvío estándar del ruido). Para cada señal se utilizaron los estimadores NM-63S16 y CMM-63S16. Se calcularon los falsos positivos (FP) falsos negativos (FN) y los verdaderos positivos (TP). En la Tabla 1 se presenta una síntesis de los resultados.

Tabla 1: Desempeño de los estimadores en su uso para la detección por umbral.

SNR	NM-63S16			CMM-63S16		
	TP	FN	FP	TP	FN	FP
10	114	2	10	114	2	45
7.7	130	0	5	130	0	60
6.25	116	1	4	116	1	24
5.2	127	4	5	111	20	40
4.7	105	17	3	90	32	57

Para todos los casos, el estimador clásico es más propenso a generar FP, debido a su mayor variabilidad. Además, también se observa en estos resultados que el estimador propuesto en este trabajo es menos susceptible a un deterioro de la relación SNR de la señal obteniendo menor proporción de FN en relación a los TP.

Conclusiones

El algoritmo propuesto para la estimación de mediana en tiempo real ha mostrado ser más eficiente que un estimador de ventana móvil, al mismo tiempo que la complejidad del algoritmo es $O(\log N)$ que supera en creces la complejidad del estimador clásico de ventana móvil $O(N \log N)$. Para una misma longitud de buffer, el algoritmo propuesto posee un poder de discriminación mayor al mismo tiempo que mantiene una respuesta dinámica similar al algoritmo clásico. Finalmente, cuando se utiliza para estimar el ruido de una señal que además incluye PA, un esquema de sub-muestreo permite mantener las propiedades indicadas sin la necesidad de incrementar la longitud del buffer interno.

Referencias

- [1] Stevenson I. H. and Kording K. P. (2011). How advances in neural recording affect data analysis. *Nature Neuroscience*, 14(2):139–142.
- [2] Yanagisawa T., Hirata M., Saitoh Y., Goto T., Kishima H., Fukuma R., Yokoi H., Kamitani Y., and Yoshimine T. (2011) Real-time control of a prosthetic hand using human electrocorticography signals. *Journal of Neurosurgery*, 114(6):1715–1722.
- [3] Donoho D. L. (1995) De-Noising by Soft-Thresholding. *IEEE Transactions on Information Theory*. 41(3):613-627

10

Software para el análisis del mapeo electrocardiográfico

Caracciolo, S.F. ^{a,b}; Caiafa, C.F. ^{b,d}; Martínez Pería F.D. ^{a,c};
Arini, P.D. ^{a,b}

^a Instituto Argentino de Matemática, CONICET, Saavedra 15 (C1083ACA), CABA, Argentina

^b Instituto de Ingeniería Biomédica, UBA, Av. Paseo Colón 850 (C1063ACV), CABA, Argentina

^c Centro de Matemática de La Plata, UNLP, 47 y 115 (B1900AJJ), La Plata, Buenos Aires, Argentina

^d Instituto Argentino de Radioastronomía, CONICET, (1894) Villa Elisa, Buenos Aires, Argentina
scaracciolo@conicet.gov.ar

Resumen

En este trabajo presentamos la etapa inicial de EcgVis, un software de código abierto orientado a la visualización y procesado de señales cardíacas con foco al mapeo electrocardiográfico. Los objetivos principales de EcgVis son: visualizar electrocardiogramas multicanal, efectuar el tratamiento de los artefactos cardíacos de una manera reproducible y confiable, y facilitar el estudio de las investigaciones relacionadas al mapeo electrocardiográfico.

Para el desarrollo del software se ha utilizado Python con bibliotecas de código abierto y el renderizado 2/3D es basado en procesador gráfico.

La herramienta desarrollada potencia la investigación en el campo del mapeo electrocardiográfico con el fin de mejorar su capacidad diagnóstica.

Abstract

In this work, we present the first steps of EcgVis an open-source software for visualization and processing of cardiac signals focused on electrocardiographic imaging. The main aims are visualization of multichannel electrocardiographic signals, reproducible and confident standard preprocessing of cardiac signals and support for research on electrocardiographic imaging.

The software has been developed on Python language programming with open source libraries and 2/3D rendering is based on graphical processing units.

The developed tool enhances research in the field of electrocardiographic imaging to improve its diagnostic capability.

Palabras clave: visualización, ecg, problema inverso, regularización.

Introducción

El mapeo electrocardiográfico, más conocido por su acrónimo ECGI (del inglés, Electrocardiographic Imaging). es una técnica de diagnóstico cardiológico utilizada para estimar, no invasivamente, el potencial eléctrico en el epicardio [1].

Para llevar a cabo la técnica, se requiere de una imagen médica en conjunto con la adquisición de gran cantidad de canales electrocardiográficos. El potencial eléctrico sobre el epicardio es estimado como solución a un problema inverso mal condicionado que debe ser regularizado.

Las principales aplicaciones del mapeo electrocardiográfico son: 1) soporte en el planeamiento y ejecución de las terapias de ablación 2) estratificación de riesgo y diagnóstico.

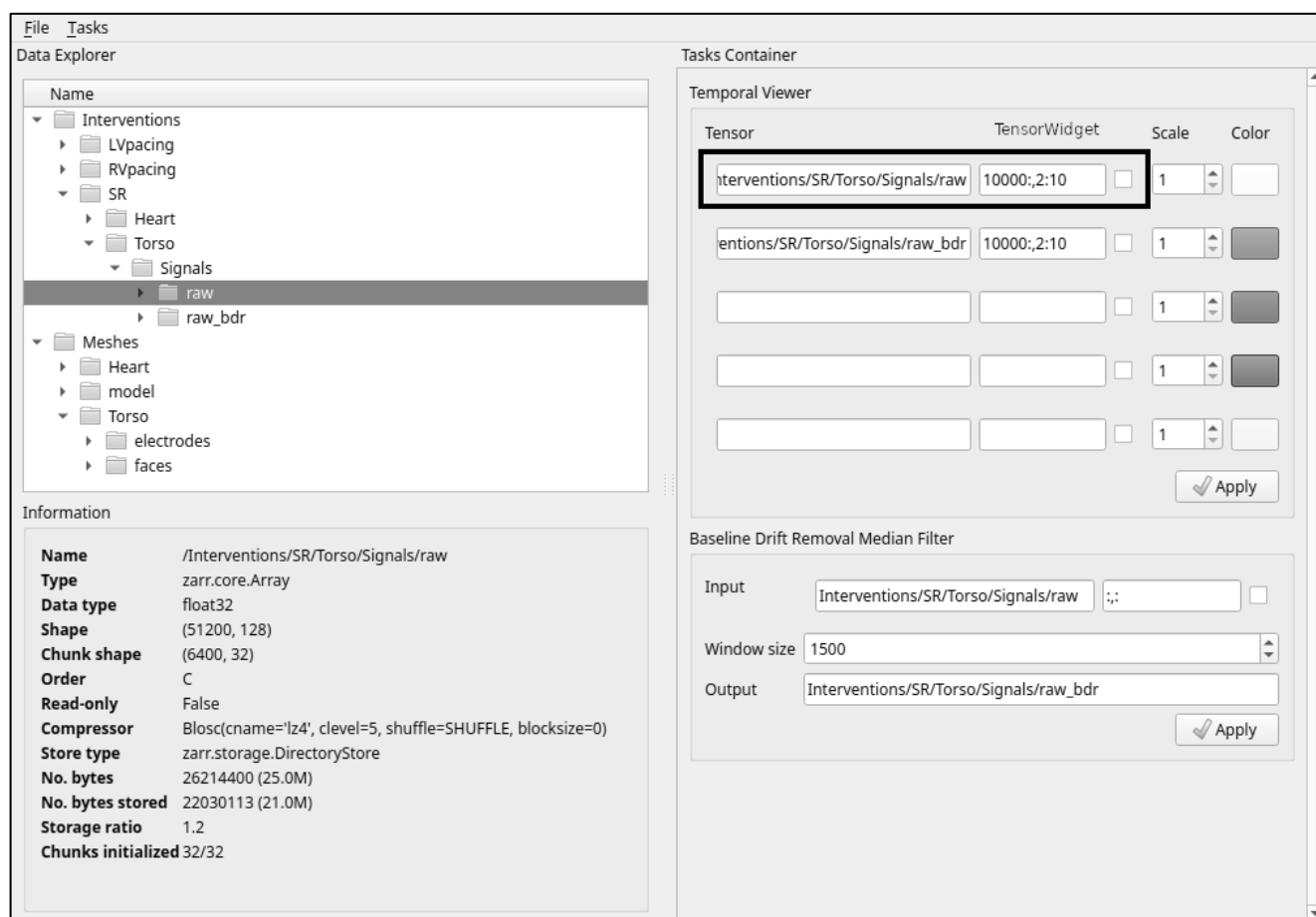


Figura 1: Panel principal de EcgVis. Se destacan tres secciones: el menú en la parte superior, el explorador de datos a la izquierda y el contenedor de tareas a la derecha.

El objetivo de este trabajo es desarrollar un software que permita preprocesar, computar y visualizar la actividad eléctrica cardíaca en tiempo y espacio que interviene en el mapeo electrocardiográfico para evaluar el impacto de diferentes regularizaciones.

El desarrollo del software se ha realizado en el lenguaje de programación Python utilizando las librerías VisPy [2] y Napari [3] para las visualizaciones 2/3D basadas en GPU (del inglés, Graphics Processing Unit), Zarr para el almacenamiento y acceso de grandes datos [4], NumPy para el manejo tensorial [5], SciPy para el procesado de señales [6], y PySide6 para la implementación de la GUI (del inglés, Graphical User Interface) [7].

Entre las capacidades del software desarrollado se encuentran: visualizar señales temporales multicanal, asignar marcas temporales para identificar eventos, identificar canales ruidosos, visualizar torso/epicardio con potenciales eléctricos, filtrar la línea de base a señales temporales, reconstruir/interpolan canales ruidosos, computar el problema inverso electrocardiográfico, navegar los potenciales eléctricos estimados en función de los hiperparámetros, visualizar curvas de criterios de selección de hiperparámetros y computar métricas.

La herramienta desarrollada potencia la investigación en el campo del mapeo electrocardiográfico con el fin de mejorar su capacidad diagnóstica.

Materiales y métodos

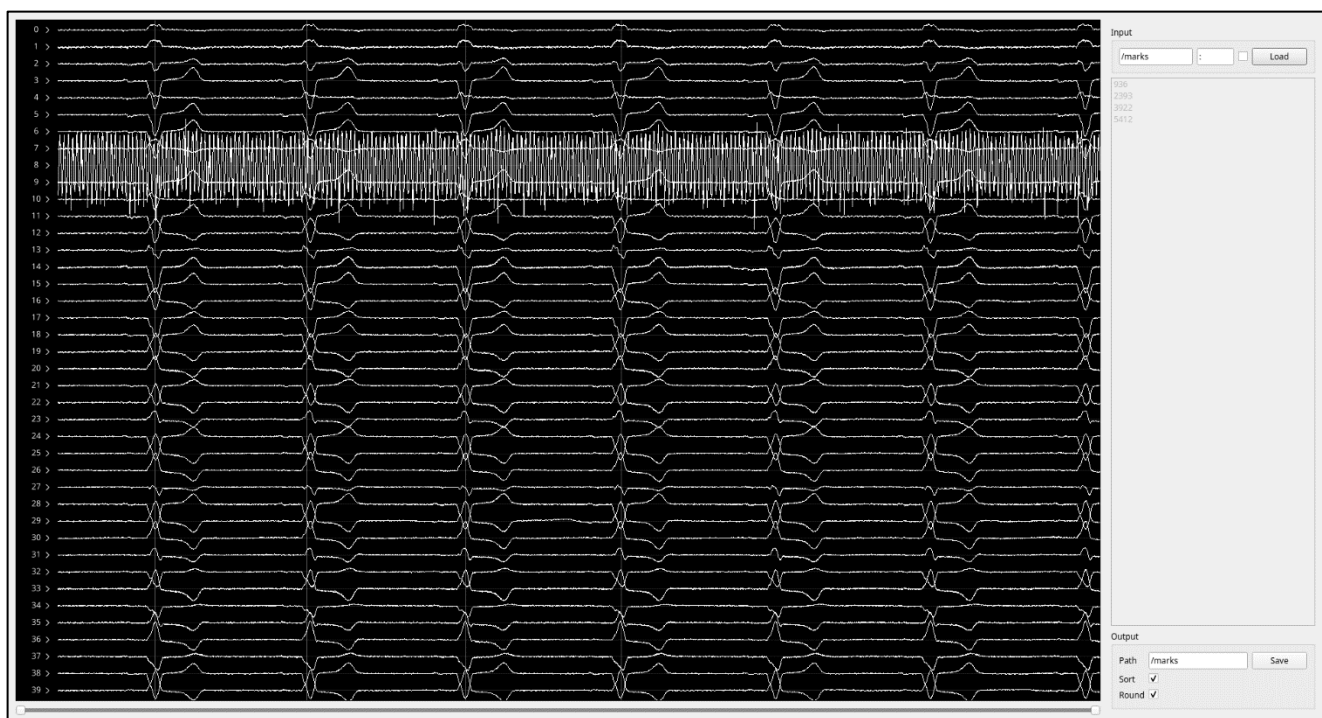


Figura 2: Visualizador de series temporales multicanal. El panel de la derecha lista los cursores agregados.

La visualización de datos científicos ha tomado gran importancia a partir del incremento del volumen de datos en las últimas décadas. La manipulación y visualización de grandes datos

presenta desafíos en la comunidad científica ya que la disponibilidad de hardware y software especializado es limitada por falta de recursos económicos y humanos, lo cual podría impactar en la disponibilidad de líneas de investigación y/o llevar a cabo análisis específicos en diversas áreas.

En este contexto, el software de código abierto promueve la colaboración de diferentes instituciones u organismos con el fin de descentralizar el desarrollo de código y permitir el acceso y modificación de las implementaciones para adaptarlas a las líneas de investigación de cada grupo de trabajo.

Lenguaje de programación

Python es un lenguaje de programación de propósito general, multiparadigma y actualmente se encuentra entre los lenguajes más populares. Se caracteriza por ser de alto nivel, interpretado, y diseñado con legibilidad de código como pilar fundamental. Además, es de código abierto y tiene una comunidad fuertemente activa [8].

Bibliotecas científicas

Los objetos básicos de Python como *list*, *dict*, o *tuple*, no fueron concebidos para la programación numérica de alto rendimiento como lo requiere el cómputo científico. Por este motivo, una de las debilidades de Python, es la velocidad de ejecución, condicionada en parte, por ser un lenguaje interpretado. Sin embargo, la comunidad científica ha derribado este obstáculo mediante la incorporación de bibliotecas desarrolladas en lenguajes compilados como C, C++, OpenGL, Fortran, etc. que pueden ser ejecutadas en Python de manera transparente. Ejemplos reconocidos son Numpy y SciPy [5], [6].

La posibilidad de efectuar cómputo científico de alto rendimiento en un lenguaje de programación de código abierto ha motivado a la comunidad científica a migrar paulatinamente sus códigos de software privativo a Python.

Interfaz gráfica

La GUI de EcgVis es desarrollada bajo el paradigma Modelo/Vista utilizado en Qt6 [9].

PySide6 es la biblioteca de Python elegida para el proyecto ya que cuenta con licencia de código abierto LGPLv3/GPLv2 y provee los *bindings* oficiales de Qt6 [7].

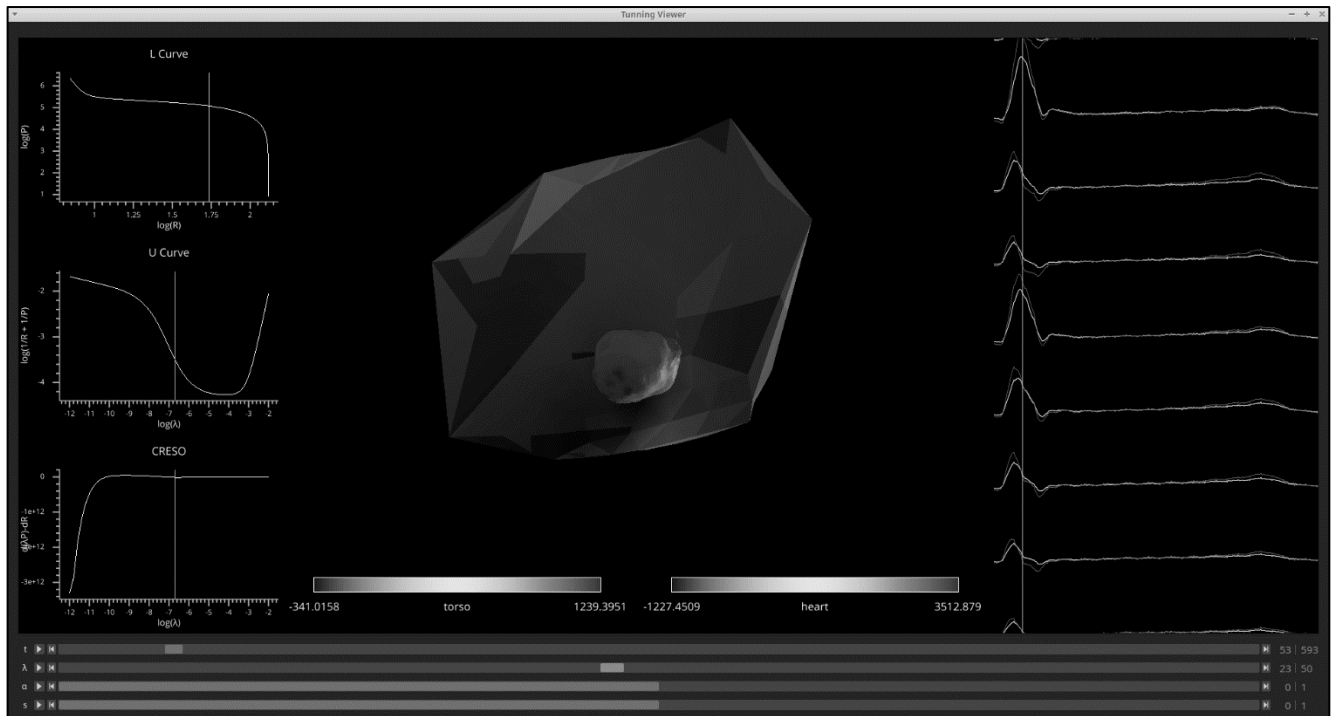


Figura 3: Visualizador de experimentos en el modo Tuning. Simultáneamente permite la visualización temporal y espacial de las señales involucradas.

Resultados

La interfaz gráfica cuenta con dos componentes principales como se muestra en la Fig. 1. A la izquierda, el explorador de la estructura de datos (Data Explorer) y a la derecha el contenedor de tareas (Tasks Container).

El explorador consiste de un objeto *QTreeView* y un modelo *QFileSystemModel* que apunta a una estructura Zarr alojada en el disco rígido. Esta estructura debe ser creada según la necesidad del investigador teniendo en cuenta los grupos (carpetas) y tensores que requiera para su estudio.

Cuando se selecciona un elemento dentro del explorador, la información asociada, como el tipo de dato, dimensión, tamaño, etc. aparece en la parte inferior del explorador de datos (Information).

Por otro lado, el contenedor de tareas funciona en conjunto con la solapa *Tasks* del menú, donde se encuentran todas las tareas y visualizadores (Viewers) disponibles. Al seleccionar cada una de ellas, el contenedor apila los formularios correspondientes.

En la Fig. 1, se observa que las tareas "Temporal Viewer" y "Median Filter" han sido seleccionadas, por lo que ambos formularios están disponibles en el contenedor de tareas.

Los campos requeridos por cada tarea son, naturalmente, parámetros numéricos (*QSpinBox*), de texto (*QLineEdit*), on/off (*QCheckBox*), etc. Además de los campos mencionadas, cada tarea o visualizador cuenta con una o varias entradas y, opcionalmente, alguna salida.

Se ha desarrollado un objeto *TensorWidget* que se constituye de un *QLineEdit* para insertar la ruta del tensor, un *QLineEdit* para definir qué parte del tensor se desea usar (utilizando la misma sintáxis de indexado de NumPy [9]), y un *QCheckBox* para trasponer la matriz resultante en caso de ser necesario (Ver Fig. 1). Cabe destacar que el la inserción de la ruta del tensor alojado en la estructura Zarr, puede ser arrastrado hasta el campo deseado con el procedimiento llamado *Drag & Drop*.

Finalmente, cada tarea cuenta con un botón *Apply* cuya función es ejecutar la tarea configurada.

Visualizador temporal

En la Fig. 2 se muestra uno de los componentes principales de EcgVis, el visualizador de series temporales, el cual permite explorar simultáneamente una cantidad arbitraria de canales electrocardiográficos, tal como ocurre en la técnica ECGI.

Adicionalmente, a la derecha del visualizador se listan los cursores multicanal agregados mediante doble *click* en el gráfico, lo cual permite la identificación manual de eventos y guardarlos en la estructura de datos Zarr para su posterior procesamiento.

En la Fig. 1, parte derecha superior, se observa que el formulario del visualizador cuenta con cinco *TensorWidget* para insertar tensores de cualquier dimensión, con la opción de escala, en caso de requerir visualizar tensores con datos en distintos órdenes de magnitud, y seleccionar el color para diferenciarlos.

El visualizador permite navegar los canales con el deslizador del ratón y efectuar zoom in/out presionando *shift+scroll*.

Procesamiento de señales

EcgVis cuenta con algoritmos de uso frecuente en el preprocesado electrocardiográfico y permite agregar nuevos módulos según lo requiera la aplicación.

Los módulos implementados al momento son 1) filtro de línea basado en *splines* y marcas PQ/TP [10], 2) filtro de línea basado en mediana [11], 3) remoción de nivel isoelectrico basado en la moda estadística [12], 4) filtro de ruido de línea no lineal y adaptativo [13], 5) Interpolación espacial de los ECG para reconstruir canales ruidosos [14].

El desarrollo de los algoritmos mencionados, se encuentran públicamente implementados en [15], [16].

Visualizador de experimentos

EcgVis ha sido desarrollo con el objetivo de visualizar y explorar las soluciones al problema inverso electrocardiográfico otorgando información relacionada como curvas de selección

de hiperparámetros y métricas. Es por ello, que el software cuenta con un visualizador de experimentos constituido por los módulos *Tunning* y *Metrics*.

Por un lado, el módulo *Tunning* permite al usuario estudiar las curvas de selección de hiperparámetros tales como, L-curve, CRESO y U-curve [17], y visualizar el potencial eléctrico en forma espacial para las geometrías del torso y corazón. Simultáneamente, se muestran los electrocardiogramas (ECGs) estimados con el problema directo, superpuestos a los ECG medidos (ver Fig. 3).

Por otro lado, el módulo *Metrics*, permite analizar el comportamiento de las métricas para cada hiperparámetro y la visualización de las soluciones estimadas por el problema inverso en conjunto con los ECGs medidos invasivamente.

Cabe destacar, que en ambos módulos mencionados se encuentran aún en desarrollo y cuentan con cuatro controles variables, dos hiperparámetros (α , λ), el tiempo o muestras (t) y cada latido (s) para navegar todas las soluciones fácilmente.

Conclusiones

El software EcgVis desarrollado facilita los estudios realizados por el grupo de investigación brindando una herramienta para visualizar ECGs multicanal y algoritmos estándar de preprocesado electrocardiográfico y aplicaciones a la resolución del problema inverso en electrocardiografía.

Por último, debemos destacar que el software EcgVis presentado se encuentra en desarrollo continuo y a medida que las etapas de investigación lo van requiriendo se introducen cambios y mejoras.

Referencias

- [1] "Frontiers | Validation and Opportunities of Electrocardiographic Imaging: From Technical Achievements to Clinical Applications | Physiology." <https://www.frontiersin.org/articles/10.3389/fphys.2018.01305/full>
- [2] L. Campagnola *et al.*, *vispy/vispy: Version 0.8.0*. Zenodo, 2021. doi: 10.5281/zenodo.5226894.
- [3] N. Sofroniew *et al.*, *napari/napari: 0.4.10rc0*. Zenodo, 2021. doi: 10.5281/zenodo.4968798.
- [4] A. Miles *et al.*, *zarr-developers/zarr-python: v2.9.0*. Zenodo, 2021. doi: 10.5281/zenodo.5243192.
- [5] "Array programming with NumPy | Nature." <https://www.nature.com/articles/s41586-020-2649-2>
- [6] P. Virtanen *et al.*, "SciPy 1.0: fundamental algorithms for scientific computing in Python," *Nat. Methods*, vol. 17, no. 3, pp. 261–272, Mar. 2020, doi: 10.1038/s41592-019-0686-2.
- [7] "Qt for Python — Qt for Python." <https://doc.qt.io/qtforpython/>
- [8] "Welcome to Python.org," *Python.org*. <https://www.python.org/>
- [9] "Qt Documentation | Modules." <https://doc.qt.io/qt.html>

- [10] C. R. Meyer and H. N. Keiser, "Electrocardiogram baseline noise estimation and removal using cubic splines and state-space computation techniques," *Comput. Biomed. Res.*, vol. 10, no. 5, pp. 459–470, Oct. 1977, doi: 10.1016/0010-4809(77)90021-0.
- [11] G. Lenis, N. Pilia, A. Loewe, W. H. W. Schulze, and O. Dössel, "Comparison of Baseline Wander Removal Techniques considering the Preservation of ST Changes in the Ischemic ECG: A Simulation Study," *Comput. Math. Methods Med.*, vol. 2017, p. e9295029, Mar. 2017, doi: 10.1155/2017/9295029.
- [12] N. Pilia, C. Nagel, G. Lenis, S. Becker, O. Dössel, and A. Loewe, "ECGdeli - An open source ECG delineation toolbox for MATLAB," *SoftwareX*, vol. 13, p. 100639, Jan. 2021, doi: 10.1016/j.softx.2020.100639.
- [13] "60Hz filtering for ECG signals: to adapt or not to adapt?" <https://ieeexplore.ieee.org/document/978829/>
- [14] T. F. Oostendorp, A. van Oosterom, and G. Huiskamp, "Interpolation on a triangulated 3D surface," *J. Comput. Phys.*, vol. 80, no. 2, pp. 331–343, Feb. 1989, doi: 10.1016/0021-9991(89)90103-4.
- [15] sfcaracciolo, *laplace_interpolator*. 2021. [Online]. Available: https://github.com/sfcaracciolo/laplace_interpolator
- [16] sfcaracciolo, *ecg_tools*. 2021. [Online]. Available: https://github.com/sfcaracciolo/ecg_tools
- [17] J. Chamorro-Servent, R. Dubois, and Y. Coudière, "Considering New Regularization Parameter-Choice Techniques for the Tikhonov Method to Improve the Accuracy of Electrocardiographic Imaging," *Front. Physiol.*, vol. 10, p. 273, 2019, doi: 10.3389/fphys.2019.00273.

11

Obtención de almidón de maíz entrecruzado con ácido cítrico

Cavallo, E.C.^{a, b, c}; Tupa Valencia, M.V.^{a, b, c}; Foresti, M.L.^{a, b}.

^{a.} *Grupo de Biotecnología y Materiales Biobasados, Instituto de Tecnología en Polímeros y Nanotecnología (ITPN-UBA-CONICET), Facultad de Ingeniería, Universidad de Buenos Aires, Las Heras 2214 (CP 1127AAR), Buenos Aires, Argentina.*

^{b.} *Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET).*

^{c.} *Departamento de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería, Universidad de Buenos Aires.*
eccavallo@fi.uba.ar

Resumen

La modificación química del almidón se usa generalmente para mejorar sus propiedades funcionales, principalmente para aplicaciones en la industria alimentaria. Entre los almidones modificados químicamente se encuentran aquellos entrecruzados, los cuales ofrecen una mayor estabilidad frente a altas temperaturas y medios ácidos. Los agentes entrecruzantes son reactivos bi- o polifuncionales que actúan como puentes intermoleculares entre las cadenas del polímero, siendo de especial interés aquellos de origen natural como es el ácido cítrico (AC). Este último se reconoce como un aditivo alimentario seguro (GRAS) y se utiliza ampliamente en las industrias alimentaria, cosmética y farmacéutica. Al contactar almidón y AC a temperaturas superiores a los 100°C, el ácido se convierte en su anhídrido y éste es capaz de formar enlaces éster intermoleculares con los grupos hidroxilo de las moléculas de almidón.

En este trabajo se utilizó una metodología semiseca para obtener almidones de maíz entrecruzados con AC para uso como aditivo alimentario, variando al efecto algunas condiciones de reacción según: concentración de AC (20 y 40%), temperatura de reacción (120 y 150°C) y tiempo de reacción (0 – 5 h). La caracterización de los productos evidenció la efectividad de la ruta para incorporar grupos citrato en el almidón. Por otro lado, los almidones modificados mostraron propiedades típicas de almidones entrecruzados -tales como poder de hinchamiento reducido, mayor resistencia a la acción de las enzimas amilolíticas y comportamiento de gelatinización alterado respecto del almidón nativo-, particularmente los almidones modificados obtenidos a 150°C.

Abstract

Chemical modification of starch is generally used to improve its functional properties, mainly for applications in the food industry. Among the chemically modified starches are cross-linked starches, which offer greater stability against high temperatures and acidic media.

Crosslinking agents are bi- or poly-functional reagents that act as intermolecular bridges between polymer chains, being of special interest those of natural origin such as citric acid (AC). The latter is a food additive generally recognized as a safe (GRAS) and it is widely used in the food, cosmetic and pharmaceutical industries. When contacting starch and AC at temperatures above 100°C, the acid becomes its anhydride, and it is capable of forming intermolecular ester bonds with the hydroxyl groups of starch molecules. In this contribution, a semi-dry methodology was used to obtain cross-linked corn starches for use as a food additive, varying some reaction conditions such as: AC concentration (20 and 40%), reaction temperature (120 and 150°C) and time (0 - 5 h). The products characterization showed the effectiveness of the route to incorporate citrate groups in the starch macromolecules. On the other hand, the modified starches showed typical properties of cross-linked starches -such as reduced swelling power, greater resistance to the action of amylolytic enzymes and altered gelatinization behavior with respect to native starch-, particularly the modified starches obtained at 150°C.

Palabras clave: Almidón de maíz, ácido cítrico, entrecruzamiento, caracterización funcional.

Introducción

El almidón es la principal reserva de energía y de carbono de las plantas, en las cuales se deposita en varios tipos de tejidos y órganos en forma de gránulos [1]. Dependiendo de su origen botánico, los gránulos de almidón pueden variar en forma, tamaño y composición. Los componentes principales del almidón -independientemente de la fuente botánica- son dos polisacáridos compuestos de residuos de glucosa unidos por enlaces glicosídicos α -1,4 y α -1,6: la amilosa y la amilopectina.

Debido a su carácter renovable, gran abundancia, biodegradabilidad en diversos ambientes, versatilidad y bajo costo, el almidón tiene numerosas aplicaciones en distintas áreas, tanto en la industria alimentaria como en otros campos [2]. Entre ellas, muchas aplicaciones del almidón requieren su modificación mediante métodos físicos, químicos o enzimáticos. Esto se debe a que el almidón nativo presenta ciertas características que pueden ser mejoradas dependiendo de las aplicaciones previstas, por ejemplo: baja resistencia mecánica, baja estabilidad ácida y térmica, alta tendencia a la retrogradación y sinéresis, insolubilidad en agua fría, tendencia de la viscosidad a aumentar rápidamente durante el tratamiento térmico y alta hidrofiliidad [2], [3]. Entre las modificaciones químicas del almidón se pueden mencionar reacciones de eterificación, esterificación, hidrólisis, oxidación y entrecruzamiento [3].

En particular, las reacciones de esterificación de almidones involucran la sustitución (total o parcial) de los grupos hidroxilos del polímero por grupos éster. La introducción de estos grupos causa un efecto estérico y la disrupción de enlaces de hidrógeno entre las macromoléculas que conforman el almidón; facilita el hinchamiento de los gránulos en agua; conduce a una disminución de la temperatura de gelatinización característica; previene la retrogradación y sinéresis de las pastas; y da lugar a un incremento en la claridad de los geles resultantes. Así, la esterificación de almidones amplía sus aplicaciones en diversas industrias [2].

Por otro lado, el entrecruzamiento (por esterificación o por eterificación de grupos hidroxilos) es otro tipo de modificación química ampliamente utilizada en almidones, en la cual suelen emplearse reactivos bi- o polifuncionales -tales como trimetafosfato de sodio, cloruro de fosforilo y mezclas de anhídridos de ácido mixtos acético/adípico-, que son capaces de formar enlaces intermoleculares entre grupos hidroxilo de las moléculas de almidón [3]. Producto del entrecruzamiento se generan almidones más estables y de mayor resistencia

al esfuerzo de corte, a las altas temperaturas y a pH ácidos, en comparación con el almidón nativo [4]. Estos efectos se encuentran asociados a la movilidad reducida de las cadenas de almidón como resultado de los puentes intermoleculares introducidos [5], que se traduce en general en almidones con menor poder de hinchamiento (PH) y mayores temperaturas de gelatinización. Además, los nuevos enlaces reducen la tendencia de los gránulos de almidón a solubilizarse y romperse [6]. Por este motivo, los almidones entrecruzados se utilizan como agentes espesantes en aplicaciones alimentarias y como cargas en usos no alimentarios que requieren estabilidad frente al hinchamiento, a las altas temperaturas, al cizallamiento y a condiciones ácidas.

En los últimos años, se ha propuesto el uso de ciertos ácidos policarboxílicos orgánicos como reactivos para entrecruzar almidón como una alternativa más segura y, a menudo, menos costosa para su uso en aplicaciones alimentarias [7]. Entre ellos, se ha propuesto el entrecruzamiento de almidón con ácido cítrico (AC) [8]-[10]. El AC es un ácido polifuncional, de origen natural y reconocido como un aditivo alimentario seguro (GRAS), por lo que se utiliza ampliamente no solo en la industria alimentaria, sino también en las industrias cosmética y farmacéutica. La reacción entre el almidón y el AC en principio podría dar como resultado mono-, di- y/o triésteres, aunque la probabilidad de la formación de triésteres en la práctica es dudosa [9], debido al impedimento estérico asociado. Los diésteres se forman intra- o intermolecularmente, estos últimos provocando un aumento del peso molecular del producto resultante. Se ha reportado que la reacción comienza con una esterificación simple, caracterizada por la formación de un aducto de citrato de almidón y, a medida que aumenta la temperatura del sistema, se logra el entrecruzamiento del polisacárido [9].

Los almidones químicamente modificados descriptos son reconocidos por sus beneficios nutricionales derivados de su mayor contenido de almidón resistente (AR) [3], [11]. El AR es definido como la porción de almidón que no puede ser hidrolizada por las enzimas digestivas en el intestino delgado y alcanza el intestino grueso de personas saludables. En el intestino grueso el AR es fermentado por la microflora local produciendo ácidos grasos de cadena corta (AGCC), predominantemente acetatos, propionatos y butiratos. Estos AGCCs son reconocidos por sus propiedades benéficas sobre el colon humano. El AR ha sido clasificado en 5 tipos: AR1: almidones físicamente inaccesibles (ej. granos, semillas); AR2: gránulos de almidón crudo (ej. banana verde y papa) y almidón de maíz con alto contenido de amilosa; AR3: almidón retrogradado; AR4: almidones modificados químicamente (ej. eterificados, esterificados o entrecruzados); y AR5: complejos lípido-amilosa. Particularmente, en los AR4, la resistencia a la hidrólisis enzimática se debe a cambios en la estructura del almidón con uniones atípicas que no son reconocidas por las enzimas, bloqueando su acceso [11]-[13].

En este trabajo se estudiaron distintas condiciones de reacción para producir almidones entrecruzados por una vía semiseca, utilizando como agente entrecruzante AC. En cada caso, se determinó el grado de sustitución (GS, número promedio de grupos hidroxilo sustituidos por unidad anhidroglucosa) de los almidones modificados y se los caracterizó en términos de estructura química, poder de hinchamiento, propiedades térmicas y resistencia a la hidrólisis enzimática.

Desarrollo

Materiales

Almidón de maíz nativo (Ingredion, Argentina), ácido cítrico (99% Biopack). Los reactivos usados en la saponificación (HCl, NaOH) fueron de grado analítico. Para la determinación del contenido de AR se empleó un Kit de ensayo enzimático adquirido en Megazyme (Granotec, Argentina).

Obtención de almidones modificados con ac

La metodología empleada para la modificación de almidones se realizó adaptando el método semiseco de [8], estudiando como variables: la concentración de AC (20, 40% - porcentajes máxicos en base seca respecto del almidón), el tiempo (0, 1, 3, 5 h) y la temperatura de reacción (120 y 150°C). A tal fin se pusieron en contacto en placas de Petri almidón de maíz nativo (AN) con las soluciones de AC correspondientes preparadas previamente, en proporciones 1:1 p/v. Se mezclaron los sistemas hasta homogeneidad y se los dejó reposar 24 h a temperatura ambiente. Finalizado ese tiempo, se llevaron a estufa a 60°C por 16 h para inducir la deshidratación del AC y la formación del anhídrido. Se dejó reposar los sistemas a temperatura ambiente hasta molienda (10 min). Las mezclas se colocaron a 120°C y 150°C durante el tiempo de estudio estipulado, y fueron luego lavadas con agua destilada y con etanol. Por último, los sistemas (AM, almidones modificados) se dejaron secar a 40°C *overnight* y se realizó una última molienda con molinillo (Arcano) durante 40 segundos. Como controles (0 h) se emplearon muestras preparadas según lo descrito, pero sin la etapa de tratamiento térmico a 120°C/150°C. Todas las muestras se prepararon por duplicado.

Caracterización de los almidones modificados

La determinación del grado de sustitución (GS) se realizó por saponificación, tal como se detalla en [11]. Adicionalmente, la introducción de grupos funcionales asociados a la modificación química implementada se determinó cualitativamente por Espectroscopía de Infrarrojo por Transformada de Fourier (FTIR), a partir de la presencia de absorbancias propias del grupo C=O del citrato a $\approx 1750 \text{ cm}^{-1}$ [14].

El poder de hinchamiento (PH) de los AN y AM se determinó siguiendo la metodología descrita en [15]. Para ello, se prepararon suspensiones de almidón en agua al 1% que fueron colocadas en tubos de centrifuga con tapa y se calentaron a 60°C en baño con temperatura controlada durante 30 min, agitando las muestras manualmente cada 5 min. Al finalizar este tiempo, los tubos fueron enfriados rápidamente y las muestras se centrifugaron a 3000 rpm durante 15 min. Se separó el sobrenadante y se pesó el precipitado. El PH se calculó como la relación de masas entre el almidón insoluble hidratado (sin secar) y la masa de almidón inicial (seco).

Las propiedades térmicas de los almidones se analizaron mediante calorimetría diferencial de barrido (DSC) y análisis termogravimétrico (TGA) según se detalla a continuación. El estudio de la gelatinización de los almidones se realizó en un calorímetro diferencial de barrido Shimadzu DSC-60. Para ello, se pesaron ≈ 2.4 mg de muestra seca en una cápsula de aluminio tarada y se agregó agua en proporción 1:3 (p/v de almidón/agua). La cápsula fue cerrada herméticamente en prensa y se mantuvo a temperatura ambiente por un lapso de 1 h para garantizar la hidratación uniforme del almidón. El análisis de DSC se realizó de 25 a 120°C, a 10°C/min y bajo flujo de nitrógeno de 30 mL/min. A partir de los termogramas, se calcularon las temperaturas (inicial "T_o", pico "T_p" y final "T_f") y la entalpía (ΔH) de gelatinización. Cada muestra se ensayó por duplicado. El análisis termogravimétrico fue llevado a cabo en un instrumento TGA-50 de Shimadzu. Aproximadamente 6 mg de las muestras secas (105°C) fueron analizadas en el intervalo de 25 a 650°C a una velocidad de 10 °C/min, bajo atmósfera de nitrógeno (30 ml/min).

Por último, se determinó el contenido de AR utilizando un kit enzimático comercial (Megazyme). Las muestras (100 mg) se colocaron en tubos Falcon de 15 mL con 4 mL de la solución de enzimas (α amilasa pancreática y amiloglucosidasa), y se ubicaron tapados horizontalmente en un baño termostatzado (Arcano) a 37°C con agitación continua a 100 rpm/min por 18 h. La hidrólisis enzimática fue detenida agregando 4 mL de etanol frío,

recuperándose luego el AR por centrifugación a 3000 rpm por 10-12 minutos (Tyfon II, Zelian). El precipitado se lavó dos veces con etanol 50% seguido de centrifugación a 3000 rpm por 10 min, y se secó a 45°C hasta peso constante.

Resultados y discusión

El método implementado permitió introducir grupos citrato en el almidón de maíz utilizado, con valores de GS en el rango de ≈ 0.08 a ≈ 0.24 . En la **Figura 1** se ilustra la evolución del GS de los almidones modificados con AC en función del tiempo de reacción, teniendo en cuenta ambas temperaturas y ambas concentraciones del ácido estudiadas. En líneas generales, el nivel de sustitución aumentó con el tiempo de reacción, con valores que dependieron de la temperatura y concentración de AC de la solución utilizada. Este resultado concuerda con lo reportado por otros autores [8], [10], [13]. Por su parte, las muestras control (0 h, con 20 y 40% AC, sin tratamiento térmico a 120/150°C), registraron valores de GS = 0.00.

En cuanto al efecto de la concentración de AC con la que se contactaron los almidones, se observó que el uso de soluciones al 40% permitió obtener mayor nivel de sustitución que al 20%, en concordancia con lo observado en la literatura [8], [10], [13]. Por último, se observó un efecto importante de la temperatura de estudio a bajos tiempos de reacción, donde los tratamientos a 150°C permitieron obtener valores de GS muy superiores a los alcanzados a 120°C, similar a lo reportado previamente [8]. En cambio, los valores de GS medidos a 5 h de reacción no mostraron diferencias significativas con respecto a la temperatura de tratamiento.

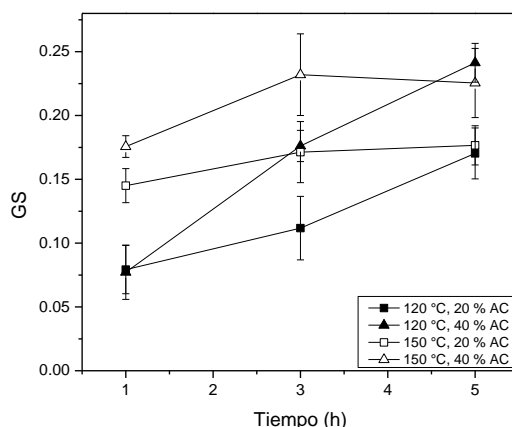


Figura 1: Efecto del porcentaje de AC (20 y 40%), de la temperatura (120 y 150°C) y del tiempo reacción (0 – 5 h) sobre el GS alcanzado.

En la **Figura 2** se presentan los resultados del poder de hinchamiento (PH) del AN y de los AM obtenidos bajo todas las condiciones de reacción evaluadas. El PH refleja la capacidad de hidratación de los gránulos de almidón en agua. Como se observa en la **Figura 2**, el valor de PH del AN a 60°C fue de 3.1 g/g, concordante con lo reportado por otros autores para el almidón de maíz nativo, en condiciones similares de ensayo [15].

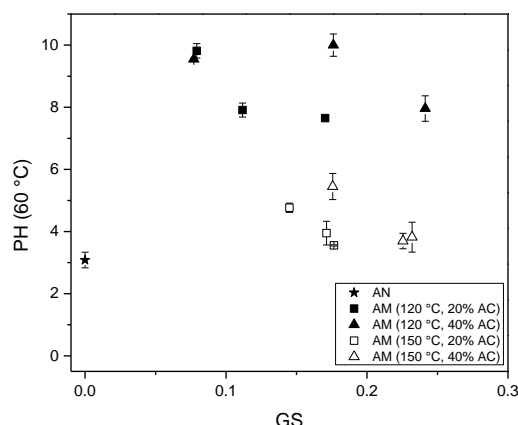


Figura 2: Poder de hinchamiento de los gránulos de almidón nativo (AN) y modificados con AC (AM) (20 y 40%), a 120 (■ y ▲) y 150°C (□ y △), 0 – 5 h de reacción.

Por su parte, los AM evidenciaron dos patrones de PH muy marcados, según la temperatura de reacción a la que se obtuvieron. Los AM preparados a 150°C presentaron valores de PH moderadamente superiores (3.6 – 5.5 g/g) al PH del almidón sin modificar (3.1 g/g); mientras que los AM obtenidos a 120°C presentaron valores de PH muy superiores (7.6 – 10.0 g/g) al determinado para la contraparte nativa (3.1 g/g). Este resultado indica que, sobre todo en el caso de los AM obtenidos a 120°C, la capacidad de hidratación del almidón mejoró significativamente luego del tratamiento químico. Por otro lado, la diferencia observada en la capacidad de hidratación del agua de los gránulos de AM obtenidos a 120 y 150°C para valores de GS similares, sugiere que los grupos éster introducidos en cada caso dieron lugar a estructuras químicas diferentes. Debido a que la hidratación y el hinchamiento de los gránulos de almidón son etapas fundamentales en el proceso de gelatinización durante su calentamiento en agua, la distinta capacidad de hidratación de los AM obtenidos a 120 y 150°C también se manifestó en su comportamiento de gelatinización (**Tabla 1**).

Tabla 1. Temperaturas de inicio, de pico y final (T_o , T_p y T_f) y entalpía de gelatinización (ΔH) del almidón nativo (AN) y almidones modificados con AC (AM).

Muestra	T_o (°C)	T_p (°C)	T_f (°C)	ΔH (J/g)
AN	66.7	71.1	75.3	7.7
AM (150°C)	No gelatinizan	No gelatinizan	No gelatinizan	No gelatinizan
AM (120°C)	52.6 - 56.7	60.5 - 61.8	67.6 - 74.8	1.9 - 5.9

La gelatinización del AN comenzó a los 66.7°C y finalizó a los 75.3°C, con una entalpía asociada de 7.7 J/g (**Tabla 1**). Sin embargo, en los termogramas de los AM obtenidos a 150°C, no se evidenció el pico endotérmico asociado a la gelatinización de los gránulos. Resultados similares fueron reportados en otras contribuciones sobre almidones modificados con AC obtenidos en condiciones de reacción de alta temperatura y

concentración del ácido, y largos tiempos de reacción [8], [10]. Dicha observación se ha atribuido al entrecruzamiento de las cadenas de almidón que restringe su movilidad molecular, previniendo la absorción de agua y, en consecuencia, disminuyendo el hinchamiento de los gránulos y dificultando la gelatinización del polímero entrecruzado [4], [10].

Por el contrario, en el caso de las muestras preparadas a 120°C, éstas sí presentaron el pico endotérmico de gelatinización, comenzando entre los 52.6 a 56.7°C; es decir, 10 a 14°C por debajo de los valores medidos para el AN; y finalizando entre los 67.6 y 74.8°C. Asimismo, se requirieron menores entalpías (entre 1.9 y 5.9 J/g) respecto del AN (7.7 J/g) para llevar a cabo el proceso. Estos resultados concuerdan con lo observado para almidones esterificados con GS de grado alimentario (ej. acetilación), en los que se observó que la esterificación (simple) del almidón redujo los parámetros térmicos de gelatinización respecto del AN [17]. Lo anterior se atribuye a que la introducción de grupos éster produce un efecto estérico y la disrupción de los enlaces de hidrógeno, conduciendo a una desorganización estructural intragranular y facilitando, de esta manera, el ingreso de agua a las regiones amorfas del polímero. Esto favorece el hinchamiento de los gránulos en medio acuoso acompañado por la solubilización de sus constituyentes cuando el almidón es calentado en exceso de agua [17].

La gelatinización de los almidones obtenidos a 120°C a menores temperaturas y con menor energía involucrada en comparación al AN, sumado al incremento significativo de los valores de PH, sugiere que en estos almidones la modificación predominante habría sido la monoesterificación del AC, no habiendo prevalecido las reacciones de entrecruzamiento buscadas. En cambio, bajo las condiciones de reacción evaluadas, los resultados obtenidos para los AM preparados a 150°C indican que en estos almidones sí habría predominado la formación de ésteres intermoleculares, es decir, el entrecruzamiento buscado.

Por otro lado, se determinó el contenido de AR para los almidones nativo y modificados (**Figura 3**). La caracterización de los productos evidenció la efectividad de la metodología para producir almidones con contenido de AR superiores al del AN. Dicho incremento se encuentra asociado a un ataque estéricamente impedido de las enzimas digestivas causado por la presencia de los sustituyentes introducidos, al restringir éstos la formación del complejo enzima-sustrato y haciendo así que los enlaces vecinos sean resistentes a la degradación enzimática [13]. Estos resultados coinciden con otros reportes donde también se observó un aumento considerable del contenido de AR por modificación química con AC [8], [13].

Asimismo, se pudo observar nuevamente un efecto diferencial de la temperatura de reacción empleada para la modificación del almidón, en este caso, sobre el contenido de AR alcanzado (**Figura 3**). En general, y si bien el rango de GS medido estuvo en un rango similar (<0.25), el contenido de AR de los AM preparados a 150°C fue muy superior al obtenido a 120°C. Por ejemplo, los contenidos máximos de AR fueron de 100 y 40%, respectivamente, y correspondieron a valores de GS similares ($GS \approx 0.23$) obtenidos a las dos temperaturas de trabajo. Además, los máximos valores de AR logrados a 150°C con 40% de AC ($AR \approx 100\%$) se obtuvieron a las 3 h de reacción, mientras que el máximo contenido de AR a 120°C con 40% de AC ($AR \approx 40\%$) se logró recién al cabo de 5 h de reacción. El hecho de que muestras con GS similar obtenidas a 120°C y 150°C tengan contenidos de AR significativamente diferentes se ilustra con otro ejemplo en la línea de puntos marcada en la **Figura 3** ($GS \approx 0.18$); sugiriendo una vez más que el tipo de uniones establecidas entre las macromoléculas que conforman el almidón y el AC en los AM fueron diferentes según la temperatura de trabajo.

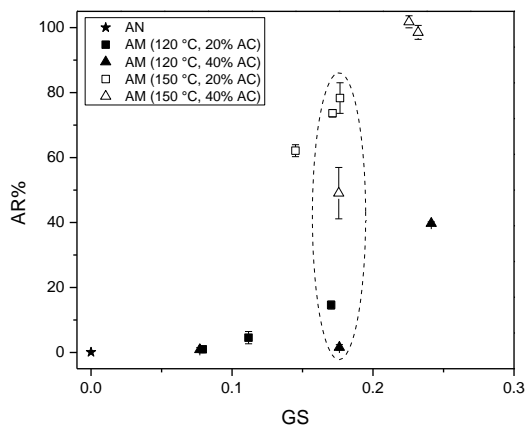


Figura 3: Contenido de AR (%) para el almidón nativo (AN) y los almidones modificados con AC (AM) (20 y 40%), a 120 (■ y ▲) y 150°C (□ y △), 0 – 5 h de reacción.

En el marco de los resultados de PH y propiedades de gelatinización de los AM ya descritos, este aumento considerable del contenido de AR en muestras con el mismo nivel de modificación preparadas a 150°C respecto de las obtenidas a 120°C, resulta también consistente con las reacciones de entrecruzamiento del almidón que habrían prevalecido a 150°C, y que añadirían una resistencia adicional a la que proviene de las limitaciones estéricas introducidas por la presencia de grupos éster unidos por un único extremo a las moléculas de almidón (caso de AM obtenidos a 120°C). En almidones entrecruzados, la presencia de cadenas poliméricas entrecruzadas inhibe el hinchamiento granular y proporciona un obstáculo estérico al acercamiento del sitio activo por parte de las enzimas amilasas [18]. En este sentido, el hinchamiento de los gránulos en los almidones obtenidos a 150°C fue significativamente menor que el de los AM a 120°C (Figura 2). Además, el entrecruzamiento del almidón puede restringir el movimiento de las enzimas a través de los poros y canales de la superficie del gránulo [11]. Resultados similares en términos de resistencia extra a la digestión introducida por reacciones de entrecruzamiento se han reportado en la evaluación de un almidón doblemente modificado (esterificado y entrecruzado), respecto de un almidón meramente esterificado [11].

Por último, se realizó el análisis termogravimétrico de los AM obtenidos a 150°C, con el fin de estudiar el impacto del entrecruzamiento en su patrón de descomposición. Los datos se presentan en la Figura 4 en términos de la primera derivada de las señales de TG (dTG) normalizada respecto de la masa inicial de la muestra. En todos los casos, las T_{max} de los AM estuvieron por encima de los 280°C. Estas temperaturas resultaron satisfactorias considerando posibles aplicaciones en el campo de la industria alimentaria.

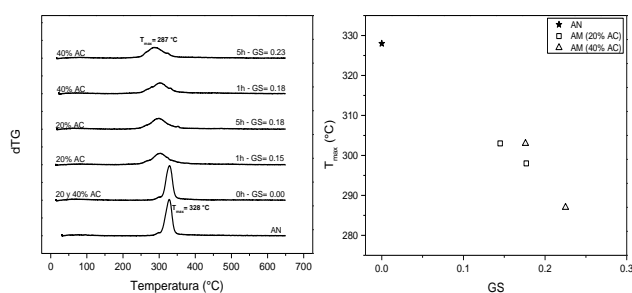


Figura 4: Curvas de dTG (izquierda) y T_{max} en función del GS (derecha) de almidones nativo (AN) y entrecruzados con AC (AM) (20 y 40%) a 150°C, 0 – 5 h de reacción.

En un análisis más detallado, los valores de T_{max} de los AM obtenidos a 150°C disminuyeron gradualmente en función del nivel de sustitución, alcanzando un valor $\approx 40^\circ\text{C}$ menor que la T_{max} del AN (desde 328 hasta 287°C). Si bien se ha reportado que luego del entrecruzamiento se mejora la estabilidad térmica de los almidones [19], la disminución observada en la presente contribución puede ser atribuida a una hidrólisis del almidón por parte del AC. Dicha hidrólisis puede ocurrir en paralelo a las reacciones de entrecruzamiento con AC en condiciones de elevada temperatura, bajos pH (<4) y con elevadas concentraciones de AC [9], [20].

Conclusiones

Los resultados obtenidos en este trabajo mostraron que el tiempo, la temperatura de reacción y la concentración de AC son variables adecuadas para regular el GS y el AR de los almidones modificados obtenidos por tratamiento de almidón de maíz con AC, empleando una metodología semiseca. Por otro lado, para la obtención de almidones entrecruzados la temperatura elegida resultó el factor determinante. En este sentido, y si bien en ambos casos se obtuvieron almidones modificados con valores de GS hasta ≈ 0.23 , los AM obtenidos a 150°C mostraron valores de PH reducido, no gelatinizaron, y exhibieron contenidos de AR elevados (hasta 100%), comportamiento típico de almidones entrecruzados. Por otro lado, en el caso de los almidones tratados a 120°C, estos presentaron características compatibles con monoesterificación.

Teniendo en cuenta lo anterior, se concluye que para obtener almidones entrecruzados con AC se puede trabajar a 150°C, empleando una solución de AC de entre 20 y 40% y durante tiempos de reacción de entre 1 y 3 h.

Agradecimientos

PICT 2016-0843

Referencias

- [1] Preiss J. (2018). En M. Sjöo & L. Nilsson (Ed.), *Starch in Food: Structure, Function and Applications* (pp. 3-95). Woodhead Publishing Elsevier, Duxford.
- [2] Ai Y.; Jane J.L. (2018). En M. Sjöo & L. Nilsson (Ed.), *Starch in Food: Structure, Function and Applications* (pp. 151-158). Woodhead Publishing Elsevier, Duxford.
- [3] Chen, Y. F., Kaur, L., & Singh, J. (2018). En *Starch in food* (pp. 283-321). Woodhead Publishing Elsevier, Duxford.
- [4] Shah, N.; Mewada, R. K.; Mehta, T. (2016). Crosslinking of starch and its effect on viscosity behaviour. *Reviews in Chemical Engineering*, 32(2), 265-270.
- [5] Chung, H.J.; Woo, K.S.; Lim, S.T. (2004). Glass transition and enthalpy relaxation of cross-linked corn starches. *Carbohydrate polymers*, 55(1), 9-15.
- [6] Guarás, M.P.; Ludueña, L. N.; Álvarez, V.A. (2017). En E. Barbosa, M. A. García, L. Castillo, O. V. López (Ed.), *Starch-Based Materials in Food Packaging: Processing, Characterization and Applications* (Ch. 4). Academic Press, Cambridge.

- [7] Sharma, L.; Sharma, H.K.; Saini, C.S. (2018). Edible films developed from carboxylic acid cross-linked sesame protein isolate: barrier, mechanical, thermal, crystalline and morphological properties. *Journal of food science and technology*, 55(2), 532-539.
- [8] Xie, X.; Liu, Q. (2004). Development and physicochemical characterization of new resistant citrate starch from different corn starches. *Starch-Stärke*, 56(8), 364-370.
- [9] Menzel, C.; Olsson, E.; Plivelic, T.S.; Andersson, R.; Johansson, C.; Kuktaite, R.; ... & Koch, K. (2013). Molecular structure of citric acid cross-linked starch films. *Carbohydrate polymers*, 96(1), 270-276.
- [10] Kim, J.Y.; Lee, Y.K.; Chang, Y.H. (2017). Structure and digestibility properties of resistant rice starch cross-linked with citric acid. *International journal of food properties*, 20, 2166-2177.
- [11] Tupa, M.V.; Altuna, L.; Herrera, M.L.; Foresti, M.L. (2020). Preparation and Characterization of Modified Starches Obtained in Acetic Anhydride/Tartaric Acid Medium. *Starch-Stärke*, 72(5-6), 1900300.
- [12] Zhang, H.; Jin, Z. (2011). Preparation of products rich in resistant starch from maize starch by an enzymatic method. *Carbohydrate polymers*, 86(4), 1610-1614.
- [13] Remya, R.; Jyothi, A.N.; Sreekumar, J. (2018). Effect of chemical modification with citric acid on the physicochemical properties and resistant starch formation in different starches. *Carbohydrate polymers*, 202, 29-38.
- [14] Tupa Valencia, M.V.; Cavallo, E.C.; Rossi, E.; Errea, M.I.; Foresti, M.L. (2021). Producción de almidones resistentes por modificación con ácido cítrico. *XVI Simposio Argentino de Polímeros*.
- [15] Garg, S., Jana, A.K. (2011). Characterization and evaluation of acylated starch with different acyl groups and degrees of substitution. *Carbohydrate Polymers*, 83, 1623– 1630.
- [16] Tupa Valencia, M.V. (2015) *Desarrollo de una metodología sostenible de síntesis de almidones acetilados*. Universidad de Buenos Aires. Argentina.
- [17] Han, F.; Liu, M.; Gong, H.; Lü, S.; Ni, B.; Zhang, B. (2012). Synthesis, characterization and functional properties of low substituted acetylated corn starch. *International Journal of Biological Macromolecules*, 50, 1026–1034.
- [18] Shi, Y. C., & Maningat, C. C. (Eds.). (2013). *Resistant starch: sources, applications and health benefits* (pp. 43-78). John Wiley & Sons. USA
- [19] Chen, W.C.; Judah, S.N.; Ghazali, S.K.; Munthoub, D.I.; Alias, H.; Mohamad, Z.; Abd Majid, R. (2021). The Effects of Citric Acid on Thermal and Mechanical Properties of Crosslinked Starch Film. *Chemical Engineering Transactions*, 83, 199-204.
- [20] Hung, P.V.; Vien, N.L.; Phi, N.T.L. (2016). Resistant starch improvement of rice starches under a combination of acid and heat-moisture treatments. *Food Chemistry*, 191, 67–73.

12

Determinación de biomarcadores cerebrales basados en neuroimágenes para la predicción de la efectividad de tratamientos con psilocibina

Copa, D.P. ^a; Zanutto, S.B ^a; Tagliazucchi, E.R. ^b

^a Instituto de Bioingeniería (IIBM), Facultad de Ingeniería, Universidad de Buenos Aires

^b Instituto de Física de Buenos Aires, Universidad de Buenos Aires y (IFIBA – CONICET)
dcopa@fi.uba.ar

Resumen

En los últimos años se han reportado numerosos estudios sobre terapias novedosas para pacientes con depresión resistente al tratamiento (TRD), entre otros trastornos, mediante el suministro de sustancias como la psilocibina. Sin embargo, debido a que se trata de terapias experimentales, resulta de gran utilidad desarrollar técnicas que permitan predecir la efectividad de estos tratamientos en cada paciente y establecer así un pronóstico adecuado antes de su aplicación. Una forma de abordar este problema es mediante el uso de modelos de aprendizaje automático utilizando biomarcadores predictivos a partir de neuroimágenes de resonancia magnética funcional (fMRI). Bajo este marco, el trabajo está centrado en identificar los biomarcadores de mayor poder predictivo conformados por los patrones cerebrales de conectividades funcionales (FC) para el problema de clasificar los respondedores de los no respondedores hasta varias semanas posteriores al tratamiento. Para obtener las FC, se utilizaron registros en estado basal y en reposo de la actividad cerebral medidos con fMRI antes del tratamiento con psilocibina para una muestra de 16 sujetos con TRD. El modelo de aprendizaje automático utilizado está basado en árboles de decisión que emplean las FC con reducción de dimensionalidad como patrones de entrada y cuestionarios post tratamiento para el entrenamiento del modelo. Este estudio se puede considerar un primer paso para el entendimiento de los mecanismos cerebrales subyacentes en el tratamiento con psilocibina aplicado a sujetos con TRD. En este sentido, el análisis de los resultados reveló algunas características predictivas comunes a otros tratamientos antidepresivos tanto farmacológicos como no farmacológicos.

Abstract

In recent years, many studies have been reported on novel therapies for patients with treatment-resistant depression (TRD), among other disorders, using substances such as psilocybin. However, because such therapies are experimental, it is very useful to develop techniques to predict the efficacy of these treatments in each patient and thus establish an adequate prognosis prior to their application. One way to address this problem is through the use of machine learning models using predictive biomarkers based on functional

magnetic resonance neuroimaging (fMRI). In this framework, the work is focused on identifying the biomarkers with the highest predictive power comprised of brain patterns of functional connectivities (FC) for the problem of classifying responders from non- responders up to several weeks post-treatment. To obtain the FC, baseline recordings of resting-state brain activity measured with fMRI prior to psilocybin treatment were used for a sample of 16 subjects with TRD. The machine learning model used is based on decision trees using dimensionality-reduced CFs as input patterns and post-processing questionnaires for model training. This study can be considered a first step towards the understanding of the brain mechanisms underlying psilocybin treatment applied to subjects with TRD. In this sense, the analysis of the results revealed some predictive features common to other antidepressant treatments, both pharmacological and non- pharmacological.

Palabras clave: Modelado predictivo, Neuroimágenes, Conectividad Funcional en estado de reposo, Depresión resistente al tratamiento

Introducción

La depresión es un trastorno psiquiátrico que afecta la calidad de vida de una gran parte de la población mundial, representando una condición grave para la salud pública. Los síntomas generales del trastorno depresivo se pueden caracterizar por una profunda tristeza que no permite un desarrollo normal de las actividades cotidianas, entre los que se pueden mencionar: alteraciones del sueño, trastornos del apetito, cambios en los niveles de energía y cognición, entre otros [1]. Los factores desencadenantes que inciden en el desarrollo de la enfermedad pueden ser: genéticos, biológicos, ambientales y por cambios psicológicos. Dentro del conjunto de diagnósticos clasificados según los síntomas se encuentra el Trastorno de Depresión Mayor (TDM). Algunos de los tratamientos que se aplican habitualmente en estos casos son: psicoterapias, medicamentos antidepressivos o combinaciones de ambos. Sin embargo, muchas veces los tratamientos convencionales pueden generar un deterioro excesivo en la calidad de vida del paciente, teniendo en cuenta los largos periodos de tiempo que requieren y sus efectos secundarios asociados, en particular para los trastornos depresivos resistentes al tratamiento (TRD, Treatment Resistant Depressive Disorder) [2]. En esos casos, alguno de los métodos que pueden explorarse como tratamientos menos convencionales son: terapias electroconvulsivas, estimulación magnética transcraneal repetitiva, estimulación del nervio vago y otros nuevos tratamientos de tipo farmacológicos, como es el caso de la *esketamina* (análogo de la *ketamina*), un fármaco disociativo glutamatérgico que posee rápidos efectos antidepressivos [3]. Uno de los tratamientos prometedores a ser utilizado en los casos de TRD se basa en la psilocibina [4]. Una de las características de esta sustancia es que provoca profundos cambios en la conciencia a través de un agonismo parcial en los receptores de serotonina 5-HT_{2A} [5]. Si se aplica este tratamiento con apoyo psicológico y en un contexto clínicamente controlado, la psilocibina es al menos tan efectiva como el escitalopram (un inhibidor selectivo de la recaptación de serotonina, ISRS) para el tratamiento de la depresión [6]. En este sentido, resulta de gran importancia poder predecir el resultado de este tipo de tratamientos antes de ser aplicado a pacientes depresivos, ya que esto permitiría evitar múltiples retrasos y frustraciones debidos a intervenciones ineficaces o mal toleradas. Además, estos mismos estudios permitirían obtener información acerca de las causas neurobiológicas de los diferentes subtipos de depresión [7], algo especialmente relevante en el caso de tratamientos experimentales. Una forma de abordar este problema es utilizando registros de neuroimágenes de resonancia magnética funcional (fMRI) para medir la actividad cerebral en estado de reposo previo al tratamiento. A partir de este tipo de datos, puede construirse un modelo predictivo de la respuesta a tratamientos con psilocibina utilizando como marcadores neurobiológicos a las conectividades funcionales (FC). De esta

forma, pueden aplicarse estos *features* como entradas de los algoritmos de aprendizaje automático para la separación entre respondedores y no respondedores. En este sentido, el trabajo está centrado en identificar cuáles de estos biomarcadores se comportan como buenos predictores para el clasificador.

Materiales y métodos

Diseño del experimento

Los datos de fMRI reportados en este estudio son parte de un ensayo clínico abierto de psilocibina para TRD previamente publicado [4]. La investigación fue patrocinada por el Imperial College (Reino Unido) y el ensayo aprobado por el comité del National Research Ethics Service (NRES) (Reino Unido). El mismo además se realizó de acuerdo con la declaración revisada de Helsinki (2000), el comité internacional de Buenas Prácticas Clínicas (BPC) y el National Health Service (NHS) Research Governance Framework (Reino Unido).

La Figura 1 presenta un resumen del diseño experimental para un estudio longitudinal, en el que participaron 16 sujetos con TRD. En primer lugar, estos pacientes se sometieron a una sesión de fMRI, encontrándose todos en estado basal y de reposo. Posteriormente se aplicó el tratamiento mediante el suministro de dos dosis de psilocibina aplicadas con una semana de diferencia (para más detalles clínicos ver [4]). Para el seguimiento de cada uno de los casos se realizaron un conjunto de Cuestionarios Breves de Sintomatología Depresiva (QIDS-SR16) en diferentes puntos temporales (semanas), tanto en estado basal, QIDS_{BL} (previo a la primera dosis), como posteriores a la segunda dosis, QIDS_k (k: número de semana). Así, se extrajo el etiquetado de las clases que indican los estados de remisión, identificando los respondedores y no respondedores mediante la binarización de los índices del cuestionario [8].

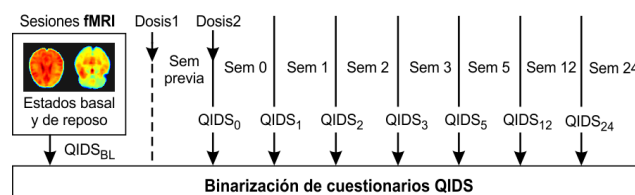


Figura 1: Diseño del experimento y seguimiento.

Registros fMRI

Los datos de fMRI fueron preprocesados y luego convertidos al espacio NMI-152 (Montreal Neurosciences Institute, 152 promedios) con una resolución espacial de 2 mm por voxel. Estos registros se ordenaron en una estructura NIfTi (Neuroimaging Informatics Technology Initiative), y se importaron mediante la biblioteca NIfTI de Matlab. La imagen de datos resultante para los registros disponibles de cada paciente (ej: Figura 2) posee dimensiones 91x109x91x237 (matriz cúbica de 237 muestras de tiempo).

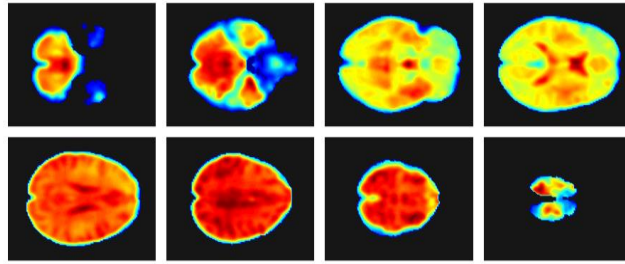


Figura 2: Algunos cortes axiales de las señales fMRI para el sujeto S1 en una muestra temporal de $n=60$.

Conectividades funcionales

Para reducir la dimensionalidad de los datos se parcelaron los volúmenes de fMRI utilizando un atlas de 401 regiones de interés (ROI, Region of Interest), cubriendo la materia gris cortical y subcortical, Figura 3. Este atlas se obtuvo como una subparcelación del atlas AAL (Automated Anatomical Labeling) [9] (excluyendo cerebelo y vermis).

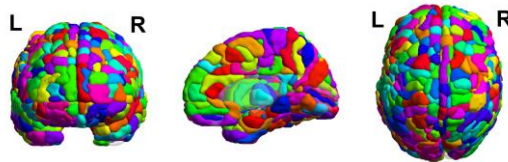


Figura 3: Atlas con parcelaciones de 401 ROIs.

Se procesaron las señales BOLD del registro fMRI de cada uno de los sujetos participantes con el fin de computar 401 series temporales, $s_i(n)$ con $i = 1, \dots, 401$, representantes de cada ROI (promedio de voxels contenidos). Las FC se obtuvieron mediante la correlación de Pearson entre las series temporales, $\rho_{ij} = \text{corr}[s_i(n), s_j(n)]$. De esta forma, se utilizaron las correlaciones $[\rho_{ij}]$ como elementos de la matriz de conectividades (de 401×401), Figura 4, para los 16 sujetos que participaron del experimento (S1, S2, ..., S16).

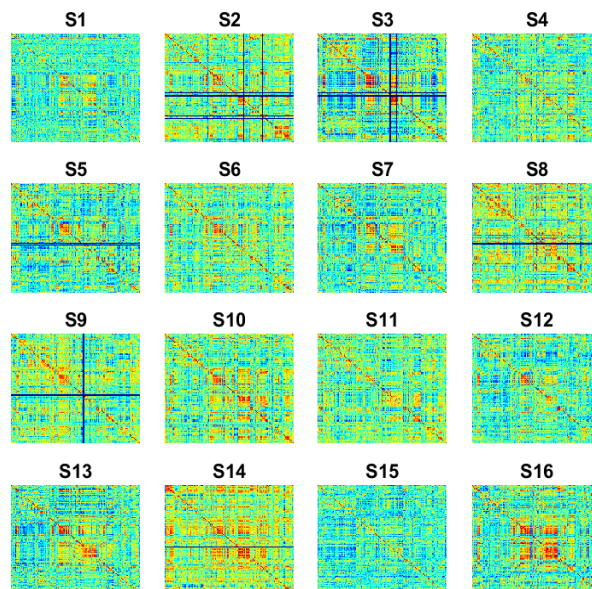


Figura 4: Matrices de correlación (FCs) para los sujetos S1, S2,..., S16. Algunas ROIs fueron eliminadas debido a registros de fMRI defectuosos.

Reducción de features

Teniendo en cuenta que las FC contienen un número muy elevado de elementos debido a su alta dimensión ($401 \times 401 = 160801$, incluyendo los elementos repetidos), el modelo predictivo puede llegar a ser poco fiable si se tiene en cuenta además un número limitado de participantes (16 sujetos). Para mitigar este problema, resulta imprescindible disminuir de forma significativa la dimensionalidad de las FC que actuarán como biomarcadores, seleccionando sólo aquellas que posean mayor poder predictivo. En este sentido, dado que una de las hipótesis asumida es que el estado de reposo en la condición basal puede dar información predictiva sobre la respuesta al tratamiento con psilocibina, se decidió reducir el conjunto de las FC, seleccionando únicamente aquellas relacionadas con las redes de estado de reposo (RSN, Resting State Networks) [10], entre ellas: red visual primaria (PV), red visual extraestriada (ESV), red auditiva (AUD), red de modo por defecto (DMN), red sensoriomotora (SMN), red de control ejecutivo (EXC) y red salience (SAL). Como caso particular, en este trabajo se analiza la respuesta para la red ESV, Figura 5, con la que se obtuvieron algunos de los resultados más relevantes. De esta forma, la cantidad total de elementos del espacio de las FC se limita solo a las conectividades entre ROIs pertenecientes a la red ESV y el resto del atlas cerebral utilizado.



Figura 5: Vistas anatómicas del área cerebral abarcada por la red Visual Extraestriada en estado de reposo.

Modelo predictivo

Se utilizó el modelo *Gradient Boosting* de clasificación binaria [11] (implementado mediante la biblioteca *scikit-learn* [12]) cuyas entradas se corresponden con las FC asociadas a la red ESV. En la Figura 6 puede verse todo el proceso completo. Por otra parte, el etiquetado de las clases binarias, extraídos de los cuestionarios QIDS (respondedores y no respondedores), se utilizaron para el entrenamiento del modelo.

Teniendo en cuenta que en el experimento se dispone de una baja cantidad de muestras, se implementó un esquema de validación cruzada (CV) en *5-fold* para entrenar y validar el modelo. Cada *fold* se obtuvo de particiones aleatorias de los datos manteniendo las clases equilibradas, utilizando una parte para prueba y cuatro para entrenamiento. Adicionalmente, se aplicó un paso de selección de los *K* mejores *features* (mejor selección basada en un *F-test*), lo que permitió reducir aún más la dimensión de los datos ingresados al modelo. El desempeño fue evaluado mediante el área bajo la curva ROC (AUC). Para medir la significancia, se repitieron 1000 CVs con permutaciones aleatorias (*random permutation test*), obteniendo de esta manera las métricas con mezcla de clases (AUC-Shuffle) y sin mezcla (AUC) a partir de las cuales se calculó el valor *p*.

Métrica de Importancias

Dado que el objetivo central de este trabajo es determinar una preselección de biomarcadores con mayor poder de predicción, se propuso una métrica para las FC que indicara la importancia que posee cada una en la predicción. Teniendo en cuenta que el

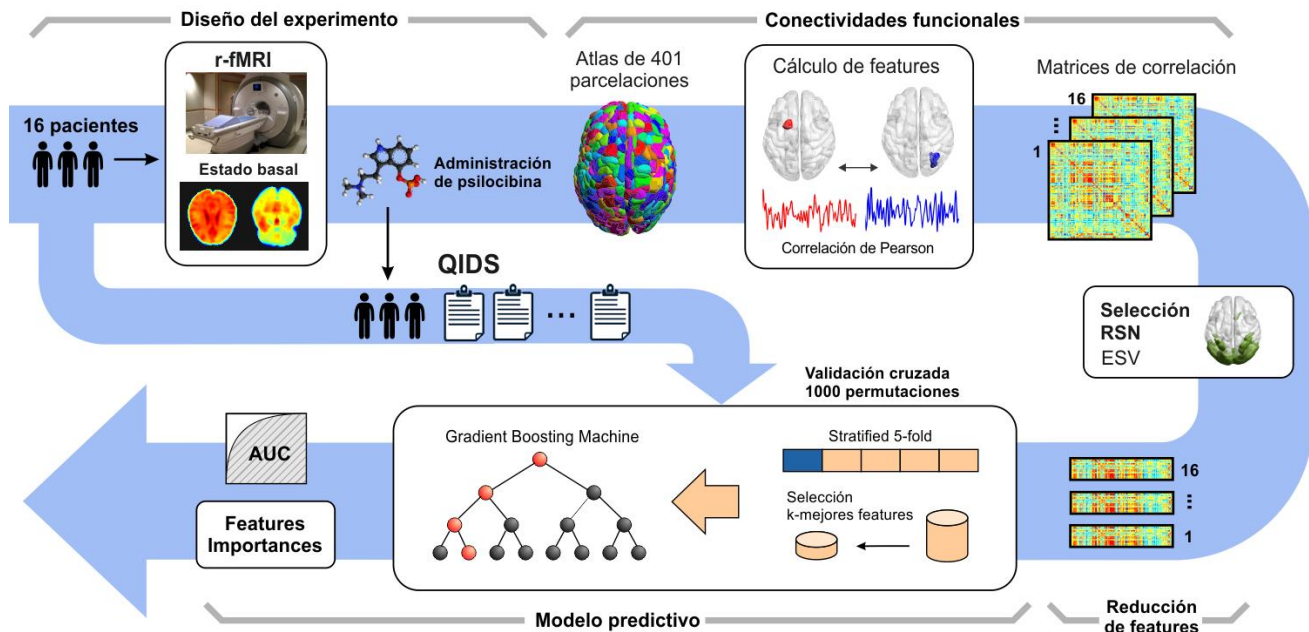


Figura 6: Esquema general de la metodología aplicada.

modelo utilizado está basado en árboles de decisión, del mismo se pueden extraer puntajes de la importancia que tiene cada *feature* según el grado de discriminación que tiene en la construcción de cada árbol individual. Luego, promediando estos puntajes para las 1000 iteraciones se obtuvo un puntaje total de la importancia asignada a cada uno de los *features*. Cabe destacar que este puntaje no solo permitirá evaluar qué conectividades son más predictivas para el modelo, sino también identificar las regiones cerebrales involucradas.

Resultados

En la Figura 7 se observan las métricas de desempeño obtenidas en el proceso de CV, comparando las AUCs (promedio) para etiquetas reales (negro) y mezcladas (celeste), a lo largo de las diferentes semanas en las que se realizó el seguimiento de los pacientes con los QIDS. Allí se indican con asterisco (*) los casos donde se obtuvieron resultados significativos ($p < 0,05$). Como se puede apreciar, se encontró que la red visual extraestriada predijo la respuesta positiva al tratamiento (remisión) con una alta precisión durante las primeras semanas de la evaluación post-intervención (semana 1 a 5) resultando estadísticamente significativo entre las semanas 1 y 3. Por otro lado, las *importancias* estimadas para las FC se pueden ver en el gráfico de barras de la Figura 8, considerando allí el caso particular de la tercera semana de seguimiento. En el mismo se indican los primeros 20 *features* de mayor importancia, etiquetando cada par de ROIs con los nombres neuroanatómicos del atlas AAL. Esto mismo se puede representar con diferentes perspectivas del cerebro como se observa en la Figura 9, donde se resaltan las 12 FC de mayor importancia, representando la puntuación de cada una con el grosor del enlace. Como se puede apreciar en ambos gráficos existe una fuerte dominancia de una de las conexiones entre parietal y frontal para esa semana de seguimiento.

Otra forma de poder visualizar más claramente las importancias de las FC y cómo se vinculan entre las diferentes regiones anatómicas es mediante un gráfico circular como el que se muestra en la Figura 10. En la misma se indican las importancias (las 100 de mayor puntaje) con la anchura de los enlaces que conectan a las ROIs, representando así la importancia de cada *feature*. El esquema se divide por hemisferios (R/L) y por localización anatómica de cada área (central, frontal, insular, límbico, occipital, parietal y temporal) mediante una paleta de colores. Los círculos (blancos y negros) marcan las ROIs AAL vinculadas a las FC (utilizando la nomenclatura anatómica abreviada según la Tabla 1). Entre las conexiones más predictivas que se observan (para los QIDS de la semana 3) se destacan las occipito-temporales, occipito-parietales, occipito- frontales y una alta importancia entre parietal y frontal.

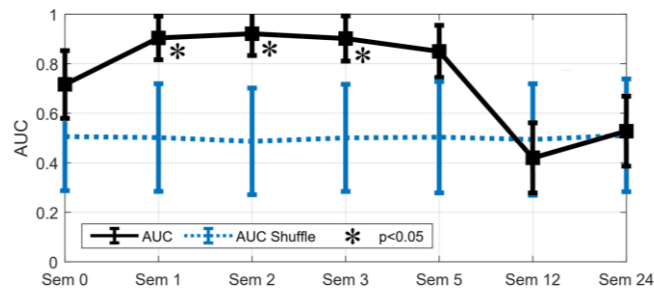


Figura 7: AUC (seguimiento) para la red Visual Extraestriada (con y sin mezcla de clases).

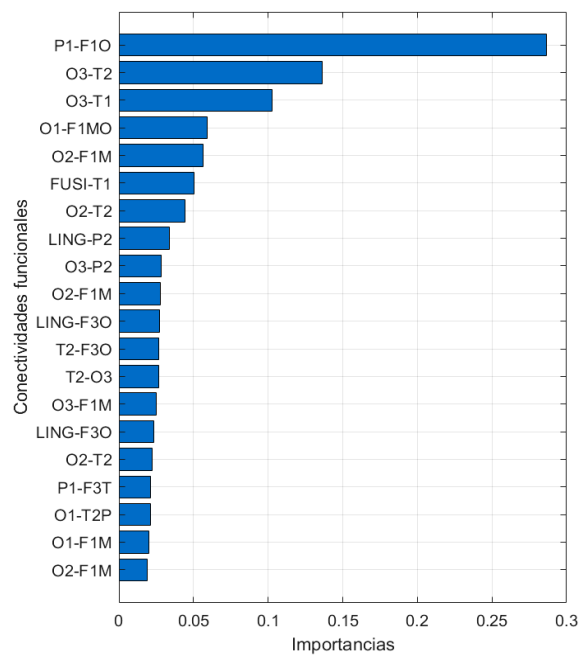


Figura 8: Importancias de las conectividades funcionales para los 20 features más importantes. Semana 3.

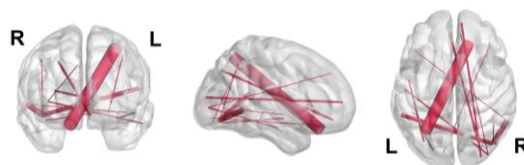


Figura 9: Vistas anatómicas del cerebro con las 12 FC de mayor importancia (grosor del enlace). Semana 3.

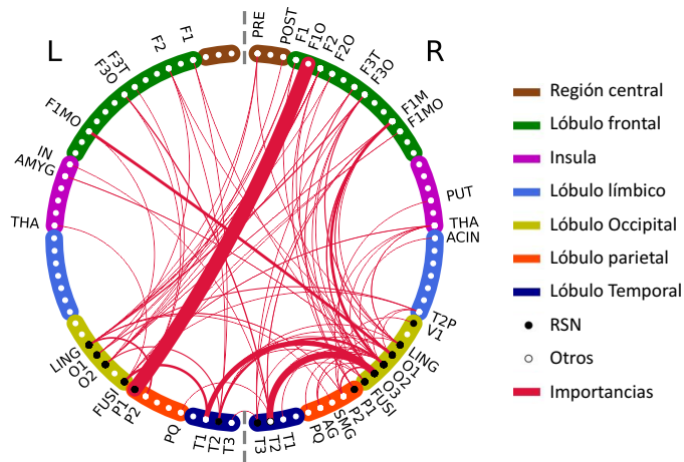


Figura 10: Gráfico circular de importancias agrupado anatómicamente por regiones principales y ROIs. Semana 3.

Tabla 1: Nombres neuroanatómicos y abreviaturas de las ROIs según atlas AAL [9].

Nombre	Abrev.	Nombre	Abrev.
Caudate	CAU	Calcarine	V1
Putamen	PUT	Cuneus	Q
Pallidum	PAL	Lingual	LING
Thalamus	THA	Occipital Sup	O1
Precentral	PRE	Occipital Mid	O2
Frontal Sup	F1	Occipital Inf	O3
Frontal Sup Orb	F1O	Postcentral	POST
Frontal Mid	F2	Parietal Sup	P1
Frontal Mid Orb	F2O	Parietal Inf	P2
Frontal Inf Oper	F3OP	Supramarginal	SMG
Frontal Inf Tri	F3T	Angular	AG
Frontal Inf Orb	F3O	Precuneus	PQ
Rolandic Oper	RO	Hippocampus	HIP
Supp Motor Area	SMA	Parahippocampal	PHIP
Olfactory	OC	Amygdala	AMYG
Frontal Sup Medial	F1M	Fusiform	FUSI
Frontal Med Orb	F1MO	Heschl	HES

Rectus	GR	Temporal Sup	T1
Paracentral lobule	PCL	Temporal Pole Sup	T1P
Insula	IN	Temporal Mid	T2
Cingulum Ant	ACIN	Temporal Pole Mid	T2P
Cingulum Mid	MCIN	Temporal Inf	T3
Cingulum Post	PCIN		

Conclusiones

Los resultados alcanzados para este estudio muestran que los biomarcadores conformados por las conectividades funcionales de la red visual extraestriada pudieron predecir con una alta precisión las remisiones hasta la quinta semana (con mayor significancia hasta la tercera) luego del suministro de psilocibina. Estas conectividades comprenden enlaces entre regiones cerebrales visuales y frontales, así como la conectividad intra-hemisférica de las cortezas visuales primarias y secundarias.

Teniendo en cuenta que las alteraciones sensoriales inducidas por sustancias como la psilocibina son predominantemente visuales, una de las posibilidades que sugieren los resultados es que las conectividades hacia la red visual en reposo predijeran algunos de los efectos subjetivos experimentados por los pacientes, dado que a su vez, estos mismos efectos podrían estar asociados con los resultados esperados para este tipo de tratamientos ([13]; [14]; [15]). No obstante, cabe mencionar que el análisis presentado contempla también algunas limitaciones derivadas de este diseño. Esto se relaciona con que el número de sujetos que participaron del experimento era ciertamente inferior al ideal para el clasificador binario basado en neuroimágenes como features de entrada al modelo, lo que limitaba la potencia estadística de los hallazgos obtenidos. Esta limitación fue abordada con una reducción del tamaño de features estableciendo datos e hipótesis que permitieron concentrar los biomarcadores con mayor potencial predictivo y evaluar la precisión del clasificador mediante un procedimiento de validación cruzada. Asimismo, se aprovecharon las características propias del clasificador basado en árboles de decisión para extraer puntajes de las importancias de los features y así identificar a los más predictivos.

Recientemente, se ha publicado un ensayo de fase 2 en donde se compara la psilocibina frente al escitalopram como posible tratamiento para la depresión [6] y el cual podría aportar un conjunto de datos ideal para sortear las limitaciones ya mencionadas. No obstante, se considera que el presente estudio es por sí mismo un primer paso valioso en la dirección de predecir la respuesta a tratamientos antidepresivos mediante psilocibina a partir de neuroimágenes en estado basal.

Referencias

- [1] American Psychiatric Association. (2000). Diagnostic and Statistical Manual of Mental Disorders - Dsm IV - Tr. Washington, DC.
- [2] Nierenberg, A. A., & Amsterdam, J. D. (1990). Treatment-resistant depression: definition and treatment approaches. *The Journal of clinical psychiatry*, 51, 39-47.
- [3] Kim, J., Farchione, T., Potter, A., Chen, Q., & Temple, R. (2019). Esketamine for treatment-resistant depression-first FDA- approved antidepressant in a new class. *N Engl J Med*, 381(1), 1-4.

- [4] Carhart-Harris, R. L., Bolstridge, M., Rucker, J., Day, C. M., Erritzoe, D., Kaelen, M., & Nutt, D. J. (2016). Psilocybin with psychological support for treatment-resistant depression: an open-label feasibility study. *The Lancet Psychiatry*, 3(7), 619-627.
- [5] Nichols, D. E. (2016). Psychedelics. *Pharmacological reviews*, 68(2), 264-355.
- [6] Carhart-Harris, R., Giribaldi, B., Watts, R., Baker-Jones, M., Murphy-Beiner, A., Murphy, R., & Nutt, D. J. (2021). Trial of Psilocybin versus Escitalopram for Depression. *New England Journal of Medicine*, 384(15), 1402-1411.
- [7] Kessler, R. C. (2018). The potential of predictive analytics to provide clinical decision support in depression treatment planning. *Current opinion in psychiatry*, 31(1), 32-39.
- [8] Rush, A. J., Trivedi, M. H., Ibrahim, H. M., Carmody, T. J., Arnow, B., Klein, D. N., ... & Keller, M. B. (2003). The 16-Item Quick Inventory of Depressive Symptomatology (QIDS), clinician rating (QIDS-C), and self-report (QIDS-SR): a psychometric evaluation in patients with chronic major depression. *Biological psychiatry*, 54(5), 573-583.
- [9] Tzourio-Mazoyer, N., Landeau, B., Papathanassiou, D., Crivello, F., Etard, O., Delcroix, N.,...& Joliot, M. (2002). Automated anatomical labeling of activations in SPM using a macroscopic anatomical parcellation of the MNI MRI single-subject brain. *Neuroimage*, 15(1), 273-289.
- [10] Beckmann, C. F., DeLuca, M., Devlin, J. T., & Smith, S. M. (2005). Investigations into resting-state connectivity using independent component analysis. *Philosophical Transactions of the Royal Society B: Biological Sciences*, 360(1457), 1001-1013.
- [11] Friedman, J. H. (2002). Stochastic gradient boosting. *Computational statistics & data analysis*, 38(4), 367-378.
- [12] Pedregosa, F., Varoquaux, G., Gramfort, A., Michel, V., Thirion, B., Grisel, O.,...& Duchesnay, E. (2011). Scikit-learn: Machine learning in Python. *the Journal of machine Learning research*, 12, 2825-2830.
- [13] Garcia-Romeu, A., R Griffiths, R., & W Johnson, M. (2014). Psilocybin-occasioned mystical experiences in the treatment of tobacco addiction. *Current drug abuse reviews*, 7(3), 157-164.
- [14] Griffiths, R. R., Johnson, M. W., Carducci, M. A., Umbricht, A., Richards, W. A., Richards, B. D.,...& Klinedinst, M. A. (2016). Psilocybin produces substantial and sustained decreases in depression and anxiety in patients with life-threatening cancer: A randomized double-blind trial. *Journal of psychopharmacology*, 30(12), 1181-1197.
- [15] Roseman, L., Nutt, D. J., & Carhart-Harris, R. L. (2018). Quality of acute psychedelic experience predicts therapeutic efficacy of psilocybin for treatment-resistant depression. *Frontiers in pharmacology*, 8, 974.

13

Nuevos parámetros para la detección de isquemias coronarias en electrocardiogramas utilizando EEMD

Fernández Biscay, Carolina^{a,b}; Bonomini, María Paula^{a,b};
Arini, Pedro David^{a,b}

^a Instituto Argentino de Matemática, "Alberto P. Calderón", CONICET, Argentina

^b Instituto de Ingeniería Biomédica, Facultad de Ingeniería, Universidad de Buenos Aires, Argentina
cfernandezbiscay@conicet.gov.ar

Resumen

Las enfermedades cardiovasculares son la principal causa de muerte en el mundo. La mayoría se manifiesta como eventos isquémicos coronarios que resultan en zonas de necrosis o infarto. Es posible detectar las isquemias analizando los cambios que producen en el electrocardiograma (ECG). Tradicionalmente, se analizan las modificaciones del complejo STT (período de tiempo desde el fin de la despolarización ventricular hasta el comienzo de la repolarización ventricular).

Si bien existen varios métodos automatizados de detección de isquemias, la mayoría presenta gran cantidad de falsos positivos y se requiere la interpretación del ECG por parte de un especialista. El objetivo de este trabajo es encontrar nuevos parámetros derivados del ECG que mejoren la detección automática de isquemia.

En este trabajo se analizó el ECG aplicando Descomposición Empírica de Modos por Conjuntos (EEMD, del inglés Ensemble Empirical Mode Decomposition). Esta técnica descompone la señal en funciones intrínsecas de modos (IMF, del inglés Intrinsic Mode Function), cada una con un único valor de frecuencia instantánea. De esta forma, se analizaron las IMFs que contienen las frecuencias involucradas en el complejo STT (0.1-5Hz). A las IMFs seleccionados se les analizó temporalmente calculando la actividad de Hjorth, y frecuencialmente mediante la transformada de Hilbert, dos parámetros que no se han utilizado hasta ahora para la detección de isquemia.

Se estudiaron los parámetros propuestos en un subconjunto de registros de la European ST-T Database, que contiene registros de ECG con eventos isquémicos anotados por

especialistas. Se observó que ambos parámetros se alteraban significativamente durante los eventos isquémicos.

Abstract

The main causes of death in the world are cardiovascular diseases. Most of them manifest as coronary ischemic events that result in strokes or necrotic areas. Ischemia can be detected analyzing changes in the Electrocardiogram (ECG). Traditionally, alterations in the STT complex (period that goes from the ventricular depolarization to ventricular repolarization) are studied. Although there are several automated methods of ischemic detection, most have a large number of false positives and require professional interpretation of the ECG. The objective of this work is to find new parameters in the ECG that improve the automatic detection of ischemia.

In this work, the ECG was analyzed using Ensemble Empirical Mode Decomposition (EEMD). This technique decomposes the signal in intrinsic mode functions (IMFs), each one with a unique instant frequency. In this way, the IMFs, containing the frequencies involved in the STT complex (0.1-5Hz), were analyzed. The selected IMFs were analyzed temporally by calculating the Hjorth Activity, and in the frequency domain using the Hilbert Transform, two parameters that have not been used until now for ischemic detection.

The proposed parameters were studied in a subset of records of the European ST-T Database, that contain ECG records with annotations of ischemic events done by specialists. Both parameters were found to be significantly altered during ischemic events.

Palabras clave: Transformada de Hilbert, Actividad de Hjorth, Funciones Intrínsecas de Modos, European ST-T Database

Introducción

La isquemia cardíaca es la principal causa de muerte en el mundo. Según estimaciones de la OMS, en el 2019 el 16% de las defunciones fueron por enfermedades isquemias cardíacas [1]. En los últimos años esta tendencia fue aumentando: la OMS publicó en el 2000 un 13% de defunciones por esta misma causa. Particularmente, en Argentina la isquemia cardíaca es la principal causa de muerte, causando el 14% de las defunciones en el 2019. Es por este motivo que se está trabajando simultáneamente en la prevención y en la detección temprana de estas enfermedades.

La isquemia miocárdica se define como la disminución o cese completo del flujo sanguíneo a las células contráctiles del corazón, lo que lleva a una deficiencia de nutrientes y oxígeno en este tejido. Cuando la isquemia es prolongada se produce una zona de necrosis o infarto. Para prevenir llegar a esta instancia es necesario detectar las isquemias analizando los cambios que este cuadro produce en un ECG. Estos cambios se manifiestan como modificaciones en la amplitud, tiempo y duración del complejo ST-T [2]. El segmento ST representa el período de tiempo desde el fin de la despolarización ventricular hasta el comienzo de la repolarización ventricular (onda T). En condiciones normales este segmento es isoelectrico comparado con el segmento PR, donde se produce el retraso del nodo

auriculo-ventricular. En presencia de una isquemia miocárdica, el potencial eléctrico del segmento ST se encuentra elevado o deprimido con respecto al segmento PR [3]. Esto es debido a que la reducción del suministro de sangre al tejido del músculo cardíaco causa en dichas zonas la despolarización de las membranas en reposo con respecto al resto de los potenciales de membrana en reposo de las regiones normales [4].

La importancia de los detectores de isquemia radica en poder monitorear continuamente a un paciente internado en unidad coronaria, así como también poder detectar eventos isquémicos transitorios en registros de ECG de larga duración (Holter).

Se han propuestos métodos para la detección de isquemia basados en filtros digitales, análisis temporal de la derivada primera, transformada ondita e inteligencia artificial basada en técnicas que incluyen lógica difusa, redes neuronales, algoritmos genéticos, entre otras [4]. Sin embargo, los detectores actualmente continúan presentando una gran cantidad de falsos positivos, requiriendo así el análisis del ECG por parte de un especialista.

El objetivo de este trabajo es encontrar nuevos parámetros que aporten información para utilizar en un detector de isquemia.

Materiales

Para este trabajo se utilizó la base de datos European ST-T Database (ESCDB) [5]. Esta base de datos es de acceso público y se encuentra en Physionet [6]. Contiene 90 registros Holter de 78 pacientes, cada uno con 2 derivaciones de 2 hs de duración. Los registros incluyen anotaciones de especialistas, indicando inicio, fin y extremo de episodios isquémicos. Durante los primeros 100 latidos de cada registro, el paciente se encuentra acostado y no presentan eventos isquémicos.

Para el análisis estadístico de los parámetros obtenidos se utilizaron todos los registros de la derivación MLIII. En total son 47 registros con 97 episodios isquémicos. Por otro lado, para realizar las primeras pruebas de un detector de isquemia basado en estos parámetros, se utilizaron los primeros 20 registros de la derivación antes mencionada.

Métodos

La metodología de este trabajo se dividirá en cinco etapas: preprocesamiento de la señal, extracción de parámetros, postprocesamiento, análisis estadístico de los parámetros extraídos y desarrollo de un detector basado en los nuevos parámetros.

Preprocesado

A las señales se les realizó un preprocesado basado en la Descomposición Empírica de Modos por Conjuntos (EEMD, del inglés Ensemble Empirical Mode Decomposition).

La Descomposición Empírica de Modos (EMD) descompone señales no lineales y no estacionarias en funciones intrínsecas de modos (IMF, del inglés Intrinsic Mode Function).

Las IMF representan un modo oscilatorio simple. A diferencia de una función armónica simple, las IMF tienen una amplitud y frecuencia variable en función del tiempo [7].

Al realizar EMD ocurre un fenómeno conocido como mezcla de modos, que es la presencia de oscilaciones de amplitud muy distintas en uno o más modos, o de oscilaciones muy similares en distintos modos. Para reducir este problema, se utiliza EEMD [8], en donde se le adiciona a la señal ruido blanco y se le realiza EMD. Esto se repite una cierta cantidad de veces y luego se promedia lo obtenido en cada EMD

Al realizar esta descomposición, se analizaron las bandas de frecuencia de cada IMF, y se decidió seleccionar únicamente los modos 8, 9 y 10 de todos los registros, ya que correspondían a los modos en el rango de frecuencia entre 0.1 y 5 Hz, donde se encuentra la información relacionada al segmento ST y la onda T. Un ejemplo del resultado obtenido en estos modos se puede ver en la Figura 1.

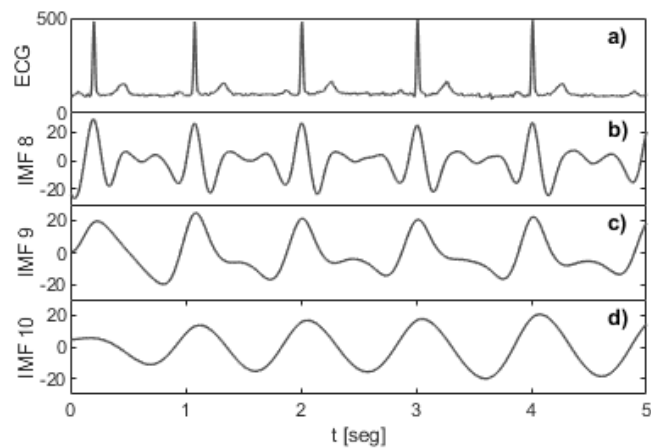


Figura 1: Se muestra el resultado de los IMF 8 (b), 9 (c) y 10 (d) al realizar EEMD en los primeros 5 seg del ECG del registro e0103 (a).

Extracción de parámetros

Luego del preprocesado, a la señal obtenida se le extrajeron dos parámetros: la Actividad de Hjorth y la amplitud de la transformada de Hilbert, obteniendo así dos series temporales.

Actividad de Hjorth

Los parámetros de Hjorth surgieron de la necesidad de describir el Electroencefalograma mediante métodos cuantitativos [9]. Para este trabajo se utilizó la Actividad, definida como la varianza. La Actividad de Hjorth se calcula de a ventanas de 10 latidos en la sumatoria de los tres IMFs seleccionados. De esta manera se termina obteniendo una serie de la Actividad durante todo el registro.

En la siguiente ecuación se define la Actividad de Hjorth:

$$Act = \sigma^2 = \frac{1}{T} \int_{t-T}^t f^2(t) dt \quad (1)$$

donde, t es el número de muestra, $f(t)$ es la señal obtenida a partir de la sumatoria de las 3 IMFs y T es la ventana de 10 latidos.

Amplitud de la transformada de Hilbert

Luego de haber realizado EEMD se puede realizar la transformada de Hilbert sobre los IMFs y obtener el contenido frecuencial a lo largo del tiempo. De esta manera se realizó la transformada de Hilbert a los tres IMFs de interés y se obtuvo, como parámetro en el dominio frecuencial, la amplitud a lo largo del tiempo.

Postprocesamiento

A las dos series temporales se les realizó un postprocesamiento que consistió en: eliminación de latidos, filtrado y normalización de la serie.

Eliminación de latidos

Se eliminaron todos los latidos que no fueran normales, según las marcas obtenidas por Aristotle [10]. A su vez, se eliminaron todos los latidos cuya línea de base variara en más de 20mV de un latido a otro, ya que se los consideró como ruido de la señal.

Filtrado y normalizado de la serie

A las series de la Actividad de Hjorth y de la Transformada de Hilbert, se le realizó un filtro de media móvil y se las normalizó en base a los primeros 100 latidos que son considerados basales. Se tomó la media y la varianza de los primeros latidos y se normalizó a todo el registro en base a estos valores

Análisis estadístico

Se estudió la media de ambos parámetros durante un evento isquémico y durante períodos sin episodios de isquemia. Para elegir estos últimos períodos, se buscaron intervalos de 6 minutos (por ser el promedio de las duraciones de los episodios isquémicos) donde el segmento ST no superara los 0.05mV. Luego, se analizaron las diferencias estadísticas, para cada parámetro, entre cada población (períodos isquémicos y no isquémicos).

Detector

A partir de los resultados obtenidos en el análisis estadístico, se diseñó un detector. Para cada registro, al medir ambos parámetros, se obtuvieron dos series temporales. Se realizó el promedio entre ambas series normalizadas y se obtuvo una única serie con la cual se realizó la detección de isquemia, utilizando un umbral adaptativo.

Resultados

Se compararon los resultados de ambos parámetros obtenidos para eventos isquémicos y no isquémicos, utilizando la prueba de Mann–Whitney–Wilcoxon y se obtuvo que para ambos casos la diferencia era significativa ($p < 0.0001$). En la Figura 2, se puede ver un gráfico de cajas con los resultados obtenidos.

Al realizar el detector con ambos parámetros se obtuvo una sensibilidad y predicción positiva del 91% y 83%, respectivamente, en los primeros 20 registros de la derivación MLIII de la base de datos. Los resultados en detalle se pueden ver en la Tabla 1. Por otra parte, la Figura 3 muestra un ejemplo de detección de isquemia para el registro e0103 de la base de datos.

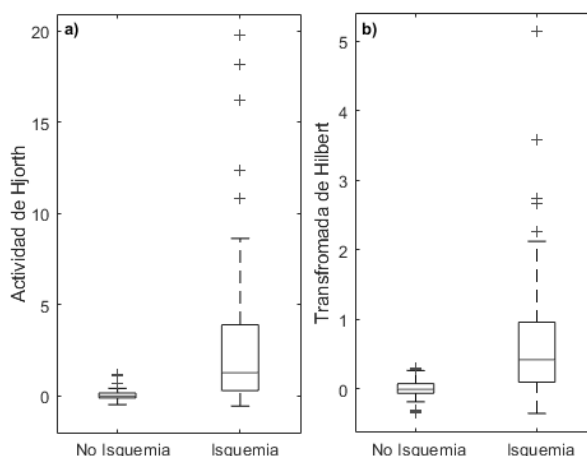


Figura 2: Gráficos de cajas comparando el resultado de los parámetros obtenidos con la Actividad de Hjorth (a) y con la Transformada de Hilbert (b), para episodios isquémicos y no isquémicos.

Tabla 1: Resultados obtenidos al realizar la detección de isquemia con los parámetros obtenidos en los primeros 20 registros de la derivación MLIII de la ESCDB.

	Real	Isquemia	No isquemia
Detectado			
Isquemia		58	12
No isquemia		6	-

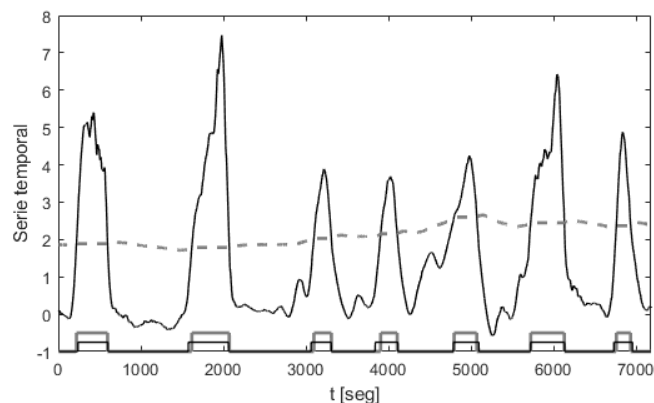


Figura 3: Ejemplo de detección de isquemia para el registro e0105 de la ESCDB utilizando los parámetros propuestos. La serie temporal es el promedio de las series, obtenidas con los parámetros de la Actividad de Hjorth y de la Transformada de Hilbert, normalizadas.

Discusión

Se debe completar el trabajo con todas las derivaciones, para así poder analizar toda la base de datos y comparar el resultado con el estado del arte. Garcia et al. realizó un estudio en el dominio temporal, comparando los segmentos ST con un segmento template, obteniendo un resultado de sensibilidad y predicción positiva del 90% y 89%, respectivamente.

Como hipótesis, podemos inferir que la utilización de estos parámetros junto con otros comúnmente utilizados para la detección de isquemia (como, por ejemplo, nivel del ST), mejorarán los resultados obtenidos.

Conclusión

Los parámetros presentados en este trabajo demostraron ser significativamente diferentes durante un episodio isquémico y no isquémico. A su vez, los primeros resultados obtenidos al analizar 20 registros de la derivación MLIII de la base de datos alentaron su utilización para la detección de isquemias.

Agradecimientos

Este trabajo fue subvencionado por el proyecto PICT 2145 2016 y el PIP 2014-2016 112-20130100552CO.

Referencias

- [1] Global Health Estimates 2019: Deaths by Cause, Age, Sex, by Country and by Region, 2000-2019. Geneva, World Health Organization; 2020.

- [2] Lee, D.H.; Park, J.W.; Choi, J.; Rabbi, A.; Fazel-Rezai, R. (2013). Automatic detection of electrocardiogram ST segment: Application in ischemic disease diagnosis. *IJACSA*, Vol. 4(2), 150-155
- [3] Kusumoto, F.M. (2004). *Cardiovascular pathophysiology*. Hayes Barton Press.
- [4] Manocha, A.K.; Singh, M. (2011). An overview of Ischemia detection techniques. *IJSER*, Vol. 2 (11).
- [5] Taddei, A.; Distanto, G.; Emdin, M.; Pisani, P.; Moody, G.B.; Zeelenberg, C.; Marchesi, C. (1992). The European ST-T Database: standard for evaluating systems for the analysis of ST-T changes in ambulatory electrocardiography. *European Heart Journal*, Vol. 13, 1164-1172.
- [6] Goldberger, A.; Amaral, L.; Glass, L.; Hausdorff, J.; Ivanov, P.C.; Mark, R.; ... & Stanley, H.E. (2000). PhysioBank, PhysioToolkit, and PhysioNet: Components of a new research resource for complex physiologic signals. *Circulation [Online]*. Vol. 101 (23), e215–e220.
- [7] Huang, N.E. (2005). *Hilbert-Huang Transform and Its Applications*. Interdisciplinary Mathematical Sciences.
- [8] Wu Z.; Huang N.E. (2009). Ensemble empirical mode decomposition: A noise-assisted data analysis method. *Advances in Adaptive Data Analysis*. Vol. 1(1), 1–41
- [9] Hjorth, B. (1970) EEG analysis based on time domain properties. *Electroencephalography and Clinical Neurophysiology*. Vol. 29, 306-310
- [10] Moody G.B.; Mark, R.G. (1982). Development and evaluation of a 2-lead ECG analysis program. *Computers in Cardiology. Los Alamitos, CA: IEEE Comput. Soc. Press*. 39–44.

14

Modulación de las oscilaciones del sueño por el aprendizaje motor

Solano, A. ^{a*}, Riquelme, L. ^a, Perez-Chada, D. ^b, Mazzeo, J. ^c, Della-Maggiore V. ^a

^a. IFIBIO Houssay, Departamento de Fisiología, Facultad de Medicina, Universidad de Buenos Aires, Argentina

^b. Departamento de Medicina Interna, Servicio de Neumonología y Sueño, Hospital Universitario Austral, Argentina

^c. Instituto de Ingeniería Biomédica, Facultad de Ingeniería, Universidad de Buenos Aires, Argentina
**asolano.ext@fi.uba.ar*

Resumen

El cerebro en individuos adultos experimenta cambios continuamente. La plasticidad cerebral se asocia a la capacidad de adquirir nuevos conocimientos y habilidades, que se incorporan en forma de memorias. En particular, el aprendizaje de tipo motor permite, por un lado, la adquisición de nuevas habilidades desde cero, como aprender a tocar un instrumento musical o manipular una herramienta con precisión. Por otro lado, permite mejorar el desempeño ante cambios del ambiente (internos o externos), como cuando se camina sobre una superficie resbalosa o nos recetan nuevos lentes y la musculatura ocular se acomoda para volver a enfocar correctamente. En estudios previos de nuestro laboratorio se confirmó que el aprendizaje de adaptación motora genera memorias de largo plazo que se consolidan durante un periodo de vigilia posterior al aprendizaje, aunque recientemente se ha mostrado que la consolidación ocurre también durante el sueño. En esta investigación llevamos a cabo una serie de experimentos, con distintas manipulaciones, para identificar los marcadores neurales de la consolidación dependiente del sueño de las memorias de adaptación motora. Voluntarios sanos aprendieron tareas de adaptación y se estudiaron las señales electroencefalográficas (EEG) tanto durante la vigilia como durante el sueño posterior. De forma análoga a lo que ocurre para memorias declarativas, se observó que la interacción precisa entre ondas lentas y husos del sueño, oscilaciones características del sueño NREM, es importante para la consolidación dependiente del sueño. Estos resultados nos permitieron profundizar en el conocimiento de los mecanismos que median la estabilización e integración de memorias motoras, y podrían ser útiles para el diseño de intervenciones con el objetivo de potenciar memorias en el contexto de la rehabilitación motora y el ámbito deportivo.

Abstract

The adult brain undergoes continuous change. Brain plasticity is associated with the capacity to acquire new knowledge and skills, in the form of memories. In particular, motor learning allows the acquisition of new skills from scratch, such as learning to play a musical instrument or manipulate a tool with precision. On the other hand, it allows to improve the performance under environmental changes (internal or external), such as when walking on a slippery surface or when we are prescribed new glasses and the ocular musculature adjusts itself to focus correctly again. Previous studies from our laboratory confirmed that motor adaptation learning generates long-term memories that are consolidated during a period of wakefulness following learning. However, recently it has been shown that consolidation also occurs during sleep. In this research, we conducted a series of experiments, with different manipulations, to identify neural markers of sleep-dependent consolidation of motor adaptation memories. Healthy volunteers learned an adaptation task, and electroencephalographic (EEG) signals were studied both during wakefulness and during subsequent sleep. Analogous to declarative memories, the precise interaction between slow oscillations and sleep spindles, distinctive oscillations of NREM sleep, was found to be important for sleep-dependent consolidation of motor adaptation memories. These results shed light on the mechanisms that mediate the stabilization and integration of motor memories, and could be useful for the design of interventions aimed at enhancing memories in the context of motor rehabilitation and sports.

Palabras clave: aprendizaje motor; husos del sueño; ondas lentas; consolidación

Introducción

Las memorias motoras se pueden clasificar en memorias de habilidades motoras (HM), que involucra la adquisición de nuevos planes motores, o memorias de adaptación motora (AM), que implica la recalibración de un plan motor preexistente [1].

La AM permite ajustar nuestras acciones ante perturbaciones del entorno, como cuando cambiamos la prescripción de nuestras lentes, o ante perturbaciones internas, como las ocurridas durante el desarrollo o frente a un reemplazo de cadera. Este tipo de aprendizaje es fundamental para mantener la precisión motora frente a un entorno variable, como al conducir un nuevo vehículo o aprender a andar en bicicleta. Trabajos recientes de nuestro laboratorio sugieren que las memorias de AM se consolidan durante el día dentro de una ventana de 6 horas posteriores al aprendizaje [2,3].

Por otro lado, existe abundante evidencia, a partir de estudios en humanos y animales, de que el sueño NREM (sin movimiento rápido de ojos) tiene un rol en la estabilización y mejora de memorias declarativas, es decir, aquellos recuerdos que pueden ser evocados de forma consciente, como hechos y/o eventos [4]. Se sabe hoy, en base a estos estudios, que entre las oscilaciones cerebrales involucradas en el sueño NREM se encuentran las ondas lentas (OL), que oscilan a una frecuencia promedio de alrededor de 1 Hz, y viajan a través de la corteza cerebral, hipocampo y tálamo. Otro de los ritmos participantes son los husos de sueño, de ~10-16 Hz, con una duración de 0.5 a 3 seg, que se generan en circuitos neuronales que involucran neuronas reticulares talámicas y tálamo-corticales. Finalmente, los *ripples* del hipocampo son oscilaciones de ~80-200 Hz que se observan

principalmente en la región CA1 del hipocampo y se asocian a la reactivación de trazas de memoria [5]. Se ha propuesto que durante la transferencia de información de hipocampo a corteza (fase sistémica de la memoria), las OL facilitan la ocurrencia de husos de sueño *rápidos* (≥ 12 Hz), de origen talámico, que a su vez co-ocurren con los *ripples* hipocámpales permitiendo así una comunicación entre hipocampo y corteza a través del tálamo. Dicho mecanismo sería el responsable de mediar la estabilización de las memorias declarativas durante el sueño NREM. Un punto importante es que la co-ocurrencia entre los diferentes ritmos no es casual sino que hay evidencia de que existe una relación causal entre el triple acoplamiento de OL, husos y *ripples*, y la retención de memorias declarativas que involucran al hipocampo [6].

Si bien hay abundante evidencia sobre un rol importante del sueño en la consolidación de memorias declarativas, menos se sabe sobre los marcadores neuronales involucrados en la consolidación dependiente del sueño de memorias motoras. Evidencia creciente de nuestro y otros laboratorios sugiere que el aprendizaje de memorias motoras involucra la participación del hipocampo [7,8]. Además, se ha visto un aumento de la densidad de husos del sueño luego de aprender tareas de HM [9-13]. Estudios recientes en animales mostraron que luego de aprender una HM se observó *replay* de la actividad neuronal, en asociación con OL en la corteza motora [14] y un aumento del acoplamiento entre OL y husos [15]. Sin embargo, pocos estudios han investigado el rol del sueño en la AM [16,17], y mostraron que este tipo de aprendizaje está asociado a un aumento en la potencia de la actividad lenta del EEG ($\sim 1-4$ Hz) al principio del sueño NREM, que luego se normaliza hacia el final del sueño. Sin embargo, la pregunta sobre la relevancia de la sincronización entre husos y OL, durante la consolidación dependiente del sueño de estas memorias, permanece inexplorada.

En este trabajo estudiamos si al igual que las memorias declarativas, el aprendizaje de AM modula el acoplamiento entre husos y OL durante el sueño NREM.

Materiales y métodos

Participantes

Diez voluntarios normales (5 mujeres, edad (media \pm error estándar (EE)) 24.3 ± 3.1 años) cumplieron los requisitos de inclusión (ver [18]) y completaron todo el estudio. Todos los sujetos eran diestros y ninguno de ellos declaró trastornos neurológicos ni psiquiátricos. Sólo se incluyeron en el estudio los voluntarios que cumplían los criterios de buena calidad del sueño [19,20]. Todos los voluntarios firmaron el consentimiento informado aprobado por el Comité de Ética del Hospital de Clínicas de la Universidad de Buenos Aires, que cumple con la Declaración de Helsinki en su última versión, y con la Ley Nacional de Protección de Datos Personales.

Paradigma Experimental

Para estudiar el aprendizaje de AM se utilizó una versión experimental (*tarea experimental*) que permite monitorear la evolución del aprendizaje de *adaptación*

visuomotora (AVM). La tarea utilizada consiste en mover un cursor desde un punto de partida, en el centro de la pantalla de una computadora, hacia uno de 8 blancos visuales dispuestos en forma concéntrica utilizando un joystick con la mano derecha (Figura 1; para una descripción detallada ver [21,18]). La visión de la mano que mueve el joystick se ocluye durante todo el entrenamiento.

Durante la tarea los voluntarios se enfrentan a tres tipos de ensayos. Durante ensayos perturbados, una rotación angular (normalmente de 30 a 45 grados) se impone sobre el cursor relativa al movimiento de la mano. Durante ensayos nulos no se impone ninguna rotación y el cursor sigue la misma dirección que la mano. Finalmente, durante ensayos sin error, se manipula el movimiento del cursor de forma que los voluntarios observan movimientos con poco error y se evita que sigan aprendiendo del error. Estos ensayos permiten estimar el estado del sistema motor [21] y evaluar la retención de la memoria motora. Cada sesión de entrenamiento tuvo una duración de aproximadamente 30 minutos.

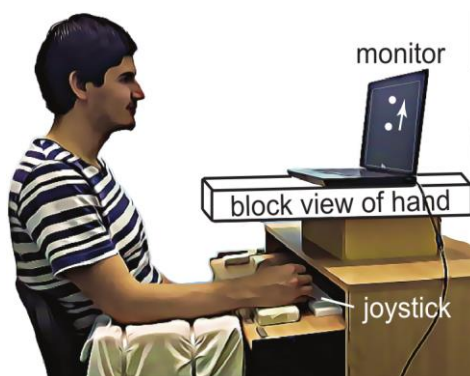


Figura 1: Paradigma experimental. Los voluntarios se sentaron en una silla y realizaron movimientos hacia uno de 8 objetivos visuales, utilizando un joystick controlado con la mano derecha (sin visión de su mano).

Diseño Experimental

Se llevó a cabo un diseño longitudinal donde los mismos voluntarios participaron inicialmente de una sesión de familiarización, y luego de una sesión experimental (EXP) y una sesión control (CTL), separadas por 7 días entre sí. En la sesión EXP los voluntarios se enfrentaron a ensayos perturbados y se adaptaron a la rotación angular impuesta sobre el cursor. Por otro lado, en la sesión CTL realizaron la misma cantidad de movimientos, pero con ensayos nulos, sin enfrentarse a la rotación angular. Luego de realizar la tarea motora por la noche del Día 1 (9 pm), en cada sesión, los voluntarios participaron de un estudio de sueño (polisomnografía, PSG) en el laboratorio. Allí durmieron toda la noche y al otro día (Día 2) realizaron un grupo de ensayos sin error que permitió evaluar la retención de la memoria.

Registro de polisomnografía

Una polisomnografía (PSG) es un estudio multiparamétrico realizado durante el sueño. Durante el estudio se registran las señales de Electroencefalografía (EEG), Electrooculografía (EOG) y Electromiografía (EMG), Electrocardiograma (ECG), oximetría de pulso, flujo respiratorio, entre otras según sea necesario. Durante este estudio en particular, se registraron señales de EEG: se colocaron electrodos en las posiciones correspondientes al estándar 10-20 (Nomenclatura Combinatoria Modificada), denominadas FC1, FC2, FC5, FC6, Fz, C3, C4, Cz, P3, P4, Pz. Las referencias fueron electrodos colocados sobre ambos mastoides (A1 y A2). Además se registraron señales de EOG para monitorear el movimiento de los ojos, y de EMG con dos electrodos sobre el mentón, para identificar periodos de mayor actividad muscular que puedan señalar micro-despertares o despertares.

Todas las señales se adquirieron a una frecuencia de 200 Hz, utilizando un equipo específico para PSG.

Procesamiento del EEG

Las señales se filtraron con filtros pasa banda tipo FIR (frecuencias de corte: EEG = 0.5-30 Hz; EOG = 0.5-15 Hz; EMG = 20-99 Hz). Todos los PSG se clasificaron manualmente según los criterios de la Academia Americana de Medicina del Sueño (AASM; [22]). Épocas de 30 segundos se clasificaron como etapa de vigilia (W), de sueño sin movimientos rápidos de ojos (NREM1, NREM2 y NREM3) o sueño con movimientos rápidos de ojos (REM). Luego se determinó la arquitectura del sueño. Artefactos de movimiento en la señal EEG filtrada se detectaron mediante inspección visual y se rechazaron manualmente.

OL (0.5-1.25 Hz) y husos del sueño (rápidos ≥ 12 Hz y lentos <12 Hz) se identificaron automáticamente a partir de la señal de EEG correspondiente a las etapas NREM2 y NREM3, utilizando algoritmos previamente reportados [23, 24,25]. Se calculó también la potencia delta siguiendo los pasos de procesamiento reportados por Huber y colaboradores ([16]).

Análisis de datos

Comportamiento

El rendimiento en la tarea motora se evaluó con la dirección del movimiento del joystick en relación con la línea que conectaba el punto de partida y la posición de cada objetivo (*ángulo de movimiento*). Dado que los ensayos se estructuraron en ciclos de ocho objetivos, los datos de los ensayos individuales se convirtieron en series temporales ciclo-a-ciclo calculando la mediana del ángulo de movimiento para cada ciclo y cada sujeto. Para evaluar la retención de la memoria para cada sujeto, se calculó el promedio de los ángulos de movimiento durante los ciclos sin error, expresados como un porcentaje de la asíntota alcanzada al final del aprendizaje (en el Día 1).

EEG

Luego de identificar husos y OL individuales, se calculó su densidad (número de husos rápidos y lentos, y de OL, por minuto de sueño NREM2 o NREM3). Para caracterizar el acoplamiento huso-OL se calculó también la densidad de husos acoplados con una OL (número de acoplamientos huso-OL por minuto de sueño NREM3), y la fase de la OL en la que los husos se desarrollan su máxima amplitud.

Para evaluar la diferencia en estas medidas entre las sesiones EXP y CTL, se calculó la diferencia relativa entre sesiones, según la función $((EXP-CTL)/CTL*100)$ para cada canal de EEG y cada sujeto. Los resultados grupales se graficaron en mapas topográficos.

Además, para explorar la posibilidad de una modulación local -contralateral- [2,9,26], se realizaron análisis estadísticos agrupando los canales del hemisferio izquierdo (HI: FC1, FC5, C3 y P3) y del hemisferio derecho (HD: FC2, FC6, C4 y P4). Dado que la línea media puede captar la actividad eléctrica de ambos hemisferios, se excluyó de este análisis.

Para estudiar el nivel de sincronía entre los husos rápidos y las OL, se determinó la fase de la OL en la que el huso desarrollaba su máxima amplitud pico a pico, y se contrastó el nivel de agrupación de los husos alrededor de la fase media para las sesiones EXP y CTL.

Al igual que para las demás métricas del sueño, los cambios relativos en la potencia de la actividad delta se calcularon mediante la función $((EXP-CTL)/CTL*100)$.

Resultados

Para estudiar el impacto de la AVM en las oscilaciones cerebrales, cuantificamos las métricas del sueño descritas anteriormente durante el periodo NREM del primer ciclo de sueño. También examinamos la arquitectura del sueño para evaluar si el aprendizaje afectaba alguna/s de las etapas del sueño en particular, aunque no se encontraron cambios.

Todos los voluntarios aprendieron a compensar la rotación visual durante la sesión EXP (Figura 2.A), y en promedio alcanzaron una retención del $56\pm 10.5\%$ (media \pm EE) en el test luego de dormir (Figura 2.B).

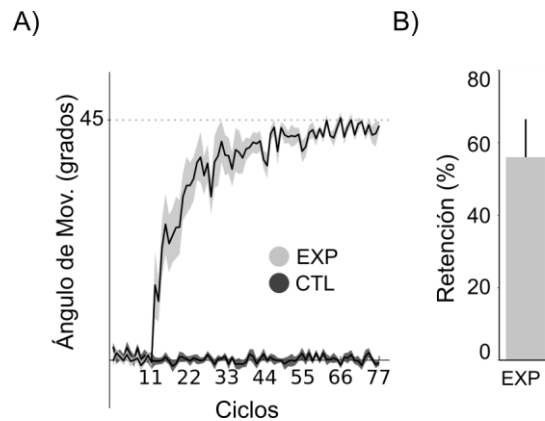


Figura 2: Conducta. A) Curvas de aprendizaje. Media \pm EE del ángulo de movimiento (en grados) para las condiciones EXP y CTL durante el Día 1. Todos los voluntarios aprendieron a compensar la rotación visual durante la condición EXP. B) Retención de la memoria evaluada luego de dormir, en la sesión Exp.

Encontramos que la AVM aumentó la densidad global de husos de sueño rápidos (≥ 12 Hz) pero no lentos (< 12 Hz) durante el sueño NREM3 (Figura 3; interacción entre tipo de huso y etapa de sueño, $F(3,14.81)=8.89$, $p=0.001$). Esta modulación se manifestó localmente, sobre el hemisferio contralateral a la mano entrenada.

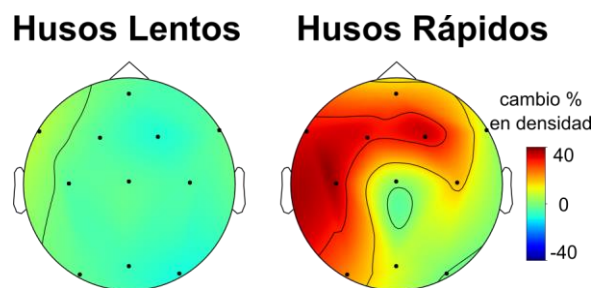


Figura 3: Distribución topográfica de la densidad de husos rápidos (≥ 12 Hz) y lentos (< 12 Hz) durante NREM3. Se muestran gráficos topográficos de la densidad de husos de sueño rápidos y lentos correspondientes a la diferencia relativa entre sesiones (EXP/CTL)

Como revela la Figura 4, la AVM aumentó la potencia de la actividad delta localmente, de manera interhemisférica durante los primeros 30 minutos en comparación con los últimos 30 minutos del sueño NREM (interacción hemisferio por intervalo: $F(1,120.4)=4.09$, $p=0.045$). Este hallazgo es consistente con la hipótesis de la homeostasis sináptica como potencial mecanismo de estabilización de la memoria durante el sueño [27,28].

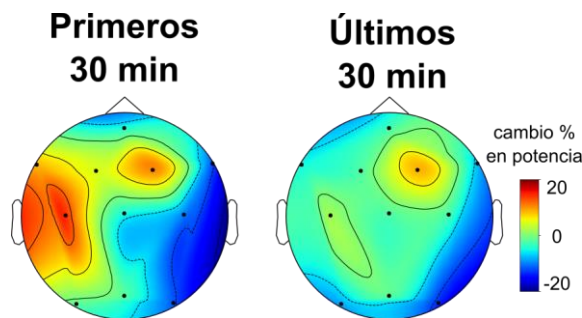


Figura 4: La AVM modula la potencia de la actividad delta al principio del sueño NREM. Se muestran los gráficos topográficos de la diferencia relativa (EXP/CTL) para la potencia delta (1-4Hz) durante los primeros y últimos 30 minutos de sueño NREM.

Por otro lado, aunque la AVM no afectó a la densidad de OL durante NREM3 ($t(9)=-1.07$; $p>0.05$), aumentó sustancialmente el número de husos rápidos acoplados a la fase activa de las OL (efecto de hemisferio, $F(1,13.8)=7.03$, $p=0.019$). Como se observa en la Figura 5, el hecho de que sólo los husos acoplados del hemisferio contralateral a la mano entrenada, y no los husos desacoplados, predijeron la retención de la memoria, apunta a la asociación huso-OL como un marcador fundamental de la consolidación de la memoria motora.

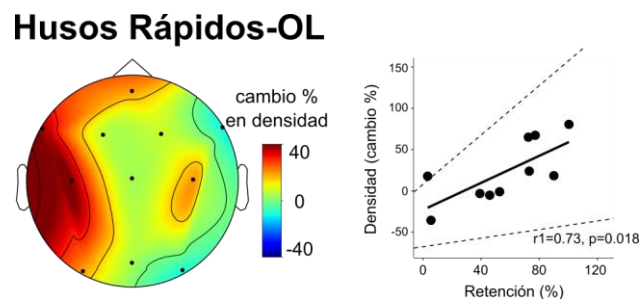


Figura 5: La AVM modula el acoplamiento huso-OL durante NREM3 de forma local. Se muestran gráficos topográficos de la densidad de husos rápidos acoplados a ondas lentas correspondientes a la diferencia relativa entre sesiones (EXP/CTL). Se muestra también la correlación entre el cambio % en la densidad acoplamientos huso-OL, y la retención de la memoria.

En relación al nivel de sincronía entre los husos rápidos y las OL, aunque la AVM aumentó el acoplamiento entre dichas oscilaciones, no influyó en su nivel de sincronía medida a través del nivel de agrupamiento de los husos alrededor de la fase media grupal. Esto sugiere que este parámetro podría no proporcionar información relevante sobre la estabilización de la memoria motora.

Conclusiones

Hemos demostrado que la AVM modula la densidad de los husos rápidos y el nivel de acoplamiento entre los husos rápidos y las OL, de forma local, en la región contralateral a la mano entrenada, durante el sueño NREM3. Curiosamente, sólo los husos rápidos asociados a las OL predijeron la retención de la memoria luego del sueño, lo que apunta a que el acoplamiento entre estas oscilaciones cumple un rol importante en la consolidación de la memoria motora. Además, el aumento de la potencia delta durante el inicio del sueño NREM es consistente con la hipótesis de la homeostasis sináptica, sugiriendo que ambos procesos pueden estar involucrados en la estabilización de la adaptación visuomotora. Nuestros hallazgos abren la posibilidad de la existencia de mecanismos comunes que operan en la base de las memorias procedurales y declarativas, y abren la posibilidad de diseñar protocolos de estimulación y manipulación experimental de las oscilaciones involucradas, con el objetivo de potenciar o afectar memorias motoras durante el sueño.

Referencias

- [1] Krakauer JW, Hadjiosif AM, Xu J, Wong AL, Haith AM. 2019. Motor Learning. In *Comprehensive Physiology* (pp. 613–663). Wiley. <https://doi.org/10.1002/cphy.c170043>
- [2] Della-Maggiore V, Villalta JI, Kovacevic N, McIntosh AR. 2017. Functional Evidence for Memory Stabilization in Sensorimotor Adaptation: A 24-h Resting-State fMRI Study. *Cerebral Cortex*, 27(3):1748-1757. <https://doi.org/10.1093/cercor/bhv289>
- [3] Lerner G, Albert S, Caffaro PA, Villalta JI, Jacobacci F, Shadmehr R, Della-Maggiore V. 2020. The Origins of Anterograde Interference in Visuomotor Adaptation. *Cerebral Cortex*, 30(7), 4000–4010. <https://doi.org/10.1093/cercor/bhaa016>
- [4] Rasch B, Born J. 2013. About Sleep's Role in Memory. *Physiological Reviews*, 93(2), 681–766. <https://doi.org/10.1152/physrev.00032.2012>
- [5] Buzsáki G. 2015. Hippocampal sharp wave-ripple: A cognitive biomarker for episodic memory and planning. *Hippocampus*, 25(10), 1073–1188. <https://doi.org/10.1002/hipo.22488>
- [6] Latchoumane CFV, Ngo HVV, Born J, Shin HS. 2017. Thalamic Spindles Promote Memory Formation during Sleep through Triple Phase-Locking of Cortical, Thalamic, and Hippocampal Rhythms. *Neuron*, 95(2), 424–435.e6, <https://doi.org/10.1016/j.neuron.2017.06.025>.
- [7] Albouy G, King BR, Maquet P, Doyon J. 2013. Hippocampus and striatum: Dynamics and interaction during acquisition and sleep-related motor sequence memory consolidation. *Hippocampus*, 23(11), 985–1004. <https://doi.org/10.1002/hipo.22183>
- [8] Jacobacci F, Armony JL, Yeffal A, Lerner G, Amaro E, Jovicich J, Doyon J, Della-Maggiore V. 2020. Rapid hippocampal plasticity supports motor sequence learning. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 117(38), 23898–23903. <https://doi.org/10.1073/pnas.2009576117>
- [9] Nishida M, Walker MP. 2007. Daytime Naps, Motor Memory Consolidation and Regionally Specific Sleep Spindles. *PLoS ONE*, 2(4), e341. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0000341>

- [10] Morin A, Doyon J, Dostie V, Barakat M, Tahar AH, Korman M, Benali H, Karni A, Ungerleider LG, Carrier J. 2008. Motor sequence learning increases sleep spindles and fast frequencies in post-training sleep. *SLEEP* 31(8):1149-1156 <https://doi.org/10.5665/sleep/31.8.1149>
- [11] Barakat M, Doyon J, Debas K, Vandewalle G, Morin A, Poirier G, Martin N, Lafortune M, Karni A, Ungerleider LG, Benali H, Carrier J. 2011. Fast and slow spindle involvement in the consolidation of a new motor sequence. *Behavioural Brain Research*, 217(1), 117–121. <https://doi.org/10.1016/j.bbr.2010.10.019>
- [12] Albouy G, Fogel S, Pottiez H, Nguyen VA, Ray L, Lungu O, Carrier J, Robertson E, Doyon J. 2013a. Daytime Sleep Enhances Consolidation of the Spatial but Not Motoric Representation of Motor Sequence Memory. *PLoS ONE*, 8(1), e52805. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0052805>
- [13] Boutin A, Pinsard B, Boré A, Carrier J, Fogel SM, Doyon J. 2018. Transient synchronization of hippocampo-striato-thalamo-cortical networks during sleep spindle oscillations induces motor memory consolidation. *NeuroImage*, 169, 419–430. <https://doi.org/10.1016/j.neuroimage.2017.12.066>
- [14] Ramanathan DS, Gulati T, Ganguly K. 2015. Sleep-Dependent Reactivation of Ensembles in Motor Cortex Promotes Skill Consolidation. *PLOS Biology*, 13(9), e1002263. <https://doi.org/10.1371/journal.pbio.1002263>
- [15] Silversmith DB, Lemke SM, Egert D, Berke JD, Ganguly K. 2020. The Degree of Nesting between Spindles and Slow Oscillations Modulates Neural Synchrony. *The Journal of Neuroscience*, 40(24), 4673–4684. <https://doi.org/10.1523/jneurosci.2682-19.2020>
- [16] Huber R, Felice Ghilardi M, Massimini M, Tononi G. 2004. Local sleep and learning. *Nature*, 430(6995), 78–81. <https://doi.org/10.1038/nature02663>
- [17] Landsness EC, Crupi D, Hulse BK, Peterson MJ, Huber R, Ansari H, Coen M, Cirelli C, Benca RM, Ghilardi MF, Tononi G. 2009. Sleep-Dependent Improvement in Visuomotor Learning: A Causal Role for Slow Waves. *Sleep*, 32(10), 1273–1284. <https://doi.org/10.1093/sleep/32.10.1273>
- [18] Solano A, Riquelme LA, Perez-Chada D, Della-Maggiore V. 2021. Motor Learning Promotes the Coupling between Fast Spindles and Slow Oscillations Locally over the Contralateral Motor Network. *Cerebral Cortex*, In Press. <https://doi.org/10.1101/2020.08.24.264697>
- [19] Buysse DJ, Reynolds CF, Monk TH, Berman SR, Kupfer DJ. 1989. The Pittsburgh sleep quality index: A new instrument for psychiatric practice and research. *Psychiatry Research*, 28(2), 193–213. [https://doi.org/10.1016/0165-1781\(89\)90047-4](https://doi.org/10.1016/0165-1781(89)90047-4)
- [20] Johns MW. 1991. A New Method for Measuring Daytime Sleepiness: The Epworth Sleepiness Scale. *Sleep*, 14(6), 540–545. <https://doi.org/10.1093/sleep/14.6.540>
- [21] Villalta JI, Landi SM, Flo A, Della-Maggiore V. 2015. Extinction Interferes with the Retrieval of Visuomotor Memories Through a Mechanism Involving the Sensorimotor Cortex. *Cerebral Cortex*, 25(6), 1535–1543. <https://doi.org/10.1093/cercor/bht346>
- [22] Iber C. 2004. Development of a New Manual for Characterizing Sleep. *Sleep*, 27(2), 190–192. <https://doi.org/10.1093/sleep/27.2.190>
- [23] Mölle M, Bergmann TO, Marshall L, Born J. 2011. Fast and Slow Spindles during the Sleep Slow Oscillation: Disparate Coalescence and Engagement in Memory Processing. *Sleep*, 34(10), 1411–1421. <https://doi.org/10.5665/sleep.1290>

- [24] Antony JW, Paller KA. 2016. Using Oscillating Sounds to Manipulate Sleep Spindles. *Sleep*, 40(3). <https://doi.org/10.1093/sleep/zsw068>
- [26] Johnson LA, Blakely T, Hermes D, Hakimian S, Ramsey NF, Ojemann JG. 2012. Sleep spindles are locally modulated by training on a brain-computer interface. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 109(45), 18583–18588. <https://doi.org/10.1073/pnas.1207532109>
- [27] Tononi G, Cirelli C. 2003. Sleep and synaptic homeostasis: a hypothesis. *Brain Research Bulletin*, 62(2), 143–150. <https://doi.org/10.1016/j.brainresbull.2003.09.004>
- [28] Tononi G, Cirelli C. 2006. Sleep function and synaptic homeostasis. *Sleep Medicine Reviews*, 10(1), 49–62. <https://doi.org/10.1016/j.smr.2005.05.002>

15

Minería de datos en ambientes no estacionarios

Chaure, Fernando Julian^a

^a *Instituto de Ingeniería Biomédica, Facultad de Ingeniería, Universidad de Buenos Aires, Argentina*
fjchaure@fi.uba.ar

Resumen

Tradicionalmente, al utilizar minería de datos para agrupar elementos según su semejanza, no se considera el tiempo en que fue adquirida cada muestra. Actualmente, y debido en parte a la gran cantidad de información disponible, los datos a analizar contienen patrones que varían en el tiempo, disminuyendo la performance del enfoque clásico. Resolver satisfactoriamente estos casos permitiría extraer con mayor precisión los grupos presentes, así como el comportamiento temporal de cada uno de ellos. Esto beneficiaría técnicas para analizar expresión génica, desarrollar sistemas de recomendación, monitorear redes de comunicación, detectar fraudes financieros, procesar redes de sensores, etc.

Se desarrolló el método Spikes_Link al intentar obtener de forma precisa la actividad de neuronas individuales en registros intracraneales de larga duración. En este tipo de registros, la forma de onda característica de cada neurona depende de su posición relativa con respecto al electrodo y pequeños desplazamientos incluso pueden trasladar su amplitud bajo o sobre el nivel de ruido.

Spikes_Link generaliza algoritmos clásicos para ambientes no estacionarios, utilizando un subconjunto de elementos que permiten asociar grupos obtenidos en segmentos sucesivos de datos. Con el grafo creado mediante estas asociaciones, se monitorean las transiciones de los grupos a través del tiempo. El objetivo de este trabajo es evidenciar como Spikes_Link, debido a su diseño, puede ser aplicado en métodos existentes de otras disciplinas para permitir el monitoreo de cambios temporales.

Abstract

Traditionally, when data mining is applied to cluster elements according to their similarity, the time in which each sample was acquired is not considered. Currently, and due in part to the large amount of information available, the data to be analysed contain patterns that vary over time, reducing the performance of the classical approach. Successfully solving these cases would allow the groups present to be extracted with greater precision, as well as the temporal behaviour of each one of them. This would benefit techniques to analyse gene expression, develop recommendation systems, monitor communication networks, detect financial fraud, process sensor networks, etc.

The Spikes_Link method was developed by attempting to accurately obtain the activity of individual neurons in long-term intracranial recordings. In this type of recordings, the characteristic waveform of each neuron depends on its relative position and the electrode and small displacements can even transfer its amplitude low or above the noise level.

Spikes_Link generalizes classical algorithms for non-stationary environments, using a subset of elements that allow associating groups obtained in successive data segments. With the graph created by these associations, the transitions of the groups are monitored over time. The objective of this work is to show how Spikes_Link, due to its design, can be applied in existing methods from other disciplines to allow the monitoring of temporal changes.

Palabras clave: Aprendizaje Automático, Concept Drift, Minería de Datos, Neurociencias.

Introducción

La minería de datos consiste en la extracción de patrones presentes en grandes volúmenes de información. Por ejemplo, obtener la estructura del universo (galaxias, cúmulos, etc.) a partir de la posición de las estrellas en un instante dado o los grupos de contactos estrechos entre usuarios a partir de sus interacciones en las redes sociales. Usualmente este tipo de análisis supone que los patrones a detectar son estáticos, por lo menos en el conjunto de datos utilizado. Pero a medida que se incrementa el periodo de tiempo registrado, ya no es posible mantener esta hipótesis. El intervalo de tiempo requerido para quebrarla dependerá de la aplicación e incluso es un área de estudio detectar cuando sucede [1].

La neurociencia experimental no es la excepción, al extraer la actividad de neuronas individuales mediante registros extracelulares (técnica conocida como Spike Sorting), se enfrenta al problema de la no estacionalidad. Ya que se observan cambios en la forma de onda característica de cada neurona en función de su posición relativa con el microelectrodo, el cual es flexible y tiene cierta libertad de movimiento. En la Figura 1 puede observarse algunos ejemplos idealizados; en el panel izquierdo la neurona de la derecha (la primera en activarse) generará una forma onda (spike) con un pico negativo de gran amplitud dada su cercanía al extremo del microelectrodo mientras que la neurona de la derecha tendrá un spike de menor amplitud. El panel central, presenta la misma actividad neuronal, pero con un microelectrodo que se desplazó y ahora se encuentra en las cercanías de la neurona de la derecha, por lo que se invierte la relación de amplitudes. Aunque las formas de onda asociadas a cada neurona ahora son distintas, todavía es posible diferenciar la actividad de cada neurona separables en dos grupos. El problema se agrava si el microelectrodo luego se aleja de ambas neuronas y los spikes pasan a ser de menor amplitud y sus diferencias quedan eclipsadas (panel derecho). Este último efecto también puede generarse temporalmente por el aumento repentino del nivel de ruido. La solución ideal de este problema consistiría en diferenciar la actividad de ambas neuronas siguiendo los cambios que pueden darse en la forma de sus spikes. Si la relación señal/ruido no lo permitiese, sería necesario asignar el spike a un conjunto de posibles neuronas.

Debido a que el efecto del desplazamiento de los microelectrodos se acumula en el tiempo, se han desarrollado algoritmos especiales para analizar registros extracelulares de larga duración [2]. Hasta hace algunos años, los registros a analizar tenían solo unas pocas horas de duración, y no era indispensable considerar variaciones en las formas de onda de las neuronas. Por este motivo, la gran mayoría de los métodos actuales están desarrollados y calibrados bajo la hipótesis de estacionalidad. Existe en esta área (al igual que en muchas otras) un problema a la hora de elegir que método utilizar para procesar un registro determinado. Para ayudar a decidir existe incluso una página web que compara las últimas versiones de cada método [3]. En general la mejor opción dependerá de múltiples factores

como el nivel de ruido, cantidad y tipo de electrodos, etc. Debido a esta situación, desarrollar nuevos algoritmos que permitan manejar registros largos, complejizaría aún más la selección del método a aplicar, y requeriría reevaluar que métodos y parámetros son óptimos para cada tipo de registro.

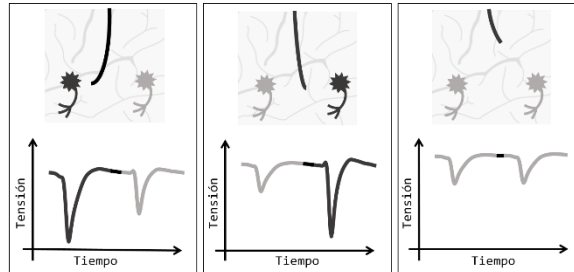


Figura 1: Esquema de señal registrada al activarse sucesivamente dos neuronas, cada panel ejemplifica distintas posiciones del microelectrodo.

Por otro lado, y volviendo a un enfoque general del problema, existen algunos algoritmos de agrupamiento que extraen patrones dinámicos de un flujo continuo de datos [4], pero presentan limitaciones al trabajar en un alto número de dimensiones y/o con clases cercanas con densidades similares. Lamentablemente, los registros extracelulares poseen estas características, por lo que no es recomendable utilizar esta familia de algoritmos para analizarlos. Este caso vuelve a poner en evidencia la falta de métodos que sean capaces monitorear patrones dinámicos, y que permitan hacer uso de las herramientas y experiencias obtenidas por la comunidad al estudiar intervalos cortos de datos.

En este contexto, el autor del presente trabajo desarrolló Spikes_Link [5], un método que permite generalizar algoritmos de Spike Sorting para ambientes no estacionarios. Debido a que debe ser compatible con diversas técnicas de extracción de características y agrupamiento, es posible utilizar Spikes_Link (SL) en otras aplicaciones. Por ejemplo, SL podría ser aplicado para monitorear cambios en los patrones de compra de los clientes (particularmente importante si la situación económica varía fuertemente en el tiempo) y/o para detectar la aparición de nuevos tipos de fraudes con tarjetas de créditos. Lamentablemente se requieren grandes datos para poder minar variaciones en los patrones y son muy limitados los ejemplos públicamente disponibles. Afortunadamente, uno de los pocos conjuntos de datos disponibles, que consiste en datos de citometría del sistema inmune, tiene un particular interés debido a la situación mundial actual. Por estos motivos, luego de presentarse los últimos avances de SL como herramienta para neurociencias se discutirán los resultados al aplicar dicho método a datos obtenidos mediante citometría de flujo de la respuesta inmune de ratones al Virus del Nilo Occidental.

Desarrollo

Spikes_Link

La idea central del método SL consiste en separar los datos en bloques sucesivos y, a partir del segundo, agregar un subconjunto de muestras representativas de cada clase detectada. Este conjunto de muestras agregadas en el bloque i , se denotan $OS(C_j^{i-1})$, y representan el estado de la clase j en los $i - 1$ bloques previos. Un ejemplo puede observarse en la Figura 2, donde los conjuntos OS son seleccionados para las dos clases C_1^1 y C_2^1 que

inicialmente coinciden con los dos grupos \tilde{C}_1^1 y \tilde{C}_2^1 (resultados del agrupamiento del primer bloque). Al ser agregados en el bloque siguiente y agrupados por un algoritmo automático como parte de los dos grupos detectados, los OS ayudan a plantear la relación que los grupos \tilde{C}_1^2 y \tilde{C}_2^2 son la actualización en el nuevo bloque de sus homónimos previos. Notar que, al utilizar esta forma de relacionar grupos, no se requiere que cada bloque utilice el mismo espacio, esto es de particular interés al utilizar algoritmos de Spike Sorting que varían la cantidad de dimensiones que aplican para los métodos de agrupamiento automático.

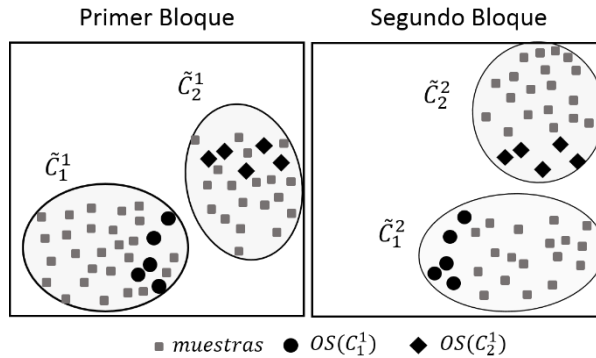


Figura 2: Ejemplo del uso de conjuntos OS para relacionar grupos detectados en bloques consecutivos.

Cada clase conocida aporta al siguiente bloque un OS de la misma cantidad de elementos. Esta cantidad es relativamente pequeña (500 por defecto), ya que se busca no afectar demasiado el análisis del bloque intervenido. Sin embargo, algunas clases pueden tener aún menos elementos, un caso típico son las neuronas que, por la forma en que codifican información tienen una tasa de activación muy reducida. Para solventar este inconveniente se recurrió a la creación de muestras artificiales de las clases minoritarias mediante la técnica SMOTE [6], de forma tal de balancear los OS .

Finalmente, mediante los conjuntos OS es posible cuantificar la relación entre clases conocidas y grupos detectados en el nuevo bloque utilizando el coeficiente de superposición. Para cada clase j y grupo k (detectado en el bloque i), puede calcularse dicho coeficiente como:

$$Ov_{j,k}^i = \frac{|\overline{OS}(C_j^{i-1}) \cap \tilde{C}_k^i|}{|\overline{OS}(C_j^{i-1})|} \quad (1)$$

El operador $\overline{OS}(C_j^{i-1})$ denota los elementos de $OS(C_j^{i-1})$ que fueron detectados en el bloque i , esto generaliza casos donde las muestras pueden ser no etiquetadas por el algoritmo de Spike Sorting. En pocas palabras, $Ov_{j,k}^i$ informa que proporción del conjunto agregado de una clase previa fue asignada en cada grupo detectado en el nuevo bloque. Utilizando los coeficientes $Ov_{j,k}^i$ puede construirse un grafo direccional bipartito para cada cambio de bloque. Este tipo de enfoque permite detectar cuando una clase se divide, combina, desaparece o aparece [7].

La Figura 3 muestra un ejemplo del grafo creado para un cambio de bloque y los criterios que pueden construirse a partir del mismo. En primer lugar, definiendo un umbral llamado de seguimiento (típicamente 0.5), es posible decidir si un grupo detectado consiste en una clase conocida; si un grupo sobrepasase dicho umbral para más de una clase conocida se

la etiquetará como una unión de clases. En este tipo de situaciones, SL cuenta con un parámetro para continuar agregando durante algunos bloques los conjuntos OS de las clases combinados, en un intento de reencontrar las clases separadas antes de aceptar que se perdió la capacidad de diferenciarlos. De forma similar, un umbral de división (típicamente 0.2) puede ayudar a detectar clases divididas en múltiples grupos. Esto es de especial interés en Spike Sorting ya que es común que una clase sea dividida, por error en múltiples grupos. Si los grupos presentan solo una relación con una clase conocida y al combinarse el valor del coeficiente de superposición supera el umbral de seguimiento, SL los combinará automáticamente.

Aunque la relación con las clases conocidas no sea sencilla como para poder aplicarse en un criterio simple y directo, pueden ser útiles para un posterior curado de los resultados. El borrador público de Spikes_Link [5] contiene otros criterios relacionados a grafos que permiten perfeccionar los resultados al seleccionar que resolución temporal se desea obtener. Por ejemplo, si se detectasen dos clases separables solo en 2 bloques que posteriormente se combinan por los siguientes 30 y solo se requiere analizar clases estables, una forma de simplificar los resultados, es unir definitivamente ambas clases inestables y presentarlas como una única clase que se conservó por 32 bloques.

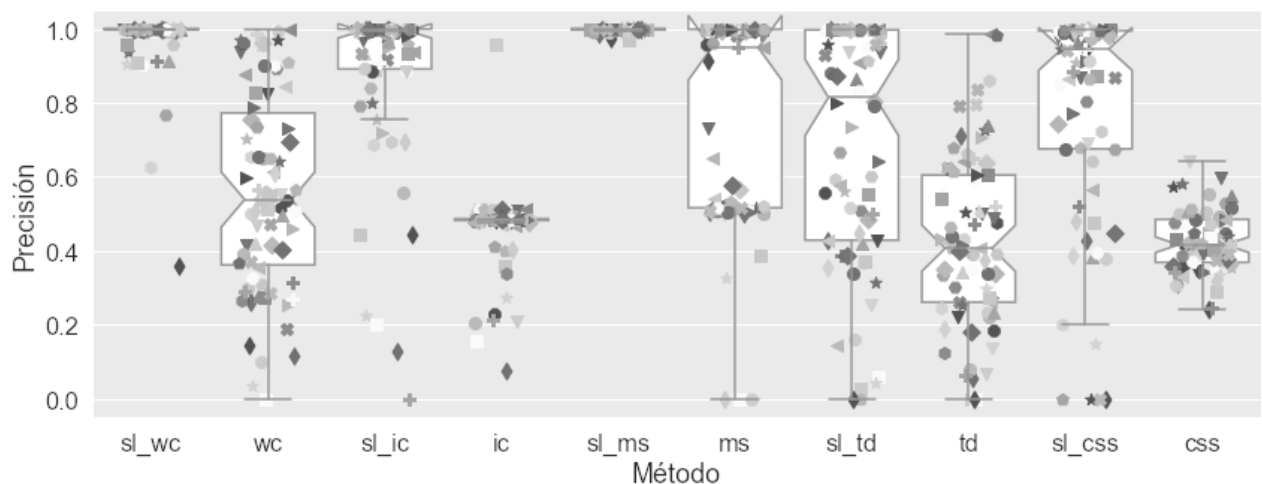


Figura 4: Precisión con la que fue extraída la actividad de cada neurona simulada.

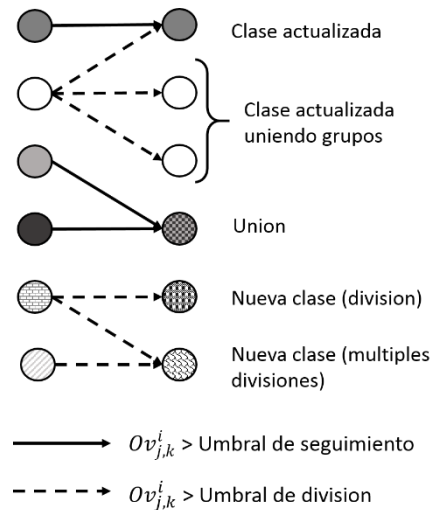


Figura 3: Grafo direccional bipartido construido a partir de los $0v_{j,k}^i$.

Para cuantificar la mejora que SL obtiene con respecto a los métodos tradicionales, se crearon 15 registros de entre 4 a 6 neuronas, donde se simuló el movimiento del microelectrodo variando acumulativamente las amplitudes de los spikes durante 8 horas hasta 2.5 veces sus valores originales. En todos los registros se añadieron 15 minutos de ruido en medio del registro para perder temporalmente la separación de las neuronas. Para analizar con múltiples algoritmos de Spike Sorting, se utilizó la biblioteca SpikelInterface [8] que elimina la necesidad de implementar código particular para cada caso. Para abstraerse del tipo de entrada de cada algoritmo se construyó una señal con los spikes pertenecientes al *OS* la cual fue añadida al comienzo de la señal que compone cada bloque a analizar.

La Figura 4 muestra la precisión con la que fue reconstruida la actividad de cada neurona simulada al analizarse mediante distintos algoritmos clásicos de Spike Sorting: Wave_clus (wc), Ironclus (ic), Tridesclus (td), Mountainsort (ms) y Combinato (css) y al generalizarlos con SL (prefijo 'sl_'). En todos los casos, se encontró una mejora significativa (sign test con p valor menor a 10^{-11}) al utilizar SL contra la versión del algoritmo clásico.

Citometría de flujo

Para mostrar la utilidad de SL en otras áreas se analizará un conjunto de datos inmunológicos que consisten en la respuesta inmune de cuatro ratones al Virus del Nilo Occidental [9]. Durante ocho días, se extrajeron células inmunes de la médula ósea de los ratones. Para cada célula se registró mediante citometría de flujo el nivel de expresión de nueve proteínas. Posteriormente, un experto utilizó esta información para clasificar las células según su tipo celular. En este primer acercamiento a los datos las células no etiquetadas por el experto fueron descartadas. Debido a que la única información temporal es el día en que fue tomada cada muestra, se deben deshabilitar varios criterios de SL, que requieren transiciones sutiles e incrementales como continuar buscando durante algunos bloques, clases que no fueron aisladas en un bloque. Otra característica deshabilitada para esta aplicación es la combinación automática de clases (ver Figura 3), ya que es posible que la misma población se divida en distintos tipos celulares (por ejemplo, células madre activadas en Linfocitos B y Eosinófilos no activados).

Se empleó Spikes_Link utilizando una implementación pública del algoritmo FlowSom (github.com/Hatchin/FlowSOM) para extraer las poblaciones de células presentes en cada

bloque de un día de datos. Dado que se tiene el tipo celular de cada muestra, una forma de medir la aplicabilidad del método es verificar si las transiciones realizadas por las poblaciones de células (clases) son biológicamente posibles. Mediante este método, y considerando como inválida toda clase detectada como nueva (sin población previa asociada), se obtuvo que el 72.4% de las transiciones son válidas. Este es un resultado prometedor al considerarse que solo el 11.4% de las transiciones posibles son biológicamente válidas. Sin embargo, en la Figura 4 se observa que los $Ov_{j,k}^i$ utilizados para asociar grupos son consistentemente bajos y, por lo tanto, sensibles a pequeños errores de agrupamiento. Y en los casos límites, es fácil obtener un coeficiente de superposición nulo con las clases conocidas, lo que genera nuevas clases que parecen surgir de la nada (caso biológicamente imposible). Esta dificultad surge de poblaciones de células que sufren grandes cambios entre mediciones, como ya ha sido reportado en [9]. En dicho trabajo, se utiliza la distancia euclídea para asociar nuevas poblaciones a la clase más cercana. Sería posible incluir opcionalmente este criterio en SL para perfeccionar e; análisis de datos que presenten cambios abruptos en los patrones minados.

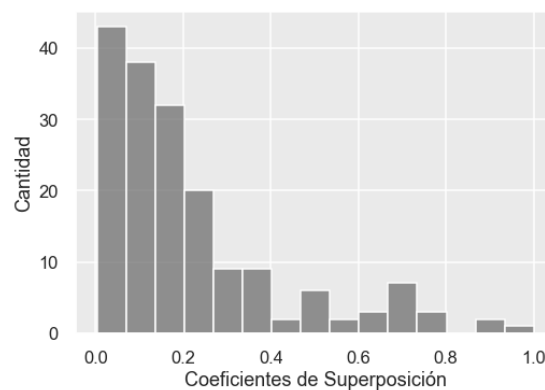


Figura 4: Histograma de los $Ov_{j,k}^i$ utilizados para relacionar poblaciones en días consecutivos.

Cabe señalar que los resultados podrían mejorarse al generalizar algoritmos de análisis de mayor performance [10] en cada bloque. Esto no es automáticamente realizable ya estos algoritmos están implementados en R mientras que Spikes_Link en Python, por lo que se debería desarrollar una interfaz para cada caso. Utilizar las etiquetas del tipo celular no para cuantificar la calidad de los resultados sino para forzar una dinámica de clases completamente válida, también podría ser un enfoque útil en estos casos.

La experiencia obtenida al generalizar esta aplicación resalta la necesidad de implementar procedimientos para caracterizar las dinámicas esperables en los datos, así como también errores típicos en los algoritmos utilizados para analizarlos. De esta forma pueden activarse distintos criterios y/o modificarse parámetros de SL para obtener los mejores resultados posibles.

Conclusiones

En el presente trabajo se comentaron las actuales limitaciones de la minería de datos en ambientes no estacionarios, así como también el caso de aplicación en neurociencias que llevó al desarrollo de SpikesLink, un método capaz de generalizar algoritmos clásicos. Se presentaron los últimos resultados de SL, el cual logro perfeccionar todos los algoritmos de Spike Sorting analizados.

Para analizar la eficacia del método propuesto en otras áreas, se estudió un conjunto de datos inmunológicos. En este caso se obtuvieron grupos de células que presentan mayormente transiciones biológicamente validas, verificando la utilidad de SL. En parte los errores de asociación se deben a la baja precisión temporal (1 conjunto de muestras por día) que poseen estos datos, lo cual lleva al límite la aplicabilidad el enfoque utilizado por SL. Finalmente, se discutieron formas de mejorar estos resultados.

Al generalizar métodos clásicos tomando bloques de datos, es posible enfrentar dos importantes problemas de los grandes datos: la cantidad de recursos que requiere el procesamiento y la aparición de variaciones temporales en los patrones extraídos. El método desarrollado no está limitado a una aplicación particular y abre la puerta al estudio de diversos fenómenos dinámicos utilizando el mismo enfoque. Actualmente, el mayor obstáculo para expandir SL a otras aplicaciones es la limitada disponibilidad de datos públicos suficientemente grandes como para presentar variaciones en los patrones a minar.

Referencias

- [1] Aggarwal, C. C. (2005). On change diagnosis in evolving data streams. *IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering*, 17(5), 587-600.
- [2] Dhawale, A. K., Poddar, R., Wolff, S. B., Normand, V. A., Kopelowitz, E., & Ölveczky, B. P. (2017). Automated long-term recording and analysis of neural activity in behaving animals. *Elife*, 6, e27702.
- [3] Magland, J., Jun, J. J., Lovero, E., Morley, A. J., Hurwitz, C. L., Buccino, A. P., & Barnett, A. H. (2020). SpikeForest, reproducible web-facing ground-truth validation of automated neural spike sorters. *Elife*, 9, e55167.
- [4] Cao, F., Estert, M., Qian, W., & Zhou, A. (2006, April). Density-based clustering over an evolving data stream with noise. In *Proceedings of the 2006 SIAM international conference on data mining* (pp. 328-339). Society for industrial and applied mathematics.
- [5] Chaure, F. J., & Rey, H. G. (2020). General Framework for Tracking Neural Activity Over Long-Term Extracellular Recordings. *bioRxiv*.
- [6] Chawla, N. V., Bowyer, K. W., Hall, L. O., & Kegelmeyer, W. P. (2002). SMOTE: synthetic minority over-sampling technique. *Journal of artificial intelligence research*, 16, 321-357.
- [7] Oliveira, M., & Gama, J. (2010). Bipartite graphs for monitoring clusters transitions. In *International Symposium on Intelligent Data Analysis*. Springer, Berlin, Heidelberg. 114-124.
- [8] Buccino, A. P., Hurwitz, C. L., Garcia, S., Magland, J., Siegle, J. H., Hurwitz, R., & Hennig, M. H. (2020). SpikeInterface, a unified framework for spike sorting. *Elife*, 9, e61834.
- [9] Putri, G. H., Read, M. N., Koprinska, I., Singh, D., Röhm, U., Ashhurst, T. M., & King, N. J. (2019). ChronoClust: Density-based clustering and cluster tracking in high-dimensional time-series data. *Knowledge-Based Systems*, 174, 9-26.
- [10] Weber, L. M., & Robinson, M. D. (2016). Comparison of clustering methods for high-dimensional single-cell flow and mass cytometry data. *Cytometry Part A*, 89(12), 1084-1096.

16

Control por machine learning de la estela de un cilindro

Roca, Pablo Daniel ^a; D'Adamo, Juan ^b;
Duriez, Thomas ^c

^a Laboratorio de FluidoDinámica, FIUBA.

^b Laboratorio de FluidoDinámica, CONICET - FIUBA.

^c Lab. de FluidoDinámica, CONICET - FIUBA. Lab. de Micro y Nanofluidica, Univ. de la Marina Mercante.

Email: proca@fi.uba.ar

Resumen

La aplicación de Machine Learning en el ámbito de las Ingenierías creció notablemente durante los últimos años, particularmente en la Mecánica de Fluidos. Motivadas originalmente por el abaratamiento de las capacidades de cómputo y almacenamiento de datos, se desarrollaron nuevas técnicas de Machine Learning adaptadas al modelado, optimización y control de flujos como alternativas de trabajo frente a enfoques tradicionales. Aún con la dificultades de adquisición masiva de datos, procesamiento y rápida actuación requeridas en aplicaciones industriales; los avances obtenidos en el campo experimental y de simulación numérica de fluidos brindan grandes perspectivas futuras.

El presente trabajo estudia la aplicación de Control por Machine Learning sobre simulaciones numéricas para la experiencia prototipo del escurrimiento alrededor de un cilindro modificado por actuadores electrohidrodinámicos. Se conocen resultados experimentales y numéricos previos que plantearon el control y definieron estrategias para conseguir la estabilización de la estela con un consumo óptimo de energía de actuación. En este marco, se propone utilizar un algoritmo de Programación Genética que defina una ley de control en lazo cerrado. Para ello, se realiza una competencia entre todas las leyes de control definidas y se obtiene, tras iteraciones del algoritmo, aquella con el mayor rendimiento.

Los resultados del controlador son contrastados con experiencias previas de control a lazo cerrado bajo un enfoque tradicional basadas en modelos predictivos con ARX. Se realiza un análisis de robustez del controlador y se demuestra un mejor rendimiento con una ventaja significativa en la ausencia de etapas de modelado y ajuste de parámetros.

Abstract

Machine Learning applications in the field of engineering have growth during the past years, particularly in fluid mechanics. Originally motivated by the cost reductions in computing and

data storage capabilities, new techniques of Machine Learning were developed to allow modeling, optimization and control of flows as an alternative to traditional methodologies. Even when the challenges in acquisition of massive amounts of data, processing it and provide a quick actuation response are required for industry use cases; the progress in experimental and numerical simulation of flows offers great perspectives.

The present work studies the application of Machine Learning Control in numerical simulations on the experience of the flow around a circular cylinder controlled by electrohydrodynamic actuators. As established in previous numerical and experimental work, the cylinder wake can be controlled and stabilized with an optimum cost of energy for actuation. It is within this context that an algorithm for genetic programming is proposed to define a closed loop control law. A tournament is held between all the control laws defined by the algorithm and, after a process of several iterations, the one with better performance is selected.

The controller results are contrasted with previous experiences of closed loop control with traditional controllers based in general predictive models with ARX. Performance and robustness analysis are performed over the proposed controller with promissory results and a significative advantage over traditional controllers in the absence of modeling and tuning stages.

Palabras clave: Machine Learning, Control de Flujos, Fluidos, Simulación.

Introducción

El empleo de técnicas de inteligencia artificial (AI) en fluidodinámica posee una amplia trayectoria y constante evolución. Desde su aplicación en la reducción del efecto de arrastre mediante la evaluación de ángulos entre superficies corrugadas [1], sistemas asistidos para diseños aerodinámicos con sistemas expertos [2], velocimetría de imágenes de partículas (PIV) empleando redes neuronales (NN) [3-4], o reconstrucción de campo de velocidades del flujo en un canal utilizando NN para analizar mediciones sobre las paredes [5]. Pero estos esfuerzos fueron dispersos y orientados a la exploración de mecanismos novedosos en lugar de a la eficientización de procesos por las capacidades de análisis de datos que ofrecen las computadoras.

Es hasta la última década cuando se comienzan a obtener beneficios de la incorporación de técnicas de procesamiento de grandes datos (Big Data) en el campo de la fluidodinámica. Estas estrategias, orientadas al procesamiento y exploración de grandes volúmenes de datos, variados y con alta velocidad en la adquisición, encontraron un campo natural de aplicación en el entendimiento, optimización y control de fluidos [6].

El progreso de los últimos años en nuevas técnicas de aprendizaje automático (Machine Learning o ML), rama de AI enfocada a la obtención de patrones sobre mediciones empíricas, aparece como un complemento de grandes perspectivas para la fluidodinámica; en especial por su posibilidad de automatizar la inferencia de modelos y leyes de control a partir de datos. De la evolución de algoritmos de ML y su continuo contraste con experiencias previas basadas en metodologías clásicas de control, se obtienen controladores que mejoran el rendimiento de los originales. Se destacan casos como control con algoritmos de aprendizaje por refuerzo [7], redes neuronales para el control de fasores con frecuencias cruzadas [8], algoritmos genéticos para optimización de flujos cortantes en un escalón [9], entre otros.

Con el objetivo de analizar la efectividad de esta nueva alternativa de controladores inteligentes, se diseña un controlador por ML (MLC) con el objetivo de estabilizar la estela

del escurrimiento alrededor de un cilindro con un consumo óptimo de energía. Se diseña una experiencia numérica replicando estructura de experiencias previas conocidas de control a lazo abierto sobre el escurrimiento de un cilindro utilizando actuadores electrohidrodinámicos [10] con el objetivo de contrastar resultados. La ley de control óptima para el MLC es obtenida por programación genética, donde se construyen conjuntos de leyes de control en cada generación para ser evaluadas, permitiendo la selección de aquellas más aptas para la evolución.

El MLC es comparado con un controlador tradicional predictivo (generalized predictive controller o GPC) por modelos AutoRegresivos con entradas exógenas (ARX), verificados en experiencias numéricas previas [11].

La experiencia prototipo elegida para verificar el comportamiento del MLC se vincula directamente con áreas de aplicación en la industria del automóvil, aeroespacial y náutica. En estos ámbitos se estudia el flujo alrededor de cuerpos romos, objetos que por su naturaleza de uso se instalan fuera de la carrocería, fuselaje o casco y por su relación de medidas poseen un arrastre por fricción despreciable frente al arrastre por presión. La existencia de estas estructuras es inevitable por la naturaleza de las mismas (espejos externos, sensores, cámaras, etc) y genera resistencia al avance con el consiguiente costo energético. Asimismo, en el ámbito de las energías renovables, las aspas de turbinas eólicas cumplen un rol similar donde las vibraciones y ruidos que implican efectos no deseables en la estabilidad de las estructuras. La investigación de nuevas técnicas inteligentes de control de fluidos sobre estos cuerpos persiguen tanto el ahorro energético como la seguridad estructural.

Modelo físico

Se considera la experiencia del escurrimiento alrededor de un cilindro circular 2D sobre un flujo de velocidad constante con $Re=235$. Se utiliza Gerris [12], un sistema de simulación numérica de fluidos (Computational Fluid Dynamics o CFD), para realizar los ensayos y se aplican modificaciones en su software para permitir la programación de leyes de control que definan el valor de actuación en cada paso de tiempo de la simulación. En la Figura 1 se observa la disposición y dimensiones de los elementos junto con condiciones de borde empleados en la simulación.

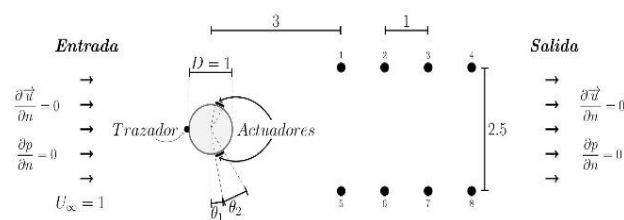


Figura 1: Estructura y dimensiones del modelo de escurrimiento alrededor del cilindro bajo estudio.

Con el objetivo de estabilizar la estela mediante la supresión de vórtices se disponen 2 generadores de plasma electrohidrodinámicos [13] en el punto de separación, coordinados para soplar tangencialmente a la superficie del cilindro con un valor de actuación ($u(k)$) calculado por la ley de control para cada paso de tiempo (k). Se inyecta un trazador pasivo aguas arriba, en el punto de estancamiento, cuya concentración es medida aguas abajo en 8 sensores ($y_1(k)$, ..., $y_8(k)$) dispuestos simétricamente con el objetivo de captar la dinámica

de la estela. La simulación realizada verifica el efecto de generación y desprendimiento de vórtices, el camino de von Kármán, con un periodo de $T \sim 5.5s$ (ver Figura 2).

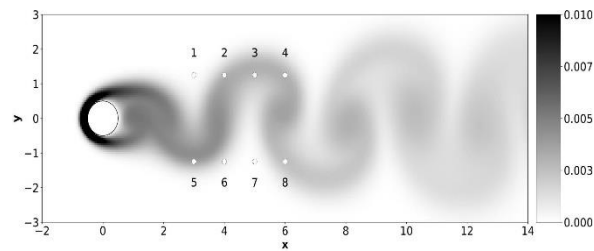


Figura 2: Concentración del trazador pasivo y ubicación de sensores para captar la dinámica de la estela.

Se modifica el sistema Gerris, escrito en lenguaje C, para incorporar un conector con el sistema controlador, externo y escrito en lenguaje Python, que define la intensidad de la inyección de plasma en los actuadores. De esta forma se independiza al simulador CFD de los algoritmos de control GPC y MLC que son implementados con mayor facilidad en lenguaje Matlab (ver Figura 3 y Figura 5).

Controlador predictivo por arx

Los avances obtenidos en controladores GPC en trabajos previos [11] son replicados con el nuevo modelo físico.

El controlador GPC requiere un modelo ARX para predecir el comportamiento de las señales de los 8 sensores de trazador pasivo y optimizar una función de costo J (ver Figura 3). Se define J de forma tal que se penalice la intensidad de la actuación mediante plasma, indicador de energía invertida en el control, y la concentración de trazador medida en los sensores, indicador de la existencia de desprendimientos.

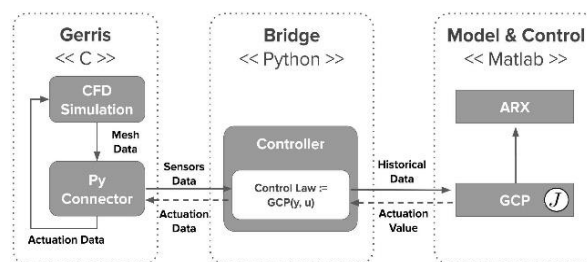


Figura 3: Arquitectura del lazo de control para GPC. El simulador recibe la actuación calculada con un modelo predictivo externo.

El modelo ARX es identificado utilizando simulaciones previas de entrenamiento. Empleando simulaciones de prueba con un patrón conocido de actuación (u) que reduce la generación de vórtices, se verifica la capacidad predictiva del modelo sobre valores de trazador medidos (y_1, \dots, y_8) (ver Figura 4).

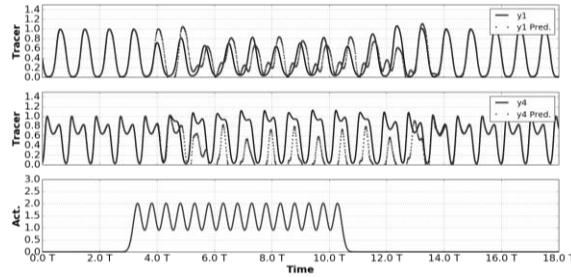


Figura 4: Verificación de predicciones de trazadores y_1 , y_4 para una actuación conocida utilizando ARX.

El controlador GPC obtenido es comparado con un escenario sin control mediante el cálculo de la energía cinética de la turbulencia medida en la estela del cilindro (turbulent kinetic energy, TKE). Se verifica un efecto de estabilización en la estela producto de la aplicación del controlador GPC (ver Figura 5).

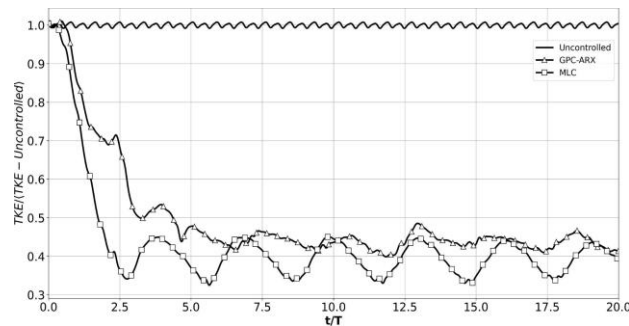


Figura 5: Comparación del TKE en escenario sin control (uncontrolled), controlado por GPC-ARX y por MLC.

Controlador por machine learning

El controlador MLC está basado en un algoritmo de programación genética [14] donde se definen generaciones de individuos cuyas leyes de control son evaluadas mediante simulaciones para obtener el costo J . A tal fin, se inyecta la ley de control como una función Python que calcula $u(k)$ utilizando operaciones aritméticas (+, -, x, /) sobre los valores $y_1(i)$, ..., $y_8(i)$, $u(i)$ con $i = k-1, k-2, \dots, k-T_s$, siendo T_s la cantidad de pasos de tiempo de la simulación para obtener T en el caso no controlado.

Los individuos de cada generación compiten empleando el costo J obtenido para seleccionar a los más eficientes. Los elegidos son utilizados en una etapa de evolución para obtener una nueva generación de individuos a ser evaluados (ver Figura 6).

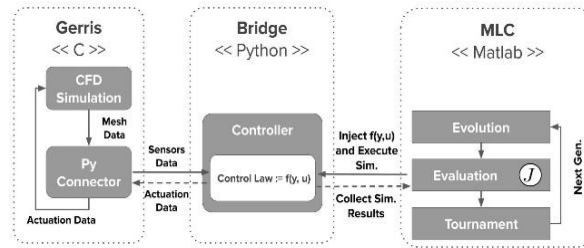


Figura 6: Arquitectura del lazo de control para MLC. El simulador recibe la actuación calculada con un modelo predictivo externo.

El proceso se repite durante 25 generaciones, obteniendo mejoras incrementales en la efectividad de los individuos, y se escoge al de menor costo J como aquel que mejor representa al controlador (ver Figura 7).

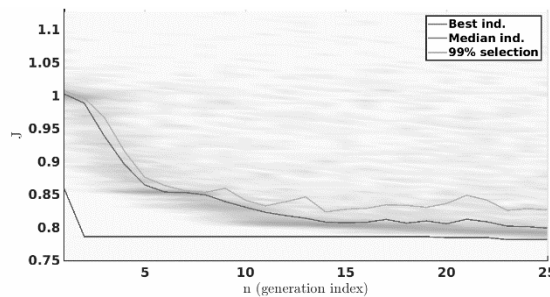


Figura 7: Evolución del costo J del mejor individuo, mediana y 99 percentil en cada generación evaluada.

La eficiencia del controlador MLC obtenido es verificada mediante la comparación del TKE contra el escenario sin controlador, obteniendo buenos resultados (ver Figura 5).

Análisis de resultados

Los controladores GPC y MLC obtenidos verificaron la estabilización de la estela del cilindro mediante la comprobación de una reducción del TKE en comparación con el escenario no controlado (ver Figura 5). El controlador MLC se mostró más eficiente presentando una reducción promedio mayor al 60% mientras que el GPC redujo aproximadamente el 55% del TKE.

Para verificar la robustez del controlador MLC, se repiten las experiencias de simulación aplicando variaciones sobre las condiciones de borde en la entrada de la experiencia. Durante un período acotado de tiempo, se impone una velocidad de entrada con un incremento del 10% y con un decremento del 10% respecto de la velocidad original. El controlador mostró adaptación a las nuevas condiciones ajustando suavemente su respuesta y recuperando el comportamiento nominal una vez que fuera eliminada la perturbación (ver Figura 8). Fueron ejecutadas experiencias similares introduciendo perturbaciones tales como ruidos en los sensores y en la actuación con idénticos resultados.

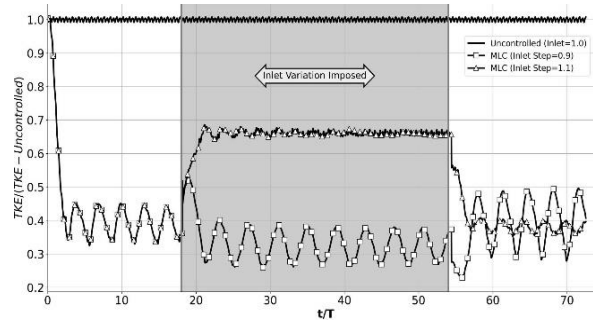


Figura 8: Comparación del TKE en escenarios sin control (uncontrolled) y con MLC con perturbaciones en las condiciones de entrada durante un período acotado (Inlet Variation Imposed).

A su vez, el controlador MLC presentó la característica de permitir identificar familias de leyes de control definidas por el linaje de los individuos. Si bien no todas las familias presentan el mismo nivel de eficiencia según la función de costo J definida, es posible extraer leyes de control válidas, que permitan un análisis cualitativo posterior sobre su comportamiento en la experiencia elegida (ver Figura 9).

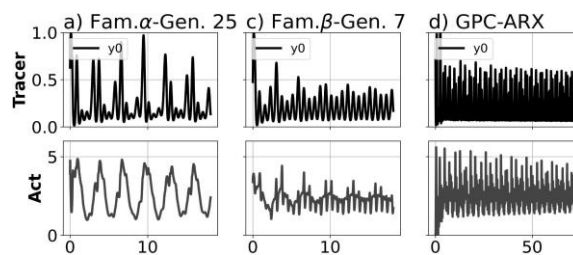


Figura 9: Intensidad de actuación (Act) y trazador en el primer sensor (Tracer) a lo largo del tiempo para: a) MLC seleccionado, b) MLC de una segunda familia de individuos extinta en generación 7, c) GPC-ARX.

Conclusiones

Se estudió el empleo de una técnica de ML conocida como programación genética para obtener un controlador eficiente para una experiencia de escurrimiento alrededor del cilindro. El controlador MLC obtenido logró estabilizar la estela del cilindro con una eficiencia mayor a la de controladores tradicionales GPC-ARX estudiados en trabajos anteriores.

La robustez del controlador MLC fue puesta a prueba mediante la verificación continua de su eficiencia frente a cambios en las condiciones de borde de la experiencia, agregado de ruido en los sensores y en la actuación. En todos los casos el controlador MLC demostró la estabilización de la estela y la recuperación del comportamiento original al cesar las perturbaciones.

Como ventaja adicional, el controlador MLC fue obtenido de manera automática, mediante un proceso iterativo de evolución. Dicho algoritmo encontró una ley de control óptima para

responder a una función de costo sin la necesidad de calibración de parámetros. En contraste, el controlador GPC requirió la definición de un modelo ARX cuyos parámetros de diseño tuvieron que ser ajustados a los resultados de la experiencia mediante sucesivos ensayos.

Referencias

1. Rechenberg, I. (1965). Cybernetic Solution Path of an Experimental Problem. Royal Aircraft Establishment Library Translation.
2. Mehta U.B., Kutler P. (1984). Computational aerodynamics and artificial intelligence. Technical Memorandum 85994, NASA
3. Teo C., Lim K., Hong G., Yeo M. (1991). A neural net approach in analysing photographs in PIV. IEEE Sys. Man. Cybernetics, 3, 1535-1538.
4. Grant I., Pan X. (1995). An investigation of the performance of multi layer, neural networks applied to the analysis of PIV images. Experiments in Fluids 19, 159-166
5. Milano M., Koumoutsakos P. (2002). Neural network modeling for near wall turbulent flow. Journal of Computational Physics, 182, 1-26.
6. Brunton S. L., Noack B. R., Koumoutsakos P. (2020). Machine Learning for Fluid Mechanics. Annual Review of Fluid Mechanics, 52, 477-508.
7. Novati G., Mahadevan L., Koumoutsakos P. (2019). Controlled gliding and perching through deep reinforcement learning. Physical Review Fluids, 4, 093902.
8. Rabault J., Kuchta M., Jensen A., Réglade U., Cerardi N. (2019). Artificial neural networks trained through deep reinforcement learning discover control strategies for active flow control. J. of Fluid Mechanics, 865, 281-302.
9. Benard N., Pons-Prats J., Periaux J., Bugeda G., Braud P., et al. (2016). Turbulent separated shear flow control by surface plasma actuator: experimental optimization by genetic algorithm approach. Exp. Fluids, 57(22), 1-17.
10. D'Adamo, J., González, L. M., Gronskis, A., & Artana, G. (2012). The scenario of two-dimensional instabilities of the cylinder wake under electrohydrodynamic forcing: a linear stability analysis. Fluid Dynamics Research, 44(5)
11. Roca, P., Cammilleri, A., Duriez, T., Mathelin, L., & Artana, G. (2014). Streakline-based closed-loop control of a bluff body flow. Physics of Fluids, 26(4).
12. Popinet, S. (2003). Gerris: a tree-based adaptive solver for the incompressible Euler equations in complex geometries. J. Comput. Phys., 190(2), 572-600.
13. Gronskis, A., D'Adamo, J., Artana, G., Camillieri, A., & Silvestrini, J. H. (2008). Coupling mechanical rotation and EHD actuation in flow past a cylinder. Journal of Electrostatics, 66(1-2), 1-7.
14. Duriez T., Brunton S. L., Noack B. R. (2016), Machine Learning Control–Taming Nonlinear Dynamics and Turbulence, Springer International Publishing, Cham, Switzerland

17

FaCells. Un Estudio Exploratorio de capas LSTM en Clasificadores de Dibujos de Caras

Xavier Ignacio González

Facultad de Ingeniería. Universidad de Buenos Aires

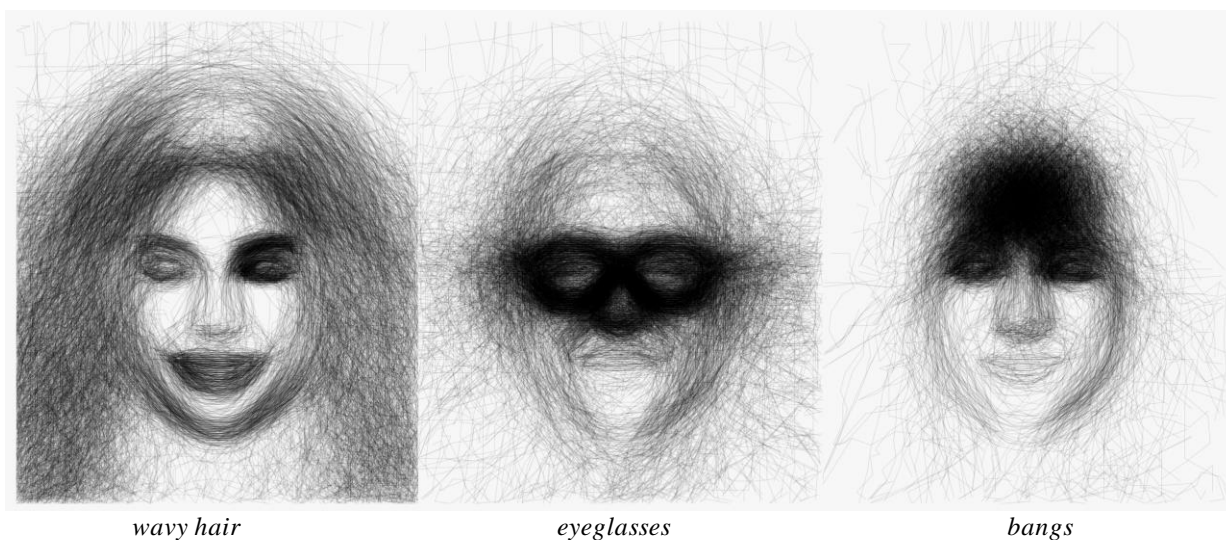


Figura 1. Cada imagen de atributo se forma superponiendo 1000 bocetos aleatorias de caras, filtrados por el resultado de un clasificador LSTM NN, entrenado para reconocer esos atributos.

Abstract

Las líneas son abstracciones mentales humanas. Un conjunto de líneas puede formar un dibujo. Un conjunto de dibujos puede alimentar una capa de entrada de una red LSTM, considerando cada dibujo como una lista de líneas y una línea una lista de puntos. Este artículo propone una exploración en un sentido amplio y artístico. Un experimento comparó diferentes formas de

representar los dibujos a ser ingresados en una red y mostró que un formato absoluto de coordenadas (x, y) fue mejor que uno relativo (D_x, D_y) con respecto a los puntos anteriores, más frecuente en la literatura revisada. Otros experimentos mostraron que, debido a la naturaleza recurrente de las redes LSTM, el orden de las líneas que forman un dibujo es un factor relevante para la entrada en un clasificador LSTM, no estudiado hasta el momento. Un criterio de mínimo de longitud recorrida de "lápiz" para el ordenado de líneas resultó adecuado, de implementación posible mediante una reducción a una instancia particular del 'Traveling Salesman Person' (TSP). La mejor configuración para la clasificación aparece con una capa LSTM que devuelve el valor de estado oculto para cada paso de la entrada, seguido de una capa promedio global a lo largo de la secuencia, antes de la capa densa de salida. Ese resultado guió la idea de eliminar el promedio a la salida de la capa LSTM y devolver una puntuación de atributo por punto, simplemente ajustando las dimensiones de los tensores. Con este ajuste, el modelo detecta un atributo en un dibujo y también reconoce los puntos vinculados a él. Además, al superponer líneas filtradas de retratos, se representa la esencia visual de un atributo. Estos dibujos son lo que acá nombramos FaCells.

Introducción

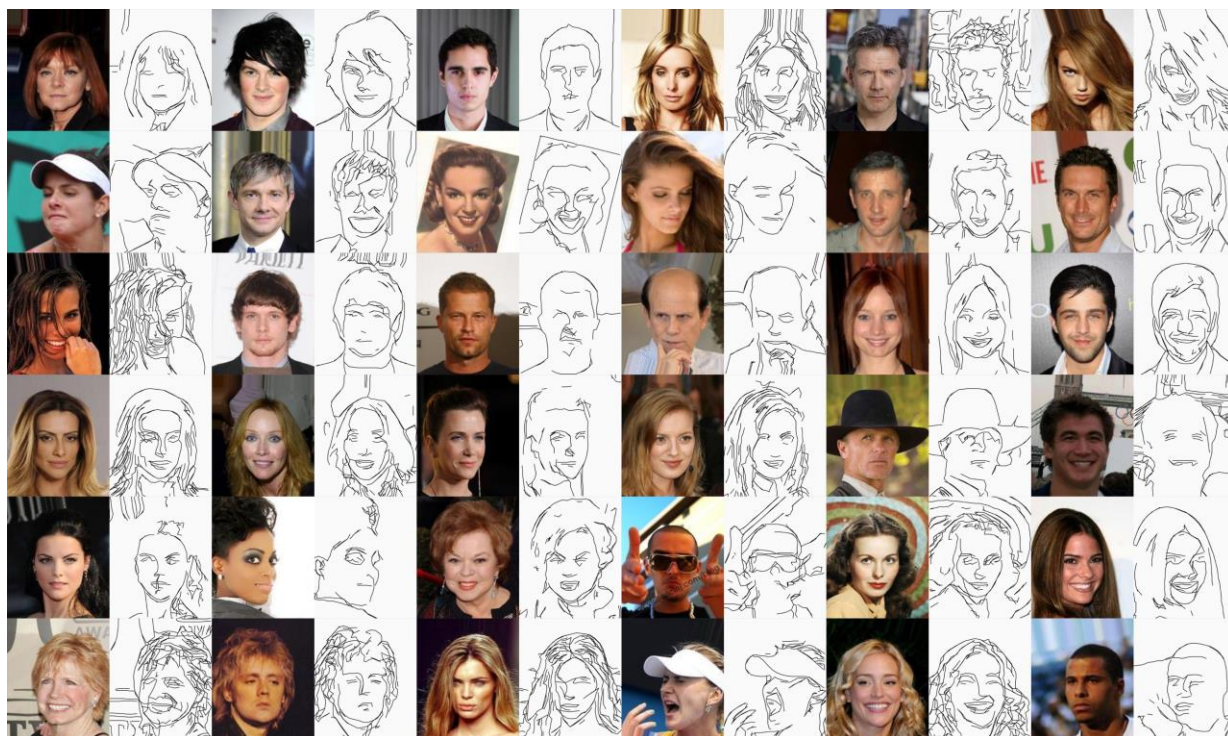


Figura 2. Imágenes y sus dibujos obtenidos por reconstrucción de un detector de bordes

"Una línea es un punto que salió a caminar", una cita de Paul Klee de principios del siglo 20, y nos introduce una idea que este estudio intenta explorar. La línea es posiblemente una de las formas más antiguas de abstracción humana. Posiblemente originada por la necesidad de comunicación visual en las épocas prehistóricas como marcas en una superficie, el dibujo de líneas fue un medio eficiente para transmitir información útil sobre el mundo real, el primer registro visual de las acciones humanas más allá del momento en que sucedieron. Las personas

hoy en día se comunican entre sí a través de un lenguaje escrito que una vez fue esencialmente solo un montón de líneas en una superficie, escribiendo y leyendo letras y palabras. A lo largo de los siglos, lo que podríamos llamar formas de expresión más "realistas", como la pintura, la fotografía y luego el cine, desplazaron al dibujo como principal medio visual para representar y comunicar escenas, objetos o rostros como aquí. En la era digital, el desarrollo de cámaras de fotos y video contribuyó a relegar la idea de representar algo del mundo real como un dibujo, es decir preservando la naturaleza esencial de las líneas.

Este estudio se centra en las líneas que forman los dibujos. Como dijo Paul Klee, son solo puntos que se mueven en un plano, o que evolucionan en el tiempo. Un dibujo puede vivir almacenado como una serie de instrucciones simples: moverse por acá, moverse por allá, encender y apagar, la entrada requerida para producirlo. Incluso representados por tan poca información, los dibujos tienen el poder de formar en nuestros cerebros, a través de nuestros ojos, formas, objetos, símbolos e incluso palabras que pueden expresar casi todo lo expresable.

Los dibujos que adornan las siguientes secciones nacieron del aprendizaje de retratos de celebridades, obtenidos al 'dibujar' las imágenes de CelebA [1], un set de datos con más de 206K fotos etiquetadas con 40 atributos. Para 'dibujarlos', es decir convertirlos de formato ráster (jpg) a vectorial (svg), se reconstruyó iterativamente la salida de un algoritmo de detección de bordes Canny. La Figura 2 muestra las fotos de algunas celebridades con sus retratos.

La evolución nos entrenó para detectar rostros visualmente. La cara de una madre (o padre) es una de las primeras cosas que podemos identificar con nuestra vista. En nuestra cultura, las caras son la reducción visual de nosotros mismos, lo que nos presenta, nuestros ids. Las expresiones faciales enriquecen el conjunto de herramientas que usamos para comunicarnos de manera efectiva con otros humanos, y algunos mamíferos, como perros y gatos. Vemos caras por todas partes, incluso donde sabemos que no las hay, y nos divertimos con eso.¹

Para aprender sobre las caras y sus características, el experimento principal aquí presentado propone clasificar las caras por género, como un objetivo binario (atributo llamado *noMale* en [1]). Vale decir que la noción de género ha cambiado hace tiempo hacia un concepto no binario. Seleccionar un objetivo 'absurdo' para la clasificación nos libera de concentrarnos en la búsqueda del mejor clasificador posible para centrarnos más en estudiar los componentes del modelo y la representación de los datos, los principales objetos de estudio.

Aquí, el dibujo de líneas se refiere esencialmente a un conjunto de líneas, y una línea a un conjunto de puntos, ubicados en un plano. Los dibujos de líneas no pueden ser ingresados directamente a las redes neuronales profundas debido a la naturaleza variable de la cardinalidad de ambos conjuntos, la cantidad variable de líneas en un dibujo, y la de puntos en una línea. Normalmente en los trabajos anteriores, se concatena las líneas en un vector y crea una convención para representar que una línea termina y la siguiente línea comienza. Este conversión permite el procesamiento secuencial de la entrada con longitud variable, como el apropiado para las redes LSTM.

Cuando un dibujo de línea ingresa una red LSTM, el orden de línea generalmente sigue el orden original dado por un dibujante humano. Sin embargo, a veces ese orden no está disponible, como aquí donde un algoritmo construyó los dibujos a partir de fotos. Para cualquier clasificación no debería hacer ninguna diferencia el orden de las líneas si se considera que un dibujo es un concepto estático y no performático (nadie está dibujando una línea en vivo a la vez). Aún así,

¹ <https://www.boredpanda.com/objects-with-faces>

para la clasificación LSMT si es un tema para considerar, debido a la naturaleza recursiva de su arquitectura, así como el orden de las palabras u oraciones es importante al ‘aprender’ un texto.

Además, una concatenación de líneas sin tomar en cuenta el orden tiene un problema frecuentemente observado en otros campos de modelado matemático, por ejemplo, en la optimización por algoritmos genéticos. El problema residen en que muchas representaciones diferentes, o genotipos, designan el mismo individuo, o fenotipo. Un mismo dibujo que tiene n líneas, se convierte en $n!$ diferentes representaciones. La asociación de muchos a uno hace ineficientes los procesos de búsqueda y exploración del vasto espacio generado. La adopción de una forma particular de ordenar las líneas resuelve esta dificultad. El experimento evalúa la conveniencia de ordenar las líneas por un criterio de longitud total mínima, es decir, la distancia euclidiana recorrida más corta por un lápiz hipotético medido no solo mientras se dibuja, sino también al pasar de el final de una línea al inicio de una la línea siguiente.

Además del problema del orden de las líneas, los experimentos también probaron otro punto interesante relacionado con la representación, si es mejor para el aprendizaje seguir un sistema de coordenadas absoluto o un sistema de coordenadas relativo, más frecuente en la literatura, es decir, al definir un punto del dibujo con respecto al punto anterior en la secuencia.

La exploración examina más adelante las redes LSTM y sus capas con una perspectiva generativa. Los resultados observados señalan a una configuración de red que, con algunos retoques en las dimensiones de sus tensores, logra devolver una puntuación de género por punto en el dibujo, además de una puntuación de género global. Un descubrimiento divertido fue utilizar el modelo para reconocer en un retrato líneas masculinas y no masculinas, lo que sea que eso signifique, encontrando una forma expresiva de sintetizar los atributos: las FaCells.

Luego de esta introducción, una sección revisa algunos trabajos relacionados encontrados y comenta algunas fuentes de inspiración. Continuando, la Sección III especifica algunos experimentos para proporcionar información sobre las preguntas planteadas sobre la representación, el ordenamiento de las líneas y las configuraciones al entrenar un modelo LSTM. En la sección IV se informan los resultados obtenido. Y las FaCells se presentan en la Sección V. Parte del código y los datos están disponibles en ².

Trabajos relacionados y fuentes de inspiración

Un paper fundacional y una pieza de arte fue Portrait Drawing de Paul the Robot [2]. Quizás nombrado por el pintor Klee, Paul es una instalación robótica que produce retratos de personas mediante procesos que imitan las habilidades y la técnica del dibujo. Paul no tiene un conocimiento de alto nivel de las estructuras del rostro humano como la boca, la nariz, los ojos.

En cuanto a los trabajos que exploran modelos generativos de líneas, está [3], donde se utiliza un modelo LSTM para sintetizar la escritura cursiva en varios estilos. Además, introducido en [4], sketch-RNN es un framework para construir dibujos basados en dibujos de objetos comunes. Algunos trabajos que estudiaron la obtención de dibujos a partir de fotos son [5] y [6]. En particular, los autores en [7] estudiaron la abstracción de estilo en retratos. El camino inverso, obtener una foto sintética realista a partir de una entrada de dibujo, se estudió en SketchyGAN [8]. El conjunto de datos de fotos y la idea de detectar atributos provienen de [1] a través de este libro [9].

² <https://github.com/xavierign/FaCells>

Métodos y experimentos

Representación

Una cuestión central es la representación adecuada de los dibujos para entrenar redes LSTM, el formato de datos adecuado para ingresar los dibujos en el modelo. Un experimento comparó el entrenamiento de modelos en los que los datos de entrada se codifican de manera diferente. El primer formato a evaluar es una adaptación del utilizado en [4], que fue adaptado de [3]. Según este formato, el origen de las coordenadas se ubica en el centro del boceto del retrato, y cada punto consta de 3 elementos: $(\Delta x, \Delta y, p)$. Los dos primeros son la distancia de desplazamiento en las direcciones x e y desde el punto anterior. El último elemento representa tres estados posibles: $(1, 0, -1)$, indicando el principio, la continuación y el final de una línea, respectivamente. Esta forma de representar dibujos aquí es llamada *relativa*. Alternativamente, un formato con una definición *absoluta* de puntos puede ser más adecuado para el aprendizaje en los casos en que los bocetos están alineados y escalados, como en este caso, ya que cada elemento del boceto de la cara, por ejemplo, ojos, boca, cabello, se ubica aproximadamente en la misma región del lienzo. Este formato define un dibujo como una lista de puntos (x, y, p) , donde x - y son las coordenadas absolutas, y p representa la posición a lo largo de una línea, igual que el caso anterior.

Otro experimento compara otro asunto de la representación: la cuestión del orden de las líneas en un dibujo. En primera instancia, llamada *unsorted*, las líneas se ingresan ordenadas al azar. En el segundo, llamado *sorted*, el orden está dado por el que minimiza la longitud total recorrida, es decir, la distancia recorrida por un hipotético XYplotter (tipo AxiDraw). Este criterio evaluado para el pre-procesamiento de datos busca que las líneas que componen el mismo elemento visual en un dibujo facial, es decir, cejas, mentón, permanezcan cerca a lo largo de la representación. Este experimento compara el entrenamiento del modelo de clasificación con instancias de datos ordenadas y no ordenadas.

Una nota especial merece la tarea de encontrar el orden de líneas en el que la longitud total 'recorrida' es mínima. Es un problema np -hard. Una reducción a una instancia particular del problema del viajante de comercio (TSP) y el uso de or-Tools de Google [10] hicieron posible completar el trabajo en un tiempo aceptable.

Configuraciones LSTM

Además de la representación, el experimento explora diferentes configuraciones de red LSTM bidireccionales para clasificar los retratos faciales por género. Esta familia de modelos, LSTM, fue seleccionada en base al modelo presentado en [4]. El objetivo de la exploración no es encontrar el mejor clasificador LSTM. En cambio, es investigar lo que las redes LSTM entrenadas pueden darnos para entender a los dibujos.

Este trabajo reporta el entrenamiento de modelos con diferentes niveles de complejidad estructural, caracterizados por dos factores: el número de capas LSTM en la red y el número de células en la última capa densa antes de la salida. Las configuraciones entrenadas toman la siguiente nomenclatura. El prefijo *1bi* (*3bi*) nombra una red compuesta, siguiendo la capa de entrada, por 1 LSTM con 256 celdas (una serie de 3 LSTM con 150 celdas cada una). La terminación *1d* (*d40*), designa a las redes que contienen una capa de salida totalmente conectada (una capa totalmente conectada con 40 celdas antes de una capa de salida completamente conectada). Las letras *fs* y *ga* designan un componente de la configuración en

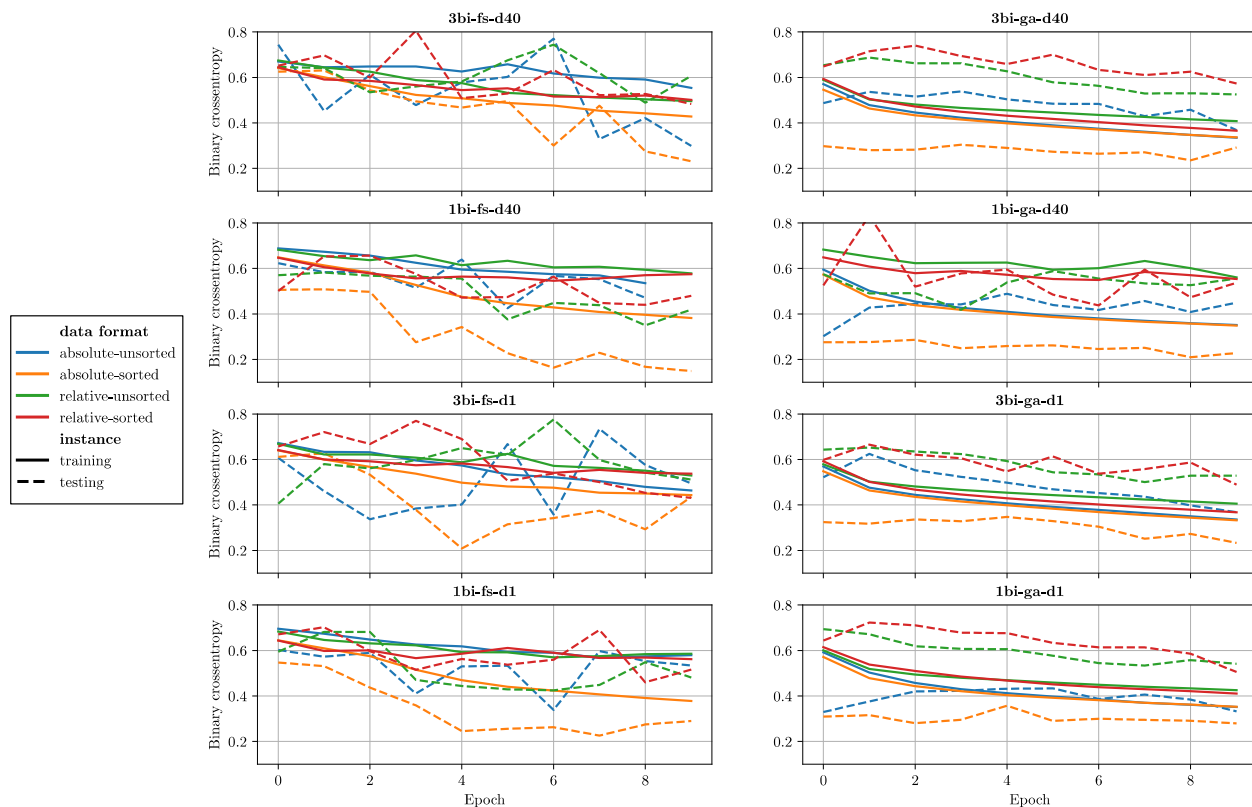


Figura 3. Etapa I de entrenamiento. Cada sub-gráfico muestra una configuración LSTM, para los formatos de datos propuestos, representados por líneas de colores.

Las etiquetas de configuración son:

1bi: una capa LSTM con 256 celdas

3bi: una serie de 3 capas LSTM con 150 celdas cada una

1d: una capa de salida completamente conectada de celda

40d: una capa completamente conectada con 40 celdas, seguida de una capa de salida completamente conectada

fs: devuelve el final state

ga: promedia los valores de los estados.

última capa LSTM que corresponde a si la capa devuelve los valores de estado final de cada celda (*fs*) o la secuencia de valores de estado ocultos para cada punto de entrada, y la secuencia se promedia globalmente y se pasa a la capa densa (*ga*), es decir, el área bajo la curva de la misma longitud que el plano de entrada.

Resultados

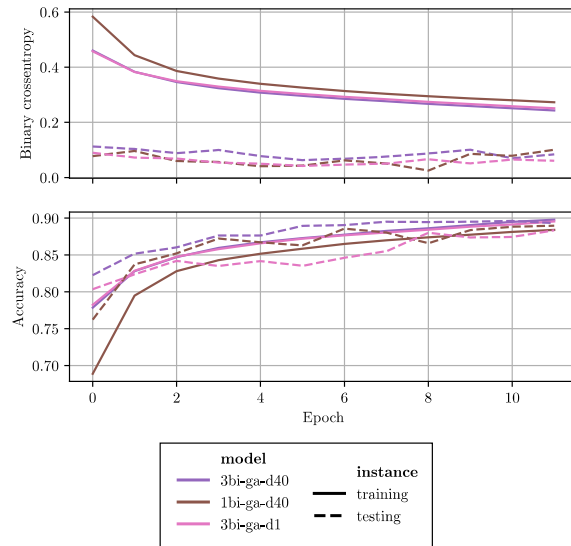


Figure 4. Stage II of training. The best performer LSTM configurations, represented by colored lines, were trained with data in absolute-sorted format. See configuration labels reference in captions in Figure 3.

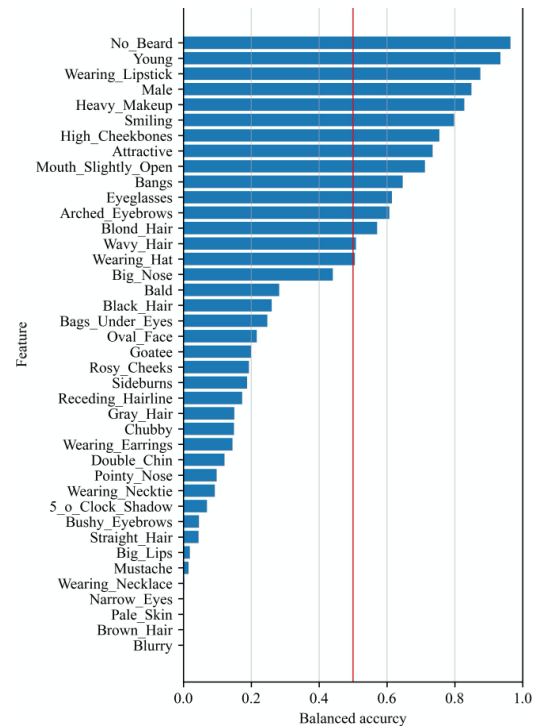


Figure 5. Stage III of training. Report of balanced accuracy by attribute in testing instance of an LSTM configured as 3bi-ga-d40, the last dense layer is also the output, and the input is in absolute-sorted format.

El entrenamiento se divide en etapas: I, II, III. La Etapa I se realiza con aproximadamente el 30% de los dibujos (~ 60K) seleccionados al azar para el entrenamiento y el 15% para las pruebas, y busca comparar los distintos formatos de datos de entrada. La Figura 3 muestra diez épocas de entrenamiento vs. la función de pérdida. El formato de datos *absolute-sorted* supera a los otros tres, que logran un rendimiento uniforme en un nivel menor. En cuanto a las configuraciones de red, las que contienen la función *ga* (global average) logran mejores que las que tienen *fs* (final state). Teniendo en cuenta el formato *absolut-sorted*, las configuraciones de mejor rendimiento son *3bi-ga-d1*, *3bi-ga-d40* y *1bi-ga-d40*, con una entropía cruzada en la décima época de 0.3328, 0.3348 y 0.3484, respectivamente. Pasan a la siguiente etapa de entrenamiento.

La etapa II se muestra en la Figura 4 con diez nuevas épocas de entrenamiento para las tres configuraciones 'finalistas'. En esta etapa, la entrada incluye todo el conjunto de datos (más de 206K) con líneas ordenadas y sistema de referencia absoluto, y divididos en un 95-5% para entrenamiento y pruebas, respectivamente. Aunque los tres tienen un rendimiento bastante similar, *3bi-ga-d1* es ligeramente superior, de acuerdo con la entropía cruzada binaria de las últimas épocas, donde hay una ligera diferencia.

La configuración "ganadora", *3bi-ga-d1*, ajustada para la clasificación multi-etiqueta de los 40 atributos binarios, se vuelve a entrenar con todos los datos en la etapa III. La Figura 5 muestra el 'balance accuracy' logrado después de diez nuevas épocas. Con un 50%, una línea roja

vertical marca el rendimiento mínimo requerido para que un atributo merezca una representación de una FaCell.

El facelss

El modelo de mejor desempeño para clasificar los dibujos faciales por género dio lugar a la idea detrás de las FaCells. Llamado *3bi-ga-d1*, tiene tres capas LSTM, 150 celdas cada una, que devuelven secuencias de la misma longitud que los dibujos. La última salida de la capa LSTM se promedia entre la longitud de entrada. Luego, los 150 promedios se combinan linealmente para calcular la estimación de la probabilidad de que el retrato de entrada sea masculino o *No_Male*. La combinación no es exactamente lineal debido a la función de activación ReLU, pero la idea sigue siendo válida.

Tomemos la célula cuyo peso en la estimación de probabilidad de género es máximo, a partir de la tercera capa LSTM. Esa celda devuelve una secuencia de valores intermedios, y cuanto mayor sea el promedio de ellos, mayor será la probabilidad de no masculinidad, lo que sea que eso signifique. Por lo tanto, en cada punto en el dibujo de la línea de entrada se puede obtener una puntuación estrechamente relacionada con la presencia del atributo. Entonces, además de detectar el atributo, esta puntuación también se puede usar para dibujarlo. Una versión modificada del modelo puede devolver una probabilidad de género por punto del dibujo. Puede anotar cuán masculina puede ser una línea. Interesante.

La Figura 6 visualiza lo que se discutió con cuatro retratos, cada uno anotados con dos atributos. Los gráficos que siguen trazan, en cuatro gráficos de línea, las coordenadas de los puntos de

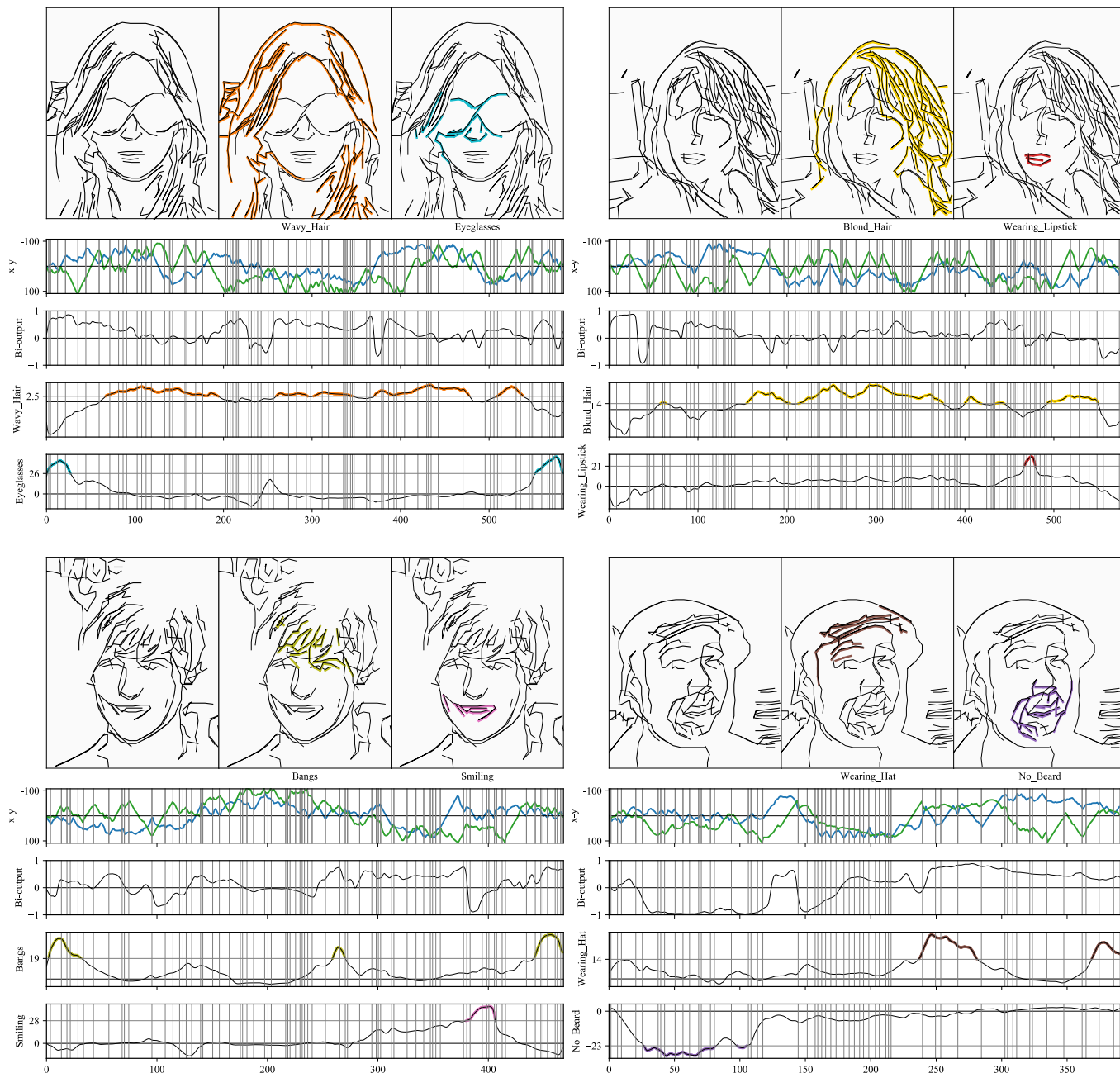


Figura 6. Cuatro retratos con dos atributos anotados cada uno. Debajo de estos, los gráficos de líneas son: **(x-y)** los retratos desplegados a lo largo de su longitud, con puntos conectados como líneas azules y verdes, respectivamente. las líneas grises verticales delgadas marcan el límite entre las líneas. **(Bi-output)** muestra la secuencia devuelta por la primera celda de la tercera capa LSTM con una línea negra. **(Atributo, por ej Bangs)** Muestra la salida del modelo modificado. Un umbral marca los puntos por encima con un color particular. Se utiliza el mismo color en el retrato para anotar las líneas correspondientes.

esbozo, la salida intermedia de una celda LSTM y dos salidas, correspondientes a dos atributos, del modelo modificado. Se define un umbral para determinar las líneas asociadas a cada atributo.

Continuando con esta idea, las FaCells en las Figuras 1 y en el Apéndice I se componen superponiendo los puntos de muchos retratos cuyo puntaje de atributo pasó un umbral. Los atributos seleccionados para la visualización son aquellos que realizan una precisión binaria equilibrada $> 50\%$. Las etiquetas en las figuras del Apéndice siguen la forma 'Atributo X-Y', lo que significa que la FaCells esta generada con X dibujos cuya predicción del Atributo fue positiva y cuyas líneas sobrepasan el umbral Y, o a veces inferior al negativo (Y), para representar el atributo contrario. Conoce a los FaCells.

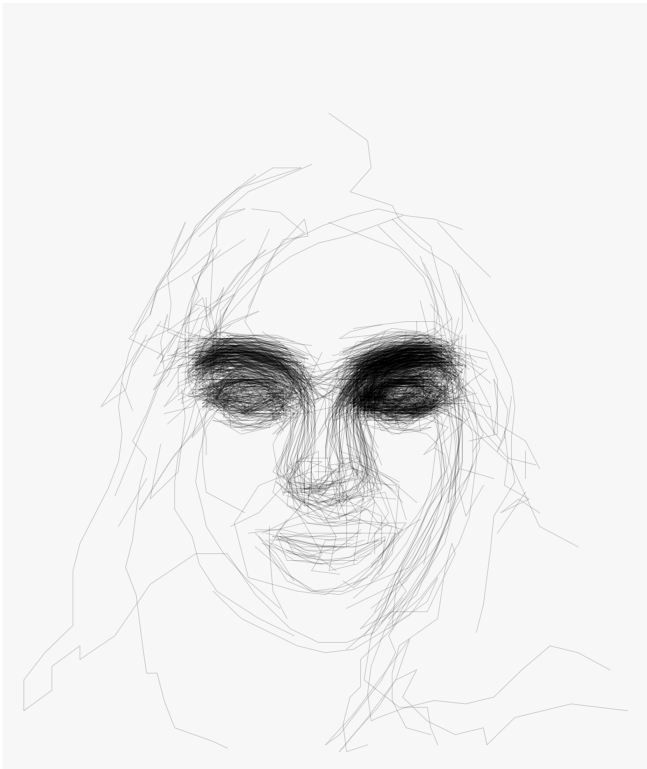
Reconocimiento

Esta investigación fue parcialmente apoyada por peruilh Ph.D. Beca de la Escuela de Ingeniería de la Universidad de BuenosAires. Los modelos fueron entrenados en el clúster Habanero de los servicios de Computación de Alto Rendimiento (HPC) de la Universidad de Columbia.

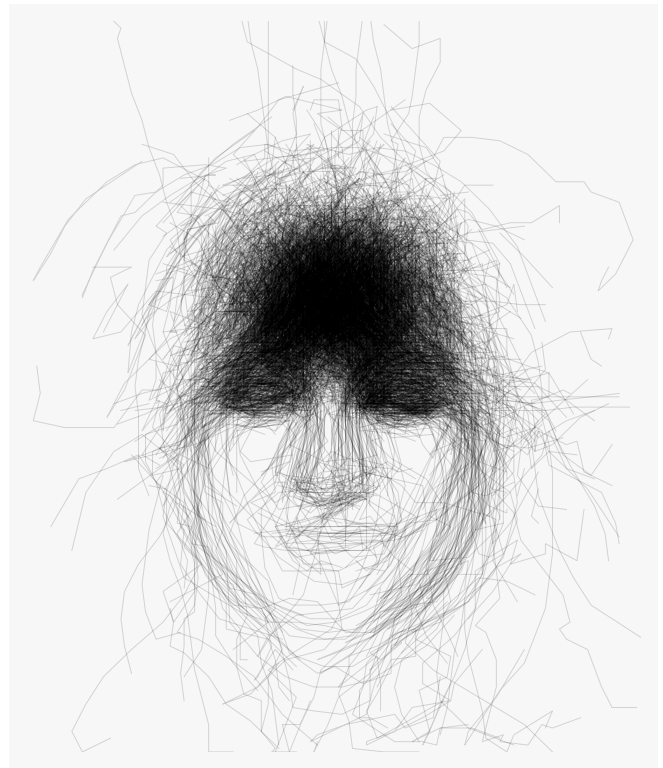
Referencias

- [1] Z. Liu, P. Luo, X. Wang y X. Tang, "Deep learning face attributes in the wild", *Proc. IEEE Int. Conf. Comput. Vis.*, vol. 2015 Inter, pp. 3730–3738, 2015, doi: 10.1109/ICCV.2015.425.
- [2] P. Tresset y F. Fol Leymarie, "Portrait drawing by Paul the robot", *Comput. Gráfico.*, vol. 37, núm. 5, pp. 348–363, 2013, doi: 10.1016/j.cag.2013.01.012.
- [3] A. Graves, "Generating Sequences With Recurrent Neural Networks", pp. 1–43, 2013.
- [4] D. Ha y D. Eck, "A neural representation of sketch drawings", *arXiv Prepr. arXiv1704.03477*, 2017.
- [5] H. Kang, S. Lee y C. K. Chui, "Coherent line drawing", *NPAR Symp. Non-Photorealistic Animat. Hacer.*, vol. 1, núm. 212, pp. 43-50, 2007, doi: 10.1145/1274871.1274878.
- [6] H.C. Tsai, Y. H. Lee, R. R. Lee y H. K. Chu, "Abstracción de línea guiada por el usuario utilizando la coherencia y el análisis de estructuras", *Computación. Vis. Media*, vol. 3, no. 2, pp. 177-188, 2017, doi: 10.1007/s41095-016-0076-y.
- [7] I. Berger, A. Shamir, M. Mahler, E. Carter y J. Hodgins, "Style and abstraction in portrait sketching", *ACM Trans. Graph.*, vol. 32, núm. 4, pp. 1-12, 2013, doi: 10.1145/2461912.2461964.
- [8] W. Chen y J. Hays, "SketchyGAN: Towards Diverse and Realistic Sketch to Image Synthesis", *Proc. Soc. Conf. Computación. Vis. Patrón de reconocimiento.*, pp. 9416–9425, 2018, doi: 10.1109/CVPR.2018.00981.
- [9] D. Foster, *Aprendizaje profundo generativo: enseñar a las máquinas a pintar, escribir, componer y jugar*. O'Reilly Media, 2019.
- [10] I. Google., "Herramientas de optimización de Google (o-herramientas)". [En línea]. Disponible: <https://github.com/google/or-tools>.

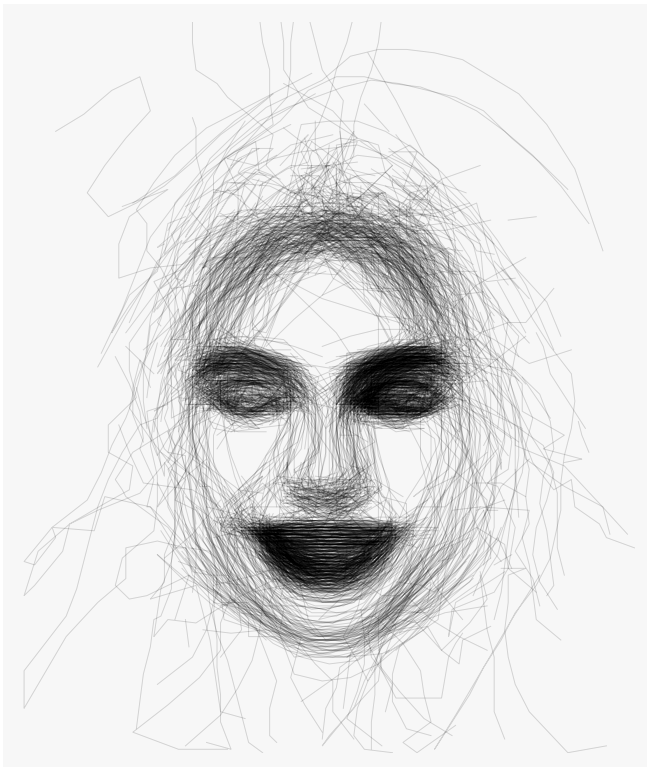
APENDIX I



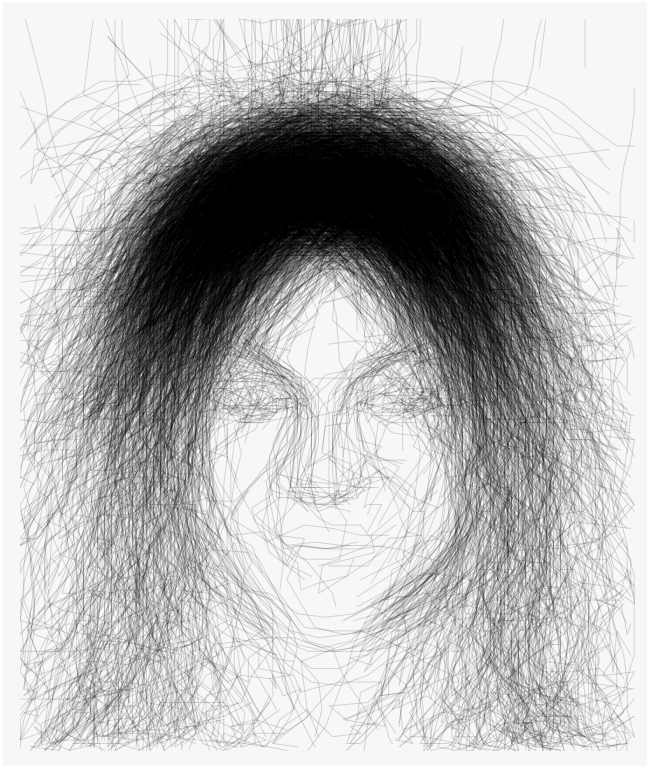
Arched eyebrows 1000-19



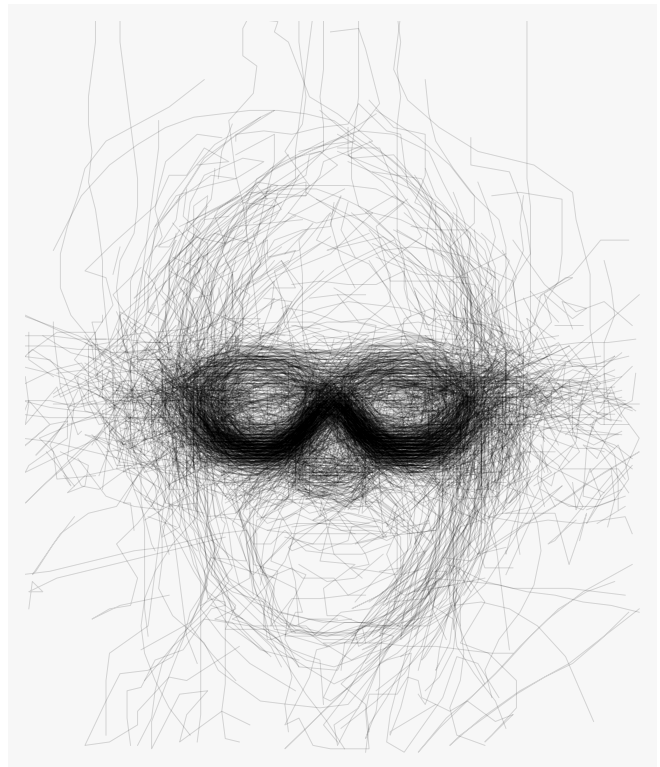
Bangs 1000-28



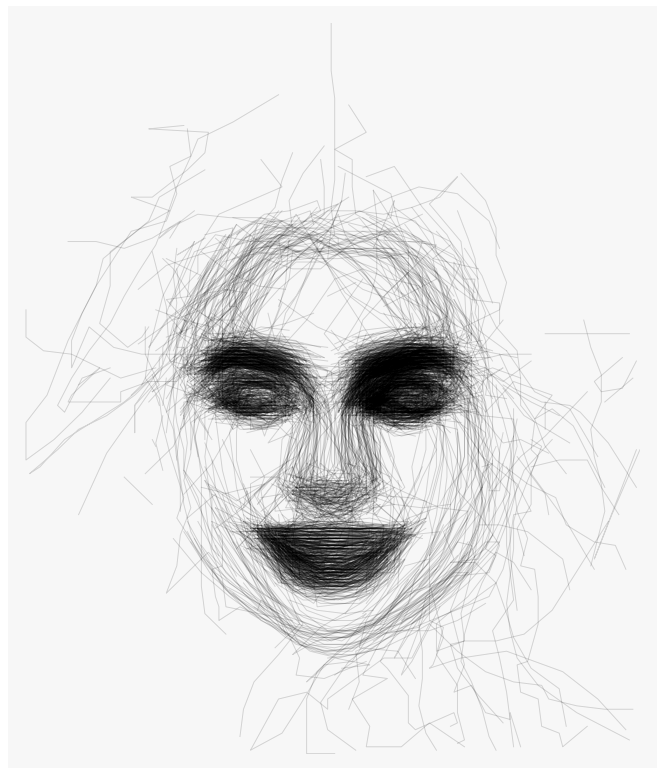
Attractive 1000-9



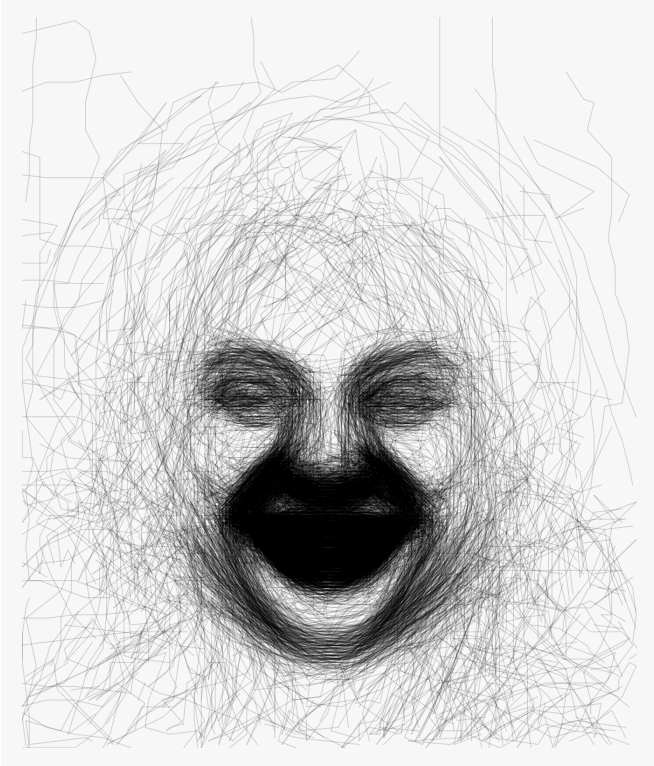
Blond hair 1000-13



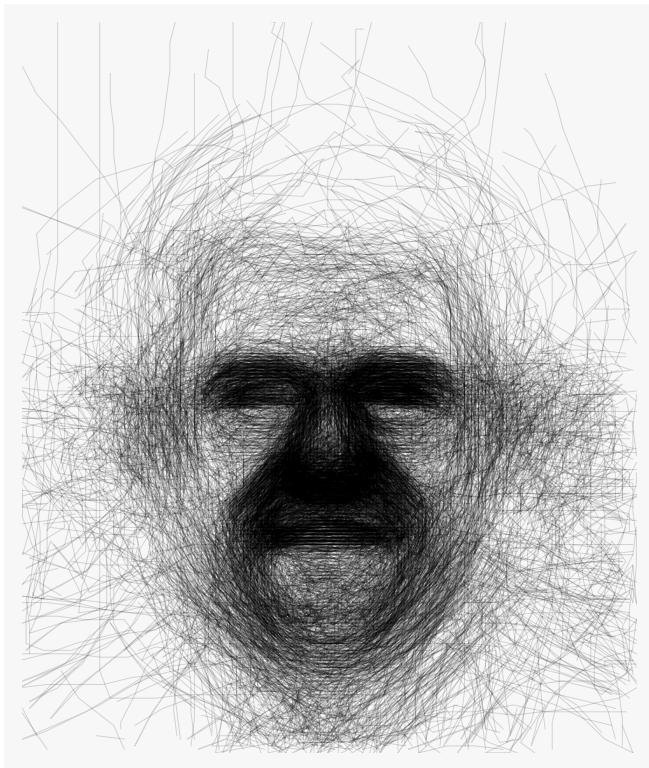
Eyeglasses 1000-35



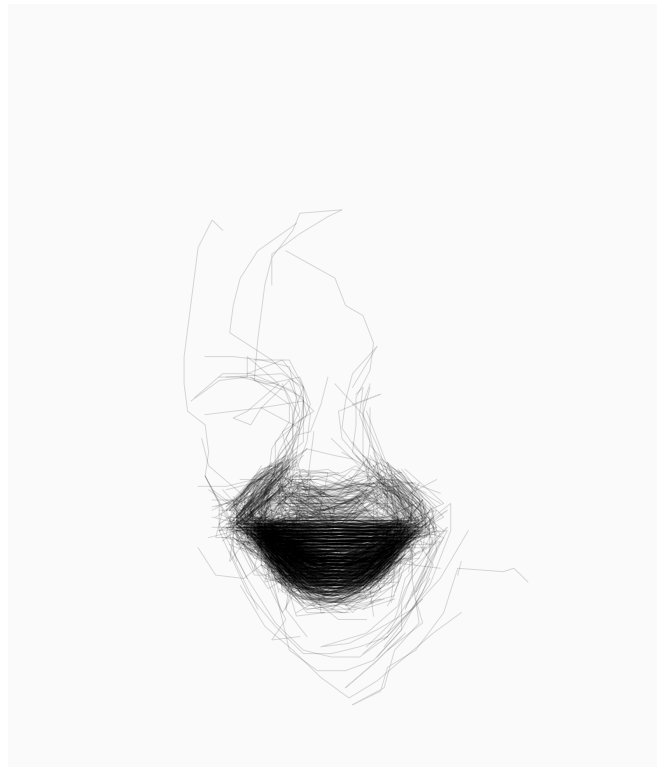
Heavy makeup 1000-24



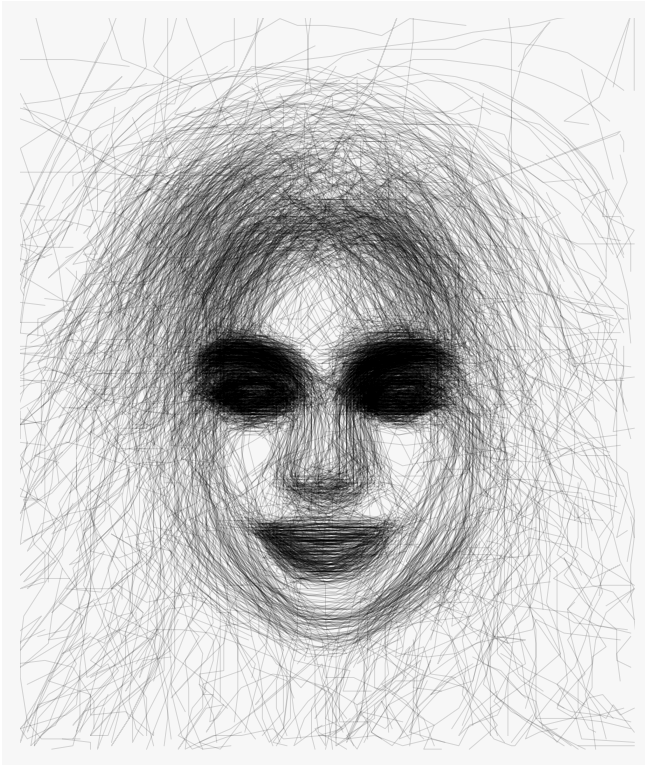
High cheekbones 1000-16



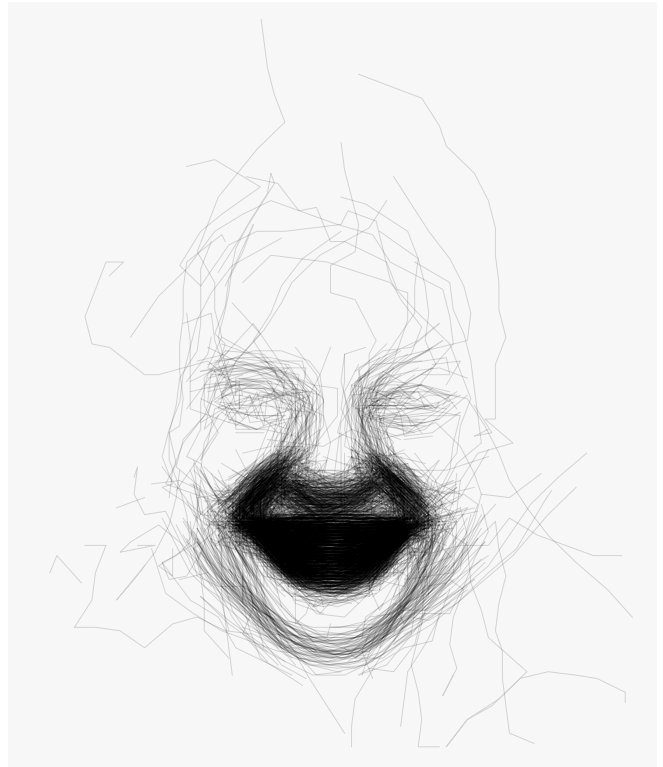
Male 1000-14



Mouth slightly open 1000-27



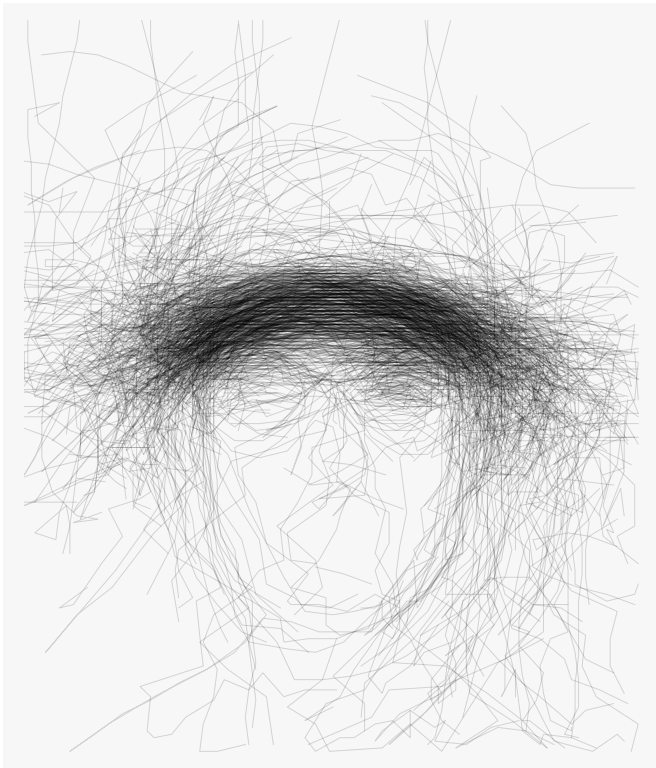
No beard 1000-12



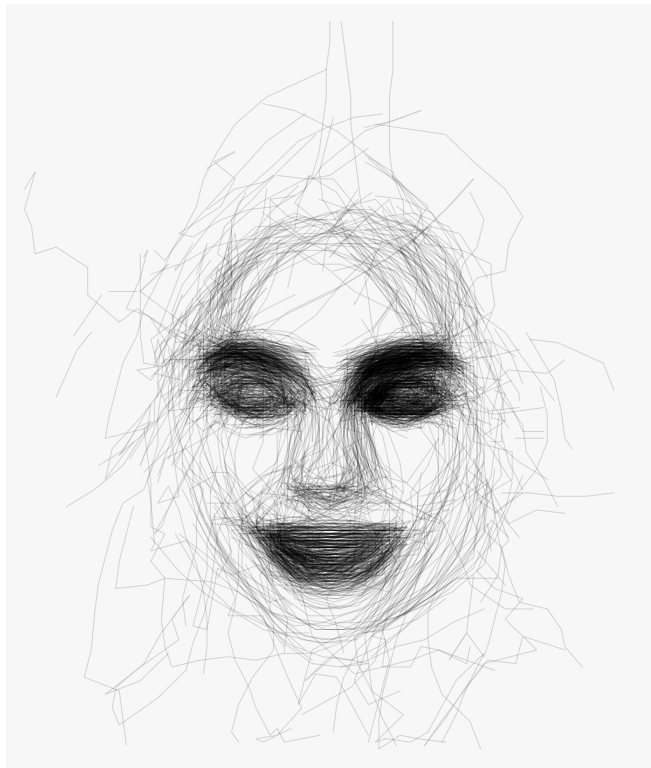
Smiling 1000-33



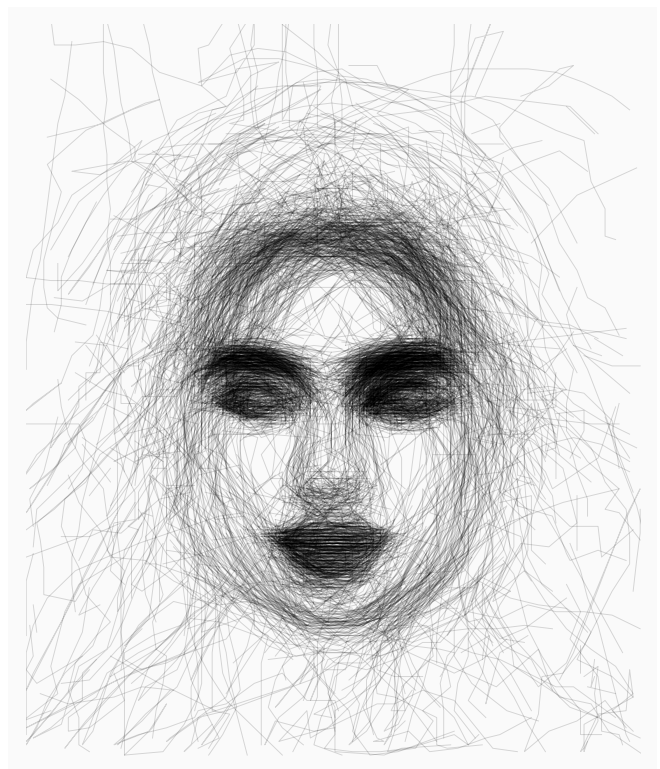
Wavy hair 1000-4



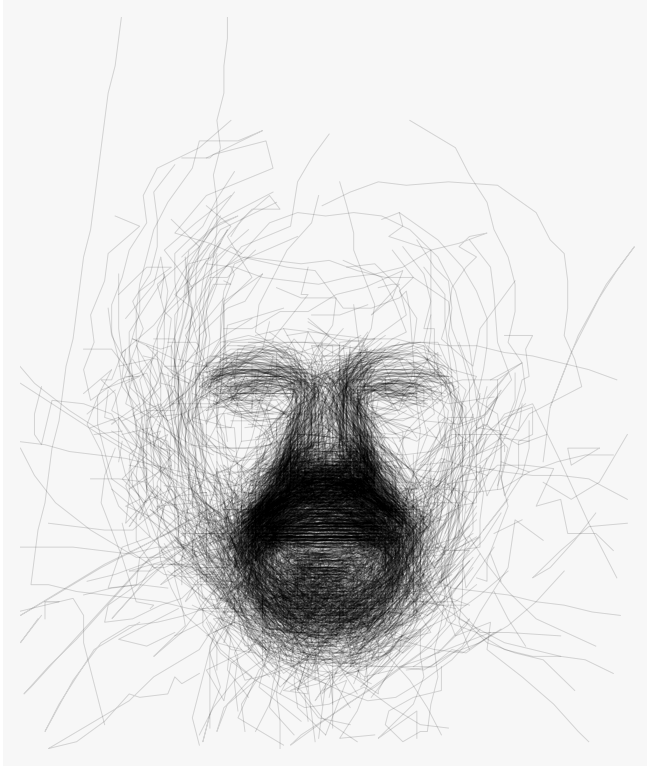
Wearing hat 1000-35



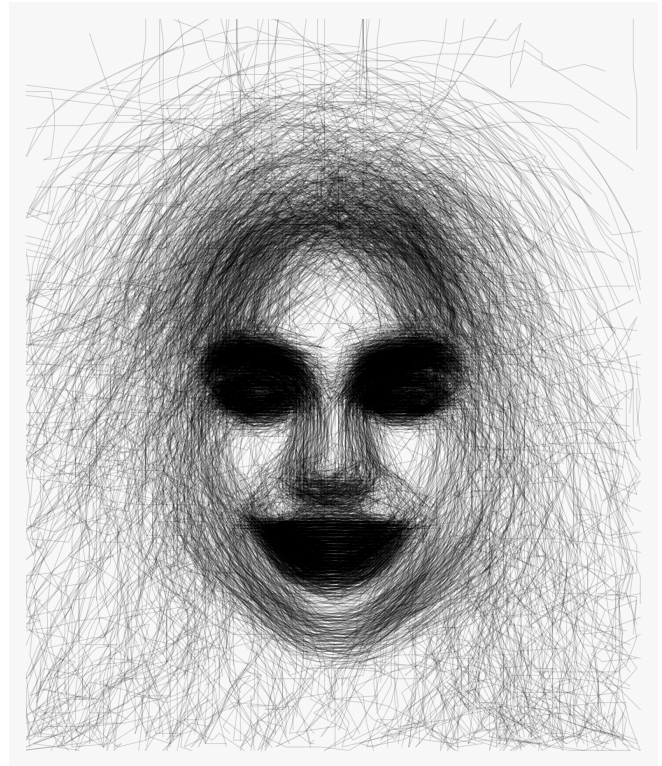
Wearing lipstick 1000-25



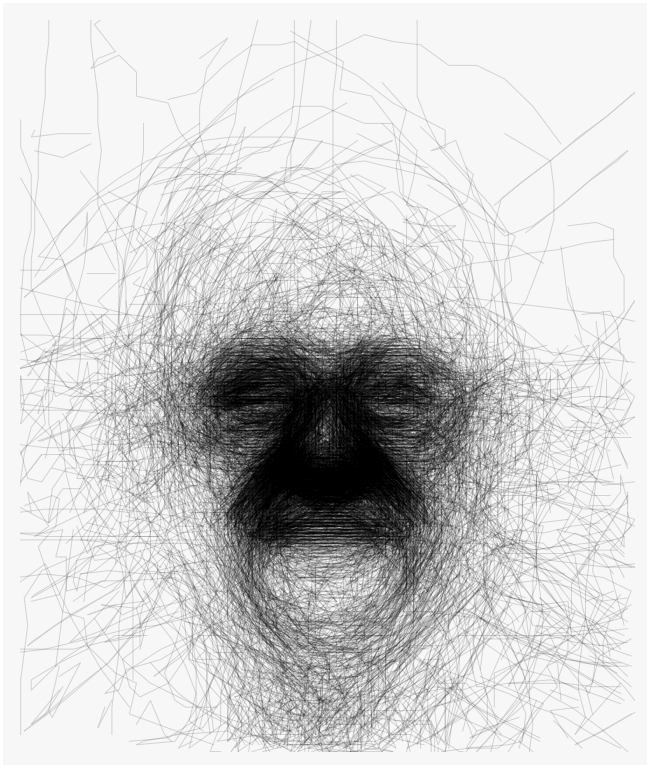
Young 1000-18



Not No beard 1000-(24)



Not Male 1000-(14)



Not Attractive 1000-(9)

18

Técnica “Shift-and-Zoom” para la identificación de materiales dieléctricos

Albert, Raymundo^a; Galarza, Cecilia^{ab}

^a Facultad de Ingeniería – Universidad de Buenos Aires – Argentina

^b Centro de Simulación Computacional – CONICET – Argentina

e-mail: araymundo@fi.uba.ar

Resumen

Los problemas relacionados con una mezcla de señales sinusoidales poco espaciadas en un entorno ruidoso se observan regularmente en ingeniería. Este es el caso de la dispersión medida de un objeto dieléctrico cuando es iluminado por una señal electromagnética UltraWideBand (UWB), donde la señal reflejada se puede caracterizar como una mezcla de señales sinusoidales donde sus frecuencias transporta una gran cantidad de información sobre las características del objeto. La identificación de las frecuencias complejas en la señal reflejada se vuelve relevante para la identificación y clasificación del material. En el caso de las frecuencias poco espaciadas, las estimaciones son vulnerables a desviarse en gran medida de sus valores reales. Para superar este problema, se utiliza una estrategia para aumentar artificialmente la separación de frecuencias antes de aplicar una técnica de estimación espectral. Finalmente, utilizamos esta técnica en datos experimentales. En particular, tendremos en cuenta un problema de dispersión electromagnética de cilindros de poliamida para analizar su contenido de humedad cuando son iluminados por una señal UWB.

Abstract

Problems dealing with a mixture of closely spaced sinusoidal signals in a noisy environment are regularly observed in engineering. This is the case of the scattering collected from a dielectric target illuminated by an UltraWideBand (UWB) signal, where the particular mixture is a feature that characterized the target. Identification of the complex frequencies embedded in the scattered signal becomes relevant for target identification and classification. In the case of closely spaced frequencies, the estimates are vulnerable to largely deviate from their true values. To overcome this problem a strategy to artificially increase the frequency separation is used before apply a spectral estimation technique. This technique is applied to a problem of electromagnetic scattering to identified the frequencies of dielectric objects when it is illuminated by an ultra-wideband signal.

Palabras clave: Análisis espectral, Método de expansión en singularidades, UWB, Estabilidad numérica.

Introducción

Un fenómeno de dispersión ocurre cuando una onda electromagnética golpea un objeto pequeño. El campo eléctrico que se propaga en nuevas direcciones diferentes a la incidente es el campo disperso. Los modelos matemáticos para describir este proceso son muy complejos porque requieren la solución de las ecuaciones de Maxwell. Idealmente, cuando el campo electromagnético incidente se modela como un impulso en el dominio del tiempo, la representación clásica introducida en [1] describe al campo dispersado como una suma de exponenciales complejas, donde las frecuencias resonantes o modos naturales dependen del tamaño, forma y propiedades eléctricas del objeto iluminado. Los sistemas de banda ultra ancha (UWB) son adecuados para excitar los modos naturales del objeto iluminado. Dado que estos son independientes de la posición del objeto, se han propuesto tomar las frecuencias naturales como características para a clasificación del blanco [5] En varios contextos industriales, una aplicación relevante es la determinación del contenido de humedad en muestras de materiales como poliamidas [6] En particular, se demostró que las propiedades mecánicas de una muestra de poliamida son muy sensibles a su contenido de humedad [8]. La clasificación a través de frecuencias naturales utilizando sistemas impulsivos de UWB es una estrategia factible para detectar el contenido de humedad [9]. Este procedimiento equivale a resolver un problema de estimación espectral construido a partir de las muestras del campo disperso. Sin embargo, los modos de las muestras de poliamida y cualquier material dieléctrico en general, se agrupan en una región particular del plano complejo. Además, la energía asociada con cada modo depende de las posiciones del punto donde se envía el campo incidente, el punto de observación y el objeto analizado. Este hecho implica que es posible que algún modo natural no se observe de manera significativa, o que se puedan agrupar varios modos diferentes, lo que hace que la tarea de identificación del modo sea un problema de estimación espectral desafiante. En particular, se requieren técnicas de estimación espectral capaces de hacer frente a un orden de modelo incierto y una baja relación señal / ruido.

Los métodos de subespacios [10] son herramientas adecuadas para la estimación espectral. Los enfoques tradicionales incluyen la estimación de parámetros de señal mediante la técnica de invariancia rotacional (ESPRIT) [11] o el método del matrix pencil (MPM) [12] , donde las frecuencias estimadas se obtienen mediante la solución de un problema de autovalores generalizados. Generalmente, el cálculo de los autovalores puede volverse inestable o las soluciones pueden no existir [2] . Este problema es particularmente grave cuando el número de exponenciales amortiguadas en la suma es muy grande y las frecuencias complejas están próximas entre sí en el plano complejo [3] . Usando el teorema de Kronecker, que establece que el número de componentes en una suma finita de señales sinusoidales coincide con el rango de una matriz de Hankel construida a partir de la señal muestreada, los autores en [4] formularon un procedimiento de dos etapas para hacer frente a la perturbación de la señal. Sin embargo, todavía se requiere la solución numérica al problema de los autovalores generalizados. En [7], hemos analizado la estabilidad numérica de este problema de autovalores generalizados y observamos que la sensibilidad de cada autovalor depende de dos factores: el tamaño de las amplitudes asociadas con los autovalores y las distancias entre sí. Para que cálculo numérico de autovalores sea más estable se propuso una estrategia llamada “shift-and-zoom” donde la señal observada es preprocesada realizando un procesamiento de múltiples velocidades de muestreo.

En este trabajo, resumimos el análisis de sensibilidad del problema de autovalores, y usamos la estrategia “shift-and-zoom” para identificar las frecuencias de cilindros dieléctricos finitos iluminados por señales Impulsivas UWB. El documento está organizado

de la siguiente manera. En la sección 0 establecemos los resultados sobre la estabilidad numérica del problema de autovalores generalizados. La estrategia de “shift-and-zoom” se presenta en la Sección 0. Finalmente, en la Sección 0, obtenemos los modos naturales de cilindros finitos de poliamida usando un sistema UWB impulsivo para iluminar los cilindros y recolectar la energía dispersa en una dirección particular.

Análisis de la solución numérica

Generalmente, la estimación espectral se realiza en un procedimiento de dos etapas. En el primer paso, se elimina la señal de ruido y se estima el orden del modelo. En el segundo paso, se obtienen las frecuencias complejas y sus amplitudes. Esta sección se centra en este segundo paso. En particular, analizamos qué tan sensibles son las frecuencias complejas estimadas cuando la señal observada está sujeta a pequeñas perturbaciones. Para eso, considere la señal

$$x_k = \sum_{i=1}^n c_i z_i^k, k = 0, 1, \dots \quad (1)$$

donde n es un entero finito conocido, $z_i \in \mathbb{C}$ es una frecuencia resonante compleja desconocida y $c_i \in \mathbb{C}$ es la amplitud asociada a ella. Dado $m \geq n > 0$, se define la $(m+1) \times n$ - matriz de Hankel como

$$H = \begin{bmatrix} x_0 & x_1 & \dots & x_{n-1} \\ x_1 & x_2 & \dots & x_{n-2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_m & x_{m+1} & \dots & x_{m+n-2} \end{bmatrix}$$

Un resultado clásico establece que las frecuencias z_i son soluciones de

$$H_f v = z H_l v, \quad (2)$$

donde las matrices H_f y H_l se obtienen a partir de H eliminando su primera y última fila respectivamente.

Cuando la señal se obtienen a partir de datos experimentales las matrices H_f y H_l están sujetas a perturbaciones. Considerando pequeñas variaciones en un entorno del origen, formulamos el siguiente teorema:

Teorema: Sean $H_f(\varepsilon)$ y $H_l(\varepsilon)$ funciones diferenciables que representan versiones ruidosas del par (H_f, H_l) . Se asume que para cada ε en un entorno del origen el autovalor $z_i(\varepsilon)$ y los autovectores a izquierda y derecha existen y satisfacen

$$\begin{aligned} H_f(\varepsilon) v_i(\varepsilon) &= z_i(\varepsilon) H_l(\varepsilon) v_i(\varepsilon), \\ w_i^H(\varepsilon) H_f(\varepsilon) &= z_i(\varepsilon) w_i^H(\varepsilon) H_l(\varepsilon). \end{aligned}$$

Luego,

$$|z_i| \leq E \frac{(1 + |z_i|) \varepsilon_i}{|c_i| |P_i(z_i)|^2} \quad i = 1, \dots, n \quad (3)$$

donde $E = \max\left(\left|\frac{\partial H_f}{\partial \varepsilon}\right|, \left|\frac{\partial H_l}{\partial \varepsilon}\right|\right)$, $P_i(z) = \prod_{l=1, l \neq i}^n (z - z_l)$ es un polinomio en z de grado $n-1$, y $\varepsilon_i = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} |P_i(e^{j\omega})|^2 d\omega$.

Demostración: ver [7].

Este teorema destaca el hecho de que la estimación de los autovalores es sensible a su energía y a la distancia a los otros autovalores. Este es un problema preocupante al estimar modos débiles o modos que se agrupan en una región pequeña.

Estrategia de estimación

Considerando la siguiente representación de la señal medida

$$y(t) = \sum_{i=1}^n c_i e^{\xi_i t} + w(t) \quad (4)$$

donde $\xi_i = \gamma_i + j2\pi\nu_i$ es una frecuencia compleja, y $w(t)$ es el término de ruido aditivo. Asumimos que el orden n es conocido. El objetivo es obtener las frecuencias usando la versión muestreada $y_k = y(kT_s)$.

Una técnica eficiente para mitigar el efecto del ruido sobre y_k es resolviendo el siguiente problema de optimización propuesto en :

$$\min_{\hat{x}} \sum_k |y_k - \hat{x}_k|^2 \quad (5)$$

sujeto a $\text{rank}(H(\hat{x})) = n$.

En principio, se suele usar \hat{x}_k para obtener las frecuencias resolviendo (2). Sin embargo, \hat{x}_k también está sujeto a perturbaciones debido a los errores numéricos en la solución (5). De acuerdo con el Teorema 1, las perturbaciones sobre \hat{x}_k pueden ser críticas si los modos naturales están agrupados muy cerca entre sí. En este caso, suponga que la señal observada tiene su contenido espectral concentrado en $Y = (\nu_{\min}, \nu_{\max})$. Defina $\nu_c = \frac{\nu_{\max} - \nu_{\min}}{2}$ y

$$y_k^{bb} = y_k e^{-j2\pi\nu_c k T_s}$$

La señal y_k^{bb} se conoce como el equivalente de banda base de y_k . Sea Q un escalar tal que $|\nu_{\max} - \nu_{\min}|Q \leq \frac{1}{T_s}$. Ahora, es posible decimar la señal y_k^{bb} por un factor de Q para obtener $y_k^{bb,D}$ como muestra la Fig. 1. Realizando un submuestreo, se está haciendo un "zoom" en la región donde se encuentran los modos, separando artificialmente los modos. $\{z_i^{bb,D} = e^{(j2\pi\nu_i)QT_s}, i = 1, \dots, n\}$. Como resultado, la cota de dada en (3) se reduce, dando robustez a las soluciones en (2) y una mejor precisión en la estimación espectral.

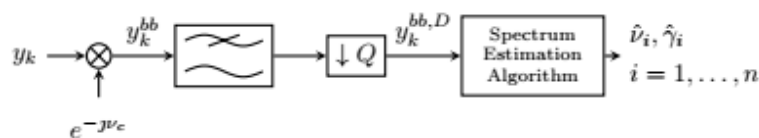


Figura 1: Esquema "Shift-and-Zoom".

Datos experimentales

En esta sección, mostraremos los resultados del procesamiento de datos experimentales utilizando el procedimiento destacado en la sección anterior. En particular, utilizamos un sistema UWB impulsivo para iluminar cilindros de poliamida para analizar su contenido de humedad. El sistema experimental se muestra en la Fig. 2 Tiene un transmisor y un receptor, ambos operando a 1.9GHz como frecuencia central con un ancho de banda de 1GHz. Los detalles sobre la configuración experimental se pueden encontrar en [9] . El transmisor ilumina el cilindro y la antena receptora mide el campo dispersado proveniente del cilindro. Hemos probado dos cilindros idénticos de nailon 6 cuyo radio es de 5 cm y su altura 6.5 cm. Uno de los cilindros contiene un 0% de agua mientras que el otro 2% en volumen. El objetivo es diferenciar entre ambos cilindros estimando sus modos naturales.

Para medir las señales de dispersión, se envía un pulso rectangular con un tiempo de repetición de pulso (PRT) de 100 nseg y una trama de 9 mseg. Luego, cada intervalo de 0,1 mseg del cuadro total se promedia para obtener una medición. Los cilindros están ubicados a 40cm de las antenas y se realizaron varias mediciones moviendo el cilindro horizontalmente entre -10° y 10° respecto a las antenas. Además, se realizaron mediciones sin cilindros con el fin de eliminar el ruido introducido por los reflejos en la habitación.

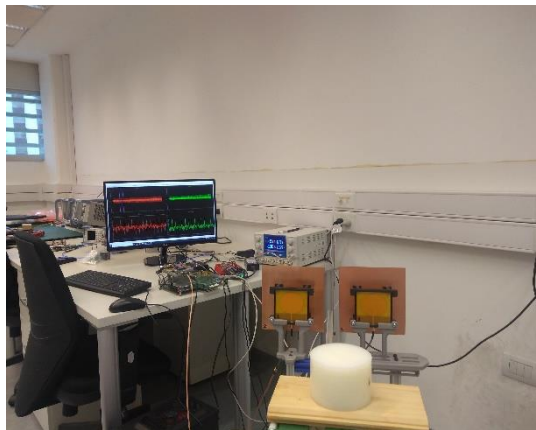


Figura 2: Banco de pruebas para mediciones.

La Fig. 3 muestra las realizaciones de dos mediciones. Una corresponde a la señal de dispersión proveniente del cilindro seco, mientras que la otra corresponde al cilindro húmedo. Observamos que en los primeros 20 nseg las dos señales presentan un pico muy fuerte. Este pico está relacionado con los reflejos especulares de los cilindros.

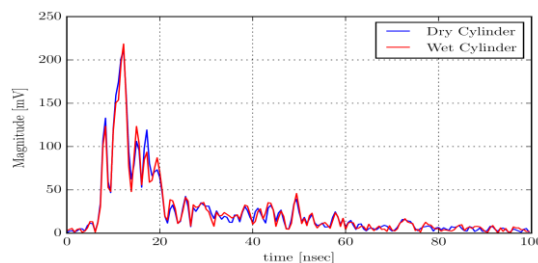


Figura 3: Señal medida para cilindros con 0% y 2% de contenido de humedad.

Después de los 20 nseg, las dos señales comienzan a mostrar algunas diferencias. Es aquí donde la dispersión depende en gran medida de la composición del cilindro.

Se notó que el contenido espectral se concentra en $Y = (0,0.5]$ GHz . En particular, los modos se agrupan en 5 intervalos de frecuencia diferentes que definimos de acuerdo con la Tabla 1. Al aplicar la estrategia de “shift-and-zoom”, usamos un factor de submuestreo $Q = 2$ en cada intervalo.

Tabla1: Intervalos de frecuencias.

	$\nu_{c,i}$ (GHz)	$\nu_{i,min}$ (GHz)	$\nu_{i,max}$ (GHz)
γ_1	0.05	0.00	0.10
γ_2	0.15	0.10	0.20
γ_3	0.25	0.20	0.30
γ_4	0.35	0.30	0.40
γ_5	0.45	0.35	0.50

En la Fig. 4 Se muestran los autovalores con y sin la técnica “shift-and-zoom” con los intervalos de frecuencia en el plano complejo para las señales que corresponden a la dispersión del cilindro con 0% agua. Vemos que cuando no se aplica la técnica, los autovalores estimados se distribuyen por toda la banda de frecuencia, mientras que cuando se aplica “shift-and-zoom” podemos reconocer la ubicación de diferentes autovalores. En la Fig. 5 observamos el mismo fenómeno con el análisis del cilindro con 2% agua.

Se debe señalar que a a partir de las Figs 4,5 los autovalores encontrados son independientes de los ángulos de aspecto. Existe una pequeña propagación que se debe al ruido que no se ha podido filtrar en la primera etapa. Aún así, podemos reconocer pequeños grupos donde se pueden encontrar los autovalores.

Finalmente, comparamos los autovalores encontrados usando la técnica de “shift- and-zoom” para los dos cilindros. Los autovalores se pueden observar en la Fig. Como era de esperar, los autovalores son muy similares ya que los cilindros tienen tamaños iguales y su concentración de agua no es muy diferente entre sí. Sin embargo, los autovalores no coinciden completamente y se pueden utilizar como características para la clasificación de blancos.

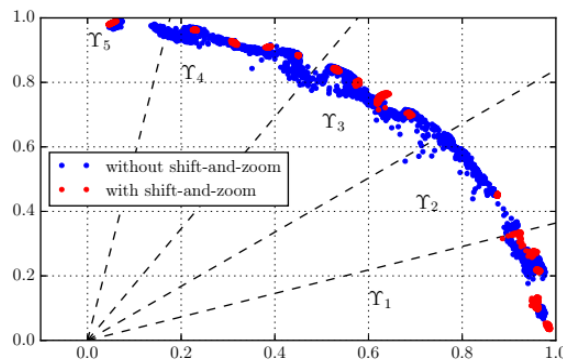


Figura 4: Autovalores para cilindro con 0% agua.

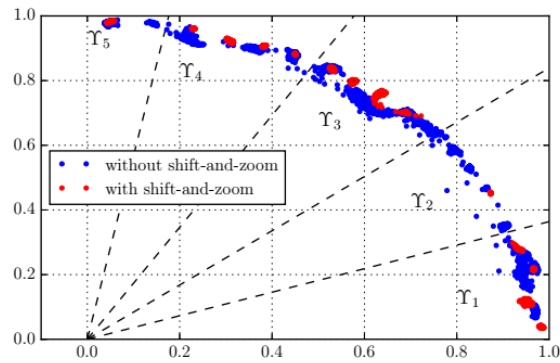


Figura 5: Autovalores para cilindro con 2% agua.

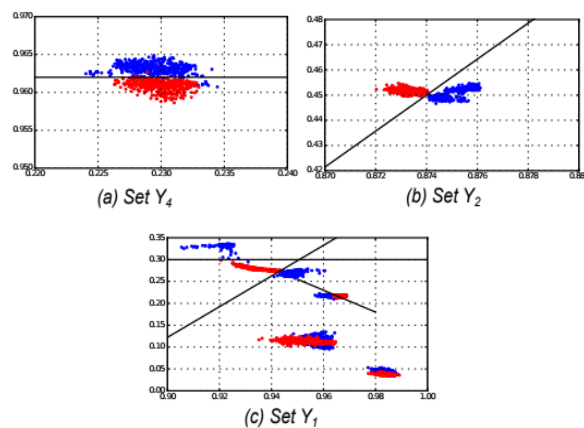


Figura 6: Autovalores cilindro con 0% agua (puntos Azules), cilindro con 2% agua (puntos Rojos)

Conclusiones

La estimación de frecuencias se vuelve vulnerable ante pequeñas perturbaciones en los datos observados cuando las componentes de frecuencias son muy débiles y/o la distancia entre ellos es pequeña. La estrategia de “shift-and-zoom” hace frente a este último problema mejorando el espaciado entre frecuencias complejas re-muestreando la la señal observada. Esta estrategia se aplicó para identificar las frecuencias naturales de dos cilindros de misma forma pero con diferente concentración de agua con el fin de encontrar características que posibiliten poder clasificar entre los diferentes blancos.

Referencias

- [1] Baum, C. E., 1971. *On the singularity expansion method for the solution of electromagnetic interaction problems*. Defense Technical Information Center, .
- [2] Boutry, G.; Elad, M.; Golub, G. H. and Milanfar, P. (2005). *The Generalized Eigenvalue Problem for Nonsquare Pencils Using a Minimal Perturbation Approach*, SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications 27 : 582-601.
- [3] Cuyt, A.; Tsai, M.; Verhoye, M. and Lee, W. (2018). *Faint and clustered components in exponential analysis*, Applied Mathematics and Computation 327 : 93 - 103.

- [4] **Andersson, F.; Carlsson, M.; Tourneret, J. and Wendt, H. (2014).** *A New Frequency Estimation Method for Equally and Unequally Spaced Data*, IEEE Transactions on Signal Processing 62 : 5761-5774.
- [5] Bannis, M. H.; El-Hefnawi, F. M.; Kader, H. M. A. E.; ElMahgoub, K. and Elsherbeni, A. Z. (2014). *Breast cancer detection and identification using prony's method*, : 1926-1927.
- [6] **Schimmer, O.; Gulck, A.; Daschner, F.; Piotrowski, J. K. and Knochel, R. H. (2005).** *Noncontacting determination of moisture content in bulk materials using sub-nanosecond UWB pulses*, IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques 53 : 2107-2113.
- [7] **Albert, R. and Galarza, C. (2019).** *Spectrum estimation using frequency shifting and decimation*, IET Signal Processing .
- [8] **Launay, A.; Marco, Y.; Maitournam, M. and Raoult, I. (2013).** *Modelling the influence of temperature and relative humidity on the time-dependent mechanical behaviour of a short glass fibre reinforced polyamide*, Mechanics of Materials 56 : 1 - 10.
- [9] **Altieri; Bouza; Maya and Galarza. (2020).** *Design and Evaluation of an Impulsive Ultra-Wideband System for Estimating the Moisture Content of Polyamide Targets*, IEEE Trans. Instrum. Meas. .
- [10] Stoica, P. and Moses, R., **2005.** *Spectral Analysis of Signals*. Pearson Prentice Hall, .
- [11] **Roy, R. and Kailath, T. (1989).** *ESPRIT-estimation of signal parameters via rotational invariance techniques*, IEEE Transactions on Acoustics, Speech, and Signal Processing 37 : 984-995.
- [12] **Hua, Y. and Sarkar, T. (1990).** *Matrix pencil method for estimating parameter of exponentially damped/undamped sinusoids in noise*, IEEE Transactions on Acoustics Speech and Signal Processing 38 : 814-824.

19

Diseño y evaluación de un sistema Ultra-Wideband impulsivo para estimar el contenido de humedad de blancos de poliamida

Bouza, M. ^a; Altieri, A.O. ^{a,b} ; Galarza, C.G. ^{a,b}

^a Facultad de Ingeniería, Universidad de Buenos Aires

^b CSC Conicet

Contacto: mbouza@fi.uba.ar

Resumen

Este trabajo presenta el diseño de una plataforma Ultra-Wideband impulsiva, desarrollada para el sensado remoto de blancos dieléctricos. En particular, haremos uso de esta plataforma para estimar el contenido de humedad en blanco de poliamida. Se presentan los principales aspectos del diseño de la plataforma, junto con las mediciones realizadas para caracterizar al prototipo. Se analiza y valida también la potencia de la plataforma para poder estimar niveles de humedad, utilizando para ello blancos de Nylon 6 utilizando algoritmos de regresión no lineales. Los resultados experimentales muestran que la plataforma presentada es capaz de estimar el contenido de humedad de la muestra con buena precisión, incluso cuando el blanco y el ambiente no son completamente conocidos.

Abstract

This paper presents the design of an impulsive ultra-wideband test-bed, developed for remote sensing of dielectric targets. The platform is used for estimating the moisture content in polyamide targets. The main aspects of the design are presented, together with measurements of the constructed prototype. The capability of the platform to estimate the moisture content is explored and validated through measurements of Nylon 6 targets through a non-linear regression algorithm. The experimental results show that the platform is capable of estimating the moisture content with good accuracy even when the target or the environment are not completely known.

Palabras clave: Determinación de humedad, ultra-wideband (UWB), estimación, sensado remoto.

Introducción

En los últimos años, el uso de sensores de microonda basados en tecnología ultra-wideband (UWB) ha recibido atención significativa para su uso en sensado remoto no invasivo. Entre las algunas de las aplicaciones más relevantes podemos mencionar imágenes médicas, detección y monitoreo [1], georadar [2], y posicionamiento [3]. Los sistemas UWB impulsivos, son una tecnología versátil para la caracterización no destructiva de muestras ya que el campo dispersado por los blancos es altamente dependiente de su composición y forma [4]. Por otra parte, tanto en ambientes industriales como de investigación resulta de importancia resolver el problema de determinar el contenido de humedad de distintos materiales. Trabajos previos han mostrado resultados prometedores midiendo el de humedad de materiales voluminosos usando señales UWB en escenarios experimentales [5]. Esta tecnología también ha mostrado ser prometedora para determinar la forma y composición de materiales dieléctricos [6].

Las poliamidas son algunos de los polímeros más usados en aplicaciones industriales debido a su versatilidad. Estos materiales poseen propiedades higroscópicas, es decir que presentan afinidad por el agua y por lo tanto absorben humedad del ambiente. Esta absorción de humedad trae consigo cambios en las propiedades del material. Por ejemplo, la poliamida 6 (PA6) a 23°C puede tener un contenido de humedad de equilibrio del hasta el 9% (a una humedad relativa del 100%) [7]. Esta variación en el contenido de humedad introduce variaciones significativas en muchas de las propiedades mecánicas del material [8], [9].

Algunas técnicas comunes para medir el contenido de agua se basan en técnicas de calorimetría diferencial de barrido, pérdida-en-secado y análisis termogravimétrico. La mayoría de estas técnicas involucra análisis térmico y toman mucho tiempo. Más aún, suelen resultar técnicas destructivas y se aplican a muestras de pequeño tamaño [10]. Por estos motivos no resultan útiles para monitoreo en tiempo real. También existen otras técnicas [10], [11] basadas en espectroscopía y microscopía. Las mismas resultan mejores para mediciones en tiempo real no destructivas, pero requieren de equipos complejos y costosos, resultando inadecuadas para ambientes industriales. Finalmente, las técnicas basadas en sensado capacitivo [12] son aptas para el sensado en tiempo real, pero están limitadas a muestras de dimensiones reducidas.

Este trabajo es una versión reducida de la publicación [13]. Se presenta el desarrollo y evaluación de una plataforma UWB orientada a la estimación de niveles de humedad en blancos dieléctricos. El objetivo es desarrollar un sistema para determinar el contenido de humedad de piezas de poliamida en tiempo real bajo condiciones de medición sujetas a perturbaciones de ruido e interferencia.

La plataforma propuesta funciona transmitiendo pulsos UWB de corta duración modulados a una frecuencia de 1.9GHz, capturando y analizando la señal dispersada por los blancos. Se presentan los principales

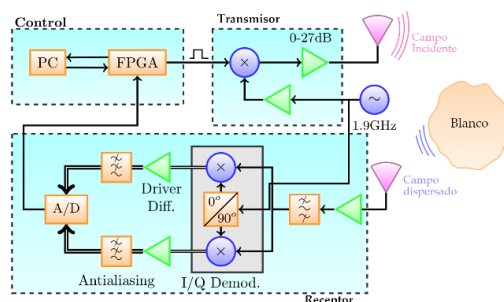


Figura 1: Diagrama en bloques de la arquitectura

criterios de diseño de la plataforma de medición, junto con las mediciones relevantes de los principales bloques. Luego, se analizan las capacidades de la plataforma para estimar el contenido de agua de blancos de PA6. Usando un algoritmo de regresión no lineal, mostramos que es posible realizar estimaciones correctas para un amplio rango de valores de humedad. Las mediciones tomadas para este fin fueron realizadas en un ambiente con presencia tanto de interferencia inalámbrica como de señales espurias y rebotes provenientes de otros objetos del ambiente.

Arquitectura de la plataforma

En el fig. 1 se presenta un diagrama en bloques de la arquitectura propuesta. Una FPGA genera pulsos angostos, que posteriormente son modulados por un mixer a la frecuencia central del sistema, amplificados y transmitidos. El pulso dispersado por el blanco es recuperado por una antena receptora, y luego amplificado, filtrado y demodulado en el receptor. El receptor usa un demodulador IQ de frecuencia intermedia cero (cero-IF) para evitar pérdida de información del pulso dispersado. Posteriormente, la señal es muestreada utilizando un conversor analógico digital de alta velocidad. Finalmente, una FPGA recupera el pulso dispersado del conversor AD de forma sincrónica con el pulso transmitido, de forma que, por ejemplo, se puede medir el tiempo de retardo del pulso dispersado. La recuperación sincrónica del pulso permite también que se sumen diversos pulsos de manera coherente para obtener una ganancia de procesamiento. Como el transmisor y el receptor se encuentran cercanos uno a otro, se utiliza el mismo oscilador para realizar la modulación y demodulación. La frecuencia central del prototipo se eligió en $f_c = 1.9\text{GHz}$, resultando en un compromiso entre profundidad de penetración y resolución. Este podría resultar un parámetro crítico en ciertas aplicaciones donde el blanco se encuentra embebido en otro material.

Para diseñar la plataforma, se deben especificar los principales parámetros del transmisor y receptor, tales como la ganancia y figura de ruido. Estos parámetros definen, entre otras cosas, la relación señal a interferencia y ruido (SINR) en la señal medida, y permite la optimización del rango dinámico del sistema. Para determinar estas especificaciones, se deben considerar distintos aspectos como la amplitud esperada del pulso dispersado, y otros factores que afectan la señal recibida como el ruido térmico en las antenas, la interferencia RF de otras fuentes, acoplamiento entre antenas, señales dispersadas por otros objetos presentes en el ambiente. En general, la amplitud de la señal dispersada al excitar con señales UWB es altamente dependiente de la geometría, posición y composición del blanco. Por lo tanto, es difícil definir especificaciones generales que cubran cualquier escenario posible. Se consideró como objetivo de diseño alcanzar el máximo grado posible de flexibilidad para un setup experimental de corto alcance. Esto implica contar con un amplio rango de potencias de transmisión y ganancias de recepción, de forma de optimizar el rango dinámico del receptor manteniendo la figura de ruido del sistema dentro de valores aceptables. Para ello, se debe considerar la contribución de las distintas fuentes de interferencia, y cómo mitigar el efecto de cada una:

- *Ruido térmico en las antenas:* al ser transmisiones de corto alcance, el efecto del ruido térmico en las antenas no resulta una limitación fundamental en el desempeño del sistema.
- *Interferencia RF de otras fuentes:* presenta una amplitud mayor que el ruido térmico. La SINR que induce puede ser controlada ajustando la potencia de transmisión. Asumiendo estacionariedad de corto plazo, puede reducirse significativamente promediando las señales recibidas durante varios pulsos transmitidos.
- *Acoplamiento entre antenas y señales dispersadas por otros objetos del ambiente:* el efecto de estas señales no puede ajustarse modificando la potencia de transmisión ni

promediando. En una situación estacionaria, estas señales pueden considerarse como interferencia determinística y por lo tanto pueden aplicarse técnicas de cancelación.

Arquitectura del transmisor

En la fig. 2 se presenta un diagrama del transmisor. Una FPGA de salida digital es utilizada para generar el pulso transmitido. En el prototipo presentado, utilizamos la FPGA Virtex IV que se encuentra incluida en la placa del conversor A/D del receptor. Esto garantiza la sincronización entre la generación de pulsos y el muestreo de las señales recibidas. Con esta FPGA es posible obtener un pulso de 1.5ns de duración (amplitud 10%-10%). El ancho de banda de 10dB medido para el pulso fue de 1.28GHz.

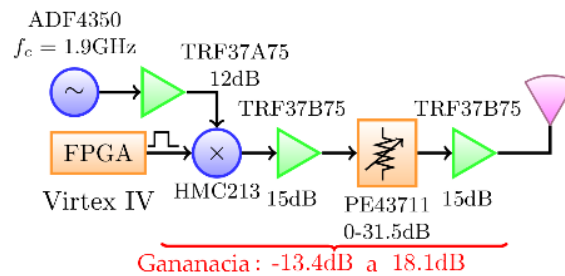


Figura 2: Diagrama en bloques del transmisor.

Para la referencia de tanto el transmisor como el receptor se consideró el oscilador VCO+PLL ADF4350 de *Analog Devices*. Por simplicidad, se usó un mixer pasivo (HMC213) para transformar la señal a banda pasante. Este mixer requiere una potencia de entrada del oscilador local de +13dB, por lo que se incluyó un bloque de 12dB de ganancia (TRF37A75 de *Texas Instruments*). El mixer de conversión superior introduce una atenuación de 10dB aproximadamente, que es compensada por una cascada de dos bloques de 15dB de ganancia (TRF37B75) y un atenuador controlado digitalmente (PE43711 de pSemi). En conjunto, esto permite al transmisor alcanzar una potencia variable entre -13.4dB y 18.1dB. Bajo condiciones de operación normales el transmisor transmite una trama que consiste en N_p pulsos con una frecuencia de repetición de pulso (PRF) f_{PRF} . Para conseguir un diseño versátil y modular, cada bloque se implementó en una placa distinta, usando un sustrato de FR4 doble capa.

Diseño de Antenas

El objetivo del diseño de las antenas fue conseguir un diseño compacto y ireccional, que no introdujera distorsión sustancial al pulso transmitido. Por su simplicidad y tamaño reducido se eligió trabajar con monopolos impresos. Dado que estas antenas no son direccionales, se incorporó un reflector planar detrás. La antena se diseñó siguiendo [14], [15] con un sustrato FR4 de 1.6mm. Sus dimensiones son presentadas en la fig. 3. El reflector es un cuadrado de 160mm de lado, aproximadamente la longitud de onda a f_c , y su centro alineado con el centro del parche de la antena. La distancia entre el parche y el reflector es de 39.5mm ($\sim \lambda/4$ a f_c). Este valor fue seleccionado usando optimización numérica hasta obtener una ganancia relativamente constante alrededor de f_c . Las simulaciones fueron hechas con el programa Ansys HFSS.

Se midió el patrón de radiación de la antena en una cámara anecoica a tres frecuencias diferentes. La fig. 4 muestra la pérdida de retorno de entrada, mientras que las fig. 5 y 6 presentan las ganancias en elevación y azimut. Se observa una buena concordancia entre los valores simulados y medidos.

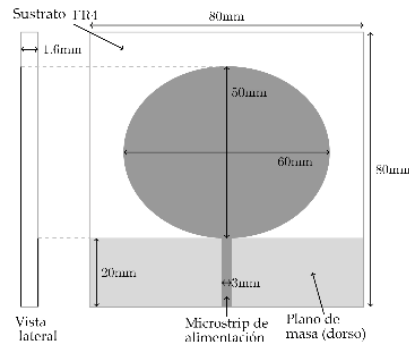


Figura 3: Dimensiones de la antena monopolo.

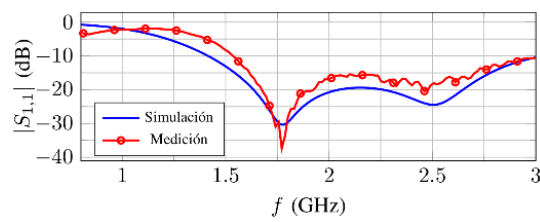


Figura 4: Parámetro S11 simulado y medido de la antena.

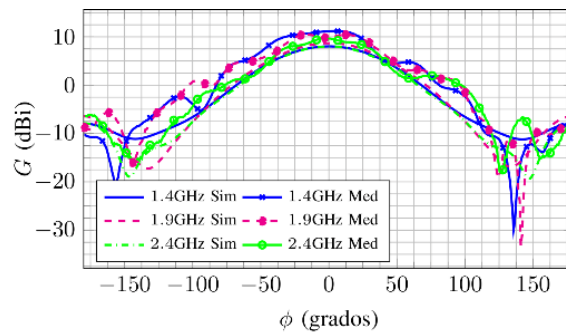


Figura 5: Ganancia en azimut de la antena, simulado y medido.

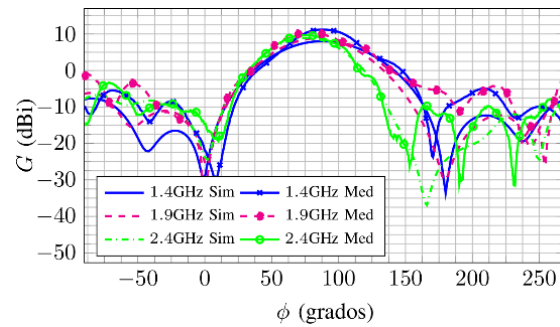


Figura 6: Ganancia en elevación de la antena, simulado y medido.

Arquitectura del receptor

En la fig. 7 se muestra un diagrama en bloques de la arquitectura del receptor. Para mantener la modularidad y flexibilidad del prototipo, las partes analógicas del receptor se dividieron en tres bloques: la primera etapa de amplificación (GB), el filtro pasabandas, y la etapa de conversión de frecuencia y amplificación.

En el primer bloque, las señales recibidas por la antena son amplificadas usando un bloque de 12dB de ganancia (GB, TRF34A75) con una figura de ruido de aproximadamente 4dB. El mismo es un componente clave para establecer la figura de ruido total del receptor.

El filtro pasabandas fue diseñado con un ancho de banda objetivo de 1GHz, que para una frecuencia de portadora de 1.9GHz resulta en un ancho de banda relativo de aproximadamente 52%. Alcanzar este ancho de banda resulta particularmente desafiante, dado que las topologías de filtros UWB tradicionales en general alcanzan anchos de banda muy por encima del 50%,

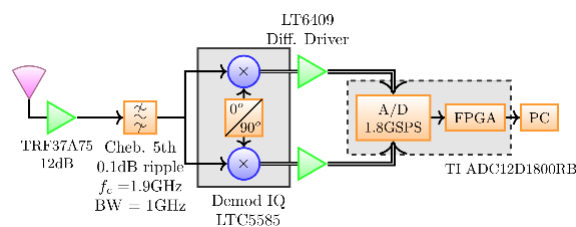


Figura 7: Diagrama en bloques del receptor.

mientras que las topologías de banda angosta alcanzan anchos de banda mucho menores al necesitado. En este caso, se eligió una topología de línea acoplada asimétrica interdigital, que además de alcanzar las especificaciones resulta compacta [16]. En primera instancia, el filtro se simuló en el Keysight ADS y luego se implementó con un sustrato Rogers RO4350 de 1.524mm de espesor con cobre de $35\mu\text{m}$. El diseño del prototipo alcanzó un ancho de banda de 3dB de 1.1GHz, y una pérdida en la banda de paso de sólo 0.75dB. El diseño se presenta en la fig. 8 y su respuesta en frecuencia en la 11.

La tercera etapa, correspondiente a la modulación en banda base y amplificación se empleó un demodulador I/Q de cero-IF de alta linealidad (LTC5585) para recuperar las señales dispersadas con la menor distorsión posible. Un controlador de amplificación completamente diferencial (LTC6409) se incorporó para incluir una etapa adicional de

ganancia y para actuar como interfaz con el conversor A/D. La placa se implementó usando un sustrato FR4 de cuatro capas. Se debió incluir un adaptador de impedancias para el puerto RF y el puerto LO del mixer para el rango de frecuencias de interés. Esta adaptación fue simulada usando Keysight ADS. La red de adaptación del puerto RF alcanza un ancho de banda de 10dB de 920MHz centrado en 1.9GHz. El controlador de amplificación diferencial actúa como una

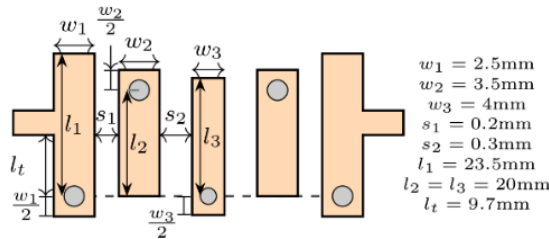


Figura 8: Diseño del filtro pasabanda.

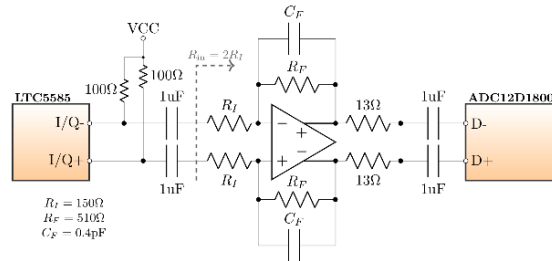


Figura 9: Esquemático del amplificador diferencial.

segunda etapa de ganancia en banda base. Adicionalmente, adapta los valores de DC entre el mixer y el conversor A/D, e introduce un filtro pasa bajos adicional de primer orden. El esquemático del circuito usado se muestra en la fig. 9. Juntos, el mixer y el amplificador se comportan como un sistema pasabajos de segundo orden con una ganancia de potencia de 6.6dB (considerando la impedancia de entrada de 100Ω de conversor A/D). El mixer con una carga diferencial de 300Ω alcanza una respuesta de primer orden con una ganancia de tensión de aproximadamente 1dB en la banda de paso y un ancho de banda de 3dB de 580MHz. Además, el amplificador tiene

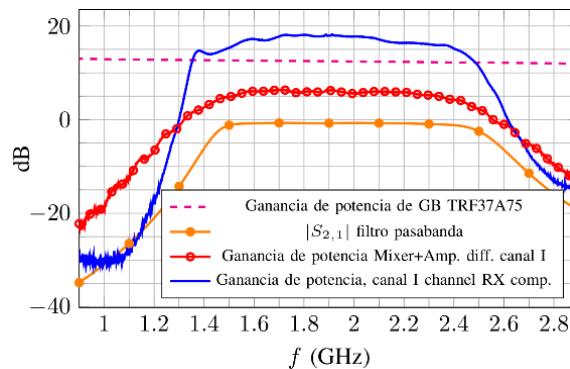


Figura 10: Mediciones de la ganancia de potencia de las distintas etapas del receptor (canal I), y la respuesta en frecuencia del filtro pasabandas.

una respuesta pasabajos de primer orden con una ganancia de tensión de $\frac{R_F}{R_I} = 8.6dB$, y un ancho de banda de 3dB de 780 MHz $((2\pi R_F C_F)^{-1})$. Se midió la ganancia de potencia del mixer y las etapas de amplificación, los cuales se muestran en la fig. 10. En la banda de paso, la ganancia medida fue de 6.3dB que está en concordancia con los 6.6dB predichos. La ganancia de potencia y NF del front-end analógico y cada una de sus etapas se midieron y compararon con los datos del fabricante o las simulaciones según correspondiera. Para las mediciones correspondientes al convertor de frecuencias, se presentan sólo los resultados correspondientes al canal I. Adicionalmente, la tabla 1 compara los valores teóricos y medidos de la figura de ruido y ganancia de potencia cercanos a f_c . Las ganancias medidas se corresponden con los valores predichos, mientras que, si bien se mantiene dentro de rangos aceptables, existe una pequeña discrepancia entre los valores medidos y estimados de NF del convertor de frecuencia. La ganancia total medida del receptor fue de 17.9dB, y la NF de 8.7dB. La NF del bloque de ganancia se midió usando el factor-Y con una fuente de ruido Keysight 346A y un analizador de espectros R&S FSV7. La NF de la etapa de conversión de potencia + amplificador fue luego estimada a partir de estas mediciones indirectas. La NF total del amplificador resultó de 11.2dB.

Tabla 1: Figura de ruido y ganancia de potencia del front end analógico.

Componente	Ganancia de potencia [dB]		Figura de Ruido [dB]	
	Teórico	Medido	Teórico	Medido
GB	12.3	12.5	4.0	4.2
Filtro PB	-0.4	-0.75	0.4	0.75
Conv. + Amp	6.6	6.3	15.3	18.4
Front-end	18.7	17.9	6.7	8.7

Recuperación de un pulso de prueba

Para verificar el desempeño de la plataforma, se analizó su capacidad para recuperar el pulso transmitido. En una cámara anecoica posicionamos las antenas enfrentadas a una distancia de 52cm. La fig. 11 compara el pulso recibido con el transmitido, previamente medido con un osciloscopio R&S RTE1000, con una impedancia de entrada de 50Ω. Vemos que se preserva la forma del pulso, presentando un pequeño ensanchamiento debido a las etapas de procesamiento analógico.

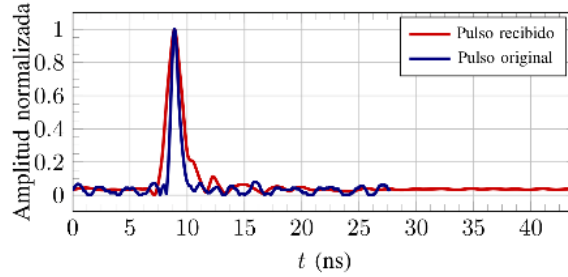


Figura 11: Pulso transmitido y recibido.

Procesamiento de los datos y regresión

Sea $x_{rk} = I_k - j Q_k$, $k = 1, 2, \dots$ la versión en tiempo discreto de la envolvente compleja de la señal recibida. I_k y Q_k son las componentes en fase y cuadratura de la señal muestreada en el tiempo. Como mencionamos previamente, la señal dispersada se encuentra afectada por ruido térmico w_k , interferencia RF en la banda de interés v_k , y una perturbación aditiva d_k debida al acoplamiento entre antenas y rebotes indeseados, i.e. $x_{rk} = \bar{x}_k + d_k + w_k + v_k$, donde \bar{x}_k es la verdadera señal dispersada. Se asume que w_k y v_k son procesos de media nula y estacionarios durante la duración de una trama. Sea $T = f_s / f_{PRF}$ el número de muestras entre pulsos. Luego, para mejorar la SINR de la señal recibida, promediamos las copias de la siguiente forma:

$$\hat{x}_{rk} = \frac{1}{N_p} \sum_{i=0}^{N_p-1} x_{rk+iT}, \quad k = 1, 2, \dots, T.$$

Desafortunadamente, la perturbación d_k es persistente y no se reduce por el promediado. Sin embargo, se puede estimar en ausencia de blancos. Sea \hat{d}_k el promedio de las tramas recibidas en dicha situación. Consideramos que \hat{d}_k es una buena estimación para d_k , y por lo tanto puede restarse a la señal recibida para mitigar el efecto de esta perturbación. Luego, la señal

$$x_k = \hat{x}_{rk} - \hat{d}_k, \quad k = 1, 2, \dots, T \quad (1)$$

es la estimación de la señal dispersada que vamos a utilizar. Consideremos el siguiente vector complejo con entradas

$$\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_T], \quad (2)$$

donde cada entrada se computa según (1). Sea $0 < y < 100$ un escalar representando el porcentaje de contenido de humedad (CH) del blanco. Supongamos que se miden N blancos con distintos niveles de CH, conocidos, para conformar el conjunto de datos de entrenamiento $C_{train} = \{(\mathbf{x}_1, y_1), \dots, (\mathbf{x}_N, y_n)\}$. Dado un nuevo blanco con contenido de agua desconocido querríamos estimar y a partir del \mathbf{x} correspondiente. Para ello, construimos un modelo de regresión no lineal, basado en una familia de modelos llamada Support Vector Regression (ϵ -SVR). Se ha mostrado que las ϵ -SVR son robustas a valores extremos y que tienen buen desempeño incluso con baja cantidad de muestras de entrenamiento [17].

Una ϵ -SVR es una función $\hat{y} = f(\mathbf{x})$ que se separa a lo sumo ϵ del valor real de y para todos los miembros en C_{train} . Una ventaja de esta familia de estimadores es que el clasificador puede obtenerse a partir de una combinación de un subconjunto de los de datos de entrenamiento, conocidos como vectores soporte. Para una descripción del método puede consultarse [26].

Para resolver el problema de regresión, recolectamos la señal dispersada por distintos blancos con niveles de humedad conocidos usando la plataforma descrita en la sección anterior. Consideramos un rango variado de CH, distintas posiciones de los blancos y posibles desapareamientos en la forma de los blancos. De este conjunto de mediciones realizadas sobre blancos conocidos, se dividieron las muestras para formar dos conjuntos: uno de entrenamiento, C_E , y otro de prueba, C_T . Usamos C_T para determinar el desempeño final del estimador una vez que fue entrenado con las muestras de C_E .

Hemos observado que el error de estimación se reduce significativamente si promediamos las estimaciones resultantes de distintas mediciones del mismo blanco. En consecuencia, el procedimiento para estimar el CH de un nuevo blanco resulta: 1) Recolectar información del medio, computando $\hat{d}_k, k = 1, \dots, T$; 2) Recolectar M tramas independientes de la señal dispersada por el blanco; 3) Para cada trama, usar (2) para obtener los vectores $\mathbf{x}_i, i = 1, \dots, M$; 4) Computar $f(\mathbf{x}_i), i = 1, \dots, M$; 5) Definimos el CH estimado:

$$\widehat{CH} = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M f(\mathbf{x}_i). \quad (3)$$

Como entrada al clasificador se utiliza el vector $\mathbf{x}_{inp} = [\mathcal{R}(\mathbf{x}), \mathcal{J}(\mathbf{x})] \in \mathbb{R}^{2T}$, resultando en el conjunto de entrenamiento definido como $\{(\mathbf{x}_{inp,i}, y_i), i = 1, \dots, N\}$. Para simplificar la notación no diferenciaremos entre $\mathbf{x}_{inp,i}$ y \mathbf{x}_i .

Mediciones y validación

Para determinar la óptima posición relativa entre las antenas y el blanco se realizaron distintos experimentos, simulando diferentes configuraciones para el posicionamiento de las antenas y el blanco. Un punto importante para considerar es el acoplamiento entre antenas, ya que el mismo puede resultar de una amplitud mayor que la señal dispersada por el blanco. Si esto ocurriera se corre el riesgo de perder rango dinámico en la señal recibida, poniendo en riesgo el comportamiento de la estrategia de estimación global. Los mejores resultados se obtuvieron posicionando las antenas una al lado de la otra, con sus centros a 20cm de distancia y separadas por una placa conductora para reducir el acoplamiento. La distancia al blanco considerada fue de 50cm para garantizar las condiciones de campo lejano. Finalmente, se estimó la duración de la respuesta del ambiente y se determinó que una PFR de 10 MHz era suficiente para evitar la superposición entre pulsos consecutivos.

Luego, exploramos la habilidad de la plataforma para predecir el nivel de humedad de una muestra de poliamida. Para ello, fabricamos tres placas de poliamida, P_1, P_2, P_3 . Las tres placas están hechas de PA6, siendo P_1 y P_2 de $16.5 \times 10 \times 5.2$ cm, mientras que P_3 resultó de $16.5 \times 10 \times 5.6$ cm. Gradualmente se fueron hidratando las tres muestras para obtener valores de CH. El CH se determinó utilizando la diferencia de peso entre las placas secas y húmedas, usando una balanza electrónica de precisión. El máximo error absoluto de medición de la humedad alcanzado con ese método es de $4.1 \times 10^{-3}\%$. Para cada placa y cada nivel de humedad se midieron los blancos orientados vertical y horizontalmente (fig. 12). Para cada orientación, se recolectaron tramas rotando el blanco 180° en azimut. El procedimiento se repitió $M = 11$ veces. De esta forma, se obtuvieron un total de 44 tramas para cada blanco y cada CH. Cada una de estas tramas se procesó según lo descrito en la sección anterior. Se reservaron las mediciones realizadas sobre la placa P_1 para C_T , mientras que las correspondientes a P_2 y P_3 fueron utilizadas para C_E . Se determina la bondad de la estimación usando el error relativo

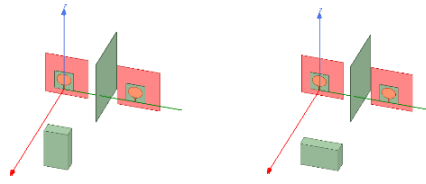


Figura 12: Configuración experimental para la adquisición de datos.

$$Error(CH) = \frac{|CH - \widehat{CH}|}{CH}. \quad (4)$$

A modo ilustrativo, en la figura 13 se presentan las muestras x obtenidas para P_1 , con orientación horizontal para $CH \in \{0, 1.78, 3.76, 4.69, 5.16\}$. Si bien existen diferencias entre los distintos niveles de humedad, las mismas resultan poco significativas, resultando en un problema desafiante.

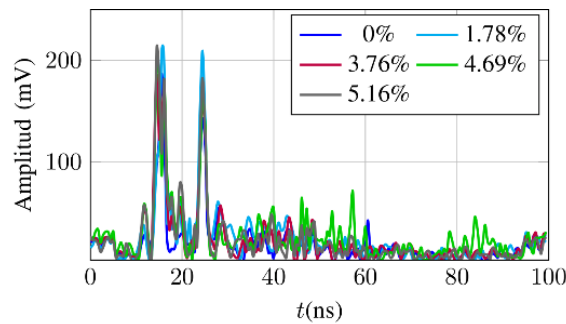


Figura 13: Señales recibidas para diferentes valores de CH

En la fig. 14 se muestra el error relativo (4) obtenido para las predicciones $\hat{y}_t = f(x_t)$, $x_t \in C_T$. Exceptuando el valor de $CH = 1.13\%$, el error relativo es siempre menor al 10%. Esta diferencia se debe a que para $CH = 1.13\%$ se recolectaron tramas más cortas de $N_p = 22$, contra un $N_p = 91$ utilizado en las mediciones restantes.

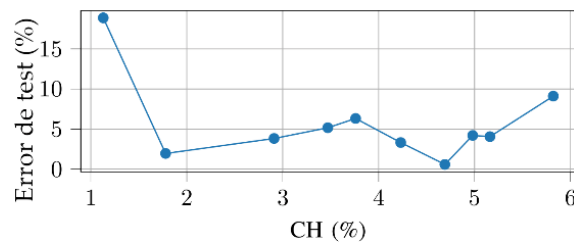


Figura 14: $Error(CH)$ vs CH , estimando para P_1 .

Conclusiones

En este trabajo se presentó una solución para una estimación rápida de la composición de materiales dieléctricos.

La propuesta consiste en una plataforma experimental implementada con componentes de uso comercial, junto con un esquema de procesamiento de datos basado en técnicas de aprendizaje automático. Se presentaron los principales criterios de diseño del *hardware* junto con los principales bloques.

La evidencia indica que es posible la estimación del contenido de agua en blancos desconocidos usando las señales dispersadas, incluso en ambientes con presencia de ruido e interferencia.

Agradecimientos

El trabajo de M. Bouza fue financiado por la beca de doctorado Peruilh otorgada por la Universidad de Buenos Aires. El trabajo fue parcialmente financiado por los proyectos UBACyT 20020170200283BA, PICT 2016-1925 y PICT-2017-4533.

Referencias

- [1] X. Zeng, A. Fhager, M. Persson, and H. Zirath (2019). Performance evaluation of a time-domain microwave system for medical diagnostics. *IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement*, vol. 68, no. 8, pp. 2880–2889.
- [2] R. O. R. Janssen, M. Eckerstorfer, and S. Jacobsen (2020). Drone-mounted ultrawideband radar for retrieval of snowpack properties. *IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement*, vol. 69, no. 1, pp. 221–230.
- [3] O. Hirsch, M. Janson, W. Wiesbeck, and R. S. Thoma (2010). Indirect localization and imaging of objects in an uwb sensor network. *IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement*, vol. 59, no. 11, pp. 2949–2957.
- [4] D. P. Osorio de Sousa Piscarreta(2014). Study of ultra-wideband modulated gaussian pulse and its application to nondestructive and contactless characterization of materials Faculty of Science and Technology University of Macau.
- [5] H. Mextorf, F. Daschner, M. Kent, and R. Knochel (2012). Non-contacting moisture sensing using a dedicated uwb time domain instrument,” *The 7th German Microwave Conference* pp. 1–4.
- [6] H. Mextorf, F. Daschner, M. Kent, and R. H. Knochel (2011). Uwb free-space characterization and shape recognition of dielectric objects using statistical methods. *IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement*, vol. 60, no. 4, pp. 1389–1396.
- [7] M. Kohan (1995). *Nylon plastics handbook*.
- [8] H. Reimschuessel (1978). Relationships on the effect of water on glass transition temperature and young’s modulus of nylon 6. *J Polym Sci Polym Chem Ed*, vol. 16, no. 6, pp. 1229–1236.
- [9] M. Arif, F. Meraghni, Y. Chemisky, N. Despringre, and G. Robert (2014). In situ damage mechanisms investigation of pa66/gf30 composite: Effect of relative humidity. *Composites Part B: Engineering*, vol. 58, pp. 487 – 495.
- [10] W. Camacho, A. Valles-Lluch, R. Amparo, and S. Karlsson (2003). Determination of moisture content in nylon 6,6 by near-infrared spectroscopy and chemometrics. *Journal of Applied*

Polymer Science, vol. 87, pp. 2165 – 2170.

- [11] T. Lechner, K. Noack, M. Thone, P. Amendt, M. Schmidt, and S. Will (2016). Investigating the moisture content of polyamide 6 by raman-microscopy and multivariate data analysis. *Physics Procedia*, vol. 83, pp. 1271 –1278, 2016, proceedings of the LANE 2016 September 19-22.
- [12] R. Moura Dos Santos, J. Sallese, M. Mattavelli, A. Santos Nunes, C. Dehollain, and D. Barrettino (2020). High precision capacitive moisture sensor for polymers: Modeling and experiments. *IEEE Sensors Journal*, vol. 20, no. 6, pp. 3032–3039.
- [13] A. Altieri, M. Bouza, J. A. Maya and C. G. Galarza [2021]. Design and Evaluation of an Impulsive Ultrawideband System for Estimating the Moisture Content of Polyamide Targets. *IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement*, vol. 70, pp. 1-9
- [14] J. Liang, C. Chiau, X. Chen, and C. Parini (2005). Study of a printed circular disc monopole antenna for UWB systems. *IEEE Transaction on Antennas and Propagation*, vol. 53, no. 11, pp. 3500–3504.
- [15] G. Quintero, J. Zurcher, and A. Skrivervik (2009). Omnidirectional pulse dispersion of planar circular monopoles. *2009 IEEE Int. Conf. on Ultra-Wideband*.
- [16] J.-S. Hong (2011). *Microstrip Filters for RF / Microwave Applications*. Wiley.
- [17] A. J. S. Bernhard Schlkopf (2001). *Learning with Kernels: Support Vector Machines, Regularization, Optimization, and Beyond*. MIT Press.

20

Estudio de arquitecturas digitales para sistemas UWB

Cervetto, Marcos^a; Marchi, Edgardo^a;
Galarza, Cecilia^b

^a *Departamento de Comunicaciones - INTI / Facultad de Ingeniería - UBA*

^b *Centro de Simulación Computacional - CoNICET / Facultad de Ingeniería - UBA*
mcervetto@fi.uba.ar; cervetto@inti.gob.ar

Resumen

Los sistemas Ultra WideBand (UWB) han recibido especial atención a partir del año 2002 cuando la Comisión Federal de Comunicaciones de Estados Unidos (FCC) autorizó a utilizar la banda no licenciada de 3.1 GHz a 10,6 GHz para aplicaciones comerciales de comunicación. Un radar UWB del tipo impulse radar posee un transmisor y uno o varios receptores, también conocidos como sensores UWB. El transmisor emite una serie de pulsos ultracortos con una frecuencia de repetición determinada, iluminando un objetivo con la idea de que los receptores puedan recibir y procesar los respectivos rebotes y obtener información acerca del objeto iluminado. Se puede pensar que al iluminar un blanco con una señal de estas características, se obtiene una respuesta rica en información, propia de la naturaleza del objeto.

En el presente trabajo se muestra el desarrollo e implementación de una plataforma experimental de Impulse Radar UWB basada en SoC-FPGA utilizando componentes off-the-shelf, con un esquema de muestreo en tiempo equivalente a 5.04 GSps o mayor, totalmente configurable.

Abstract

Ultra WideBand (UWB) systems have received special attention since 2002 when the U.S. Federal Communications Commission (FCC) authorized the use of the unlicensed 3.1 GHz to 10.6 GHz band for commercial communication applications. A UWB impulse radar has a transmitter and one or more receivers, also known as UWB sensors. The transmitter emits a series of ultra-short pulses with a given repetition frequency, illuminating a target with the idea that the receivers can process the respective bounces and obtain information about the illuminated object. It can be thought that by illuminating a target with a signal of these characteristics, an information-rich response is obtained, typical of the nature of the object.

This work shows the development and implementation of an experimental Impulse Radar UWB platform based on SoC-FPGA using off-the-shelf components, with a time sampling scheme equivalent to 5.04 GSps or higher, fully configurable.

Palabras clave: Ultra-Wideband, Impulse Radar, FPGA, System-On-Chip

Introducción

En el estudio y desarrollo de algoritmos y técnicas de procesamiento de señales en comunicaciones, una plataforma de hardware resulta extremadamente útil para implementar y validar dichos algoritmos, en particular para el procesamiento de señales UWB (Ultra Wide-Band). La detección de objetivos mediante señales UWB se consigue enviando una serie periódica de pulsos estrechos a un objetivo dieléctrico y observando las características de las respuestas reflejadas. La forma de onda de banda base recibida contiene información que, con un procesamiento posterior, puede utilizarse para extraer la firma del objetivo[1-3].

En este trabajo se ha desarrollado una plataforma de hardware experimental que permita iterar diseños basados en tecnología UWB. La plataforma se ha desarrollado centrándose en el uso de componentes estándar de bajo coste, con una arquitectura modular simple que está dirigida al bajo consumo, aplicaciones de corto alcance, con una distorsión mínima de la señal enviada.

Las principales características de la plataforma propuesta son las siguientes: ancho de banda del sistema de 1GHz con una frecuencia portadora de 4,2525GHz, un transmisor I/Q compacto, demodulación I/Q de alta linealidad de una sola etapa en banda base con una velocidad de muestreo en tiempo equivalente que supera los 5GS/s.

Desarrollo

La plataforma se compone de tres módulos principales: el frontend analógico, con un ancho de banda de frecuencia intermedia de 1 GHz, y una frecuencia portadora superior de 4,8 GHz; el hardware digital está basado en un dispositivo FPGA+SoC Zynq-7000 XC7Z030 [4]; un PC para la visualización, el control y el posprocesamiento de la señal. La figura 1 muestra un esquema global del sistema.

La unidad central de procesamiento utiliza un SoC Zynq-7030. Al combinar área de FPGA (en adelante PL según nomenclatura de Xilinx) con un procesador dual-core ARM Cortex-A9 (en adelante PS), posee las capacidades para implementar algoritmos de procesamiento en tiempo real tanto en hardware como en software. El SoC es responsable de cuatro tareas principales: la generación del pulso, la reconstrucción de la señal, la comunicación con un dispositivo de visualización y post-procesamiento (un PC, por ejemplo) y la configuración de los periféricos de la plataforma.

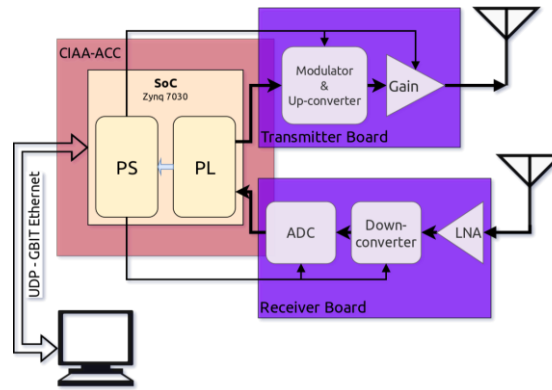


Figura 1: Esquema global del sistema

El hardware implementado en el área de la FPGA del SoC proporciona una interfaz con un mínimo footprint destinado a reconstruir la señal muestreada y ponerla a disposición de otros módulos para su posterior procesamiento. Fue codificado en VHDL, a nivel RTL (Register Transfer Level) para minimizar los recursos, y se presenta como un core IP (Intellectual Property) con interfaces AXI (Advanced eXtensible Interface) tanto para el flujo de datos como para las señales de control. Se trata de una forma conveniente de "conectar" IPs desarrollados a medida en el sistema.

La tasa de datos bruta depende del ancho de palabra del ADC (Analog to Digital Converter), del número de canales y la frecuencia de operación. Esta tasa es independiente de la configuración, ya que la selección de parámetros sólo afecta a la reorganización de los datos. Para esta plataforma de hardware concreta:

$$tasa = 80 \text{ Sample}/\mu s \cdot 12 \text{ bit}/\text{Sample} \cdot 2 \text{ canales}$$

Esa operación arroja una tasa efectiva de datos de 1,92 Gbps. Dado que esta tasa es demasiado alta para ser manejada por la interfaz Ethernet Gbit disponible en la placa, introducimos un gestor de datos después de la reconstrucción de la trama. La tasa de datos puede ajustarse en tiempo de ejecución seleccionando el número de tramas de señal que se debe descartar antes de alimentar las muestras a los siguientes IPs. De este modo, también se controla el consumo de energía, ya que los datos adicionales se filtran al principio de la cadena de señales, evitando la conmutación lógica innecesaria. En la Figura 2 se puede ver un diagrama de la lógica programable implementada.

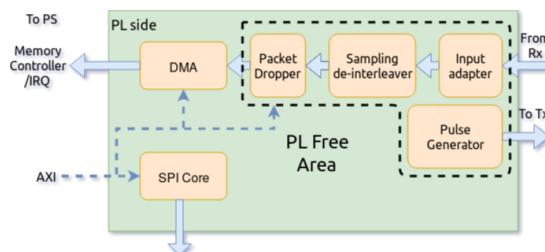


Figura 2: Lógica programable

El PS (Processing System) del SoC se encarga principalmente de dos tareas estructurales: la transferencia de datos al dispositivo de cómputo a través de UDP, y la configuración SPI de los dispositivos hardware (ADC, Mezclador, Atenuador, Modulador). Se ha prestado especial atención a mantener un bajo uso de la CPU y en facilitar futuras incorporaciones de software embebido para el procesamiento de la señal. Con esto en mente, se ha elegido el

sistema operativo FreeRTOS [5] para que proporcione tanto una baja utilización de la CPU como una infraestructura de contención de tareas, para simplificar el manejo de recursos con la perspectiva de la topología modular ya mencionada.

Las ejecuciones de estas tareas se ejecutan por la interrupción DMA con nuevos datos, y por la presencia de datos de configuración en el puerto UART, respectivamente.

A continuación, se hará una descripción del software de alto nivel desarrollado, que permite la visualización de los datos capturados en una computadora de escritorio.

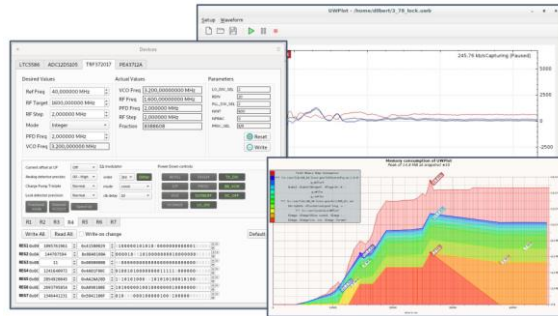


Figura 3: Software de captura y configuración. Pueden verse además la memoria utilizada

El software de tiempo real de alto nivel en la PC se encarga de mostrar los resultados al usuario, registrar las formas de onda y gestionar su almacenamiento. Además, permite la configuración detallada de cada uno de los dispositivos del frontend de hardware: Modulador y demodulador I/Q, convertidor analógico-digital y atenuador digital de RF. En la Figura 3 se muestra una imagen del software desarrollado. Un módulo de logging autónomo registra los eventos de interés de los componentes del sistema y permite varios niveles de severidad en base a cada módulo. Esta característica facilita el mantenimiento, las tareas de depuración y el diagnóstico postmortem. Fue diseñado un sistema en tiempo real codificado en Qt (C++) [6] que permite acceder a las muestras a través de la interface de red, graficarlas y capturarlas en disco para posterior análisis. El software recibe las muestras por medio del link UDP/GbE. Se muestra una captura del software en cuestión. A su vez, escribe, lee y almacena la configuración de los diferentes dispositivos presentes en el receptor y transmisor, por medio de una interfaz SPI. La configuración se hace desde una interfaz de alto nivel, de manera que el valor hexadecimal de los registros es calculado automáticamente.

El software embebido fue capaz de manejar correctamente el flujo de datos utilizando un solo núcleo del procesador, lo que permite la implementación de algoritmos embebidos en el núcleo inactivo. El uso medio de la CPU del software ejecutado en un PC fue del 14,6%, en un procesador Pentium T4400@2.2 GHz. La huella de memoria muestra un pico de 14,8 MiB, lo que supone un requisito de HW muy bajo. El uso de la memoria se obtuvo con la herramienta Massif del paquete Valgrind [7]. Se puede ver una imagen de la plataforma completa en la Figura 4.

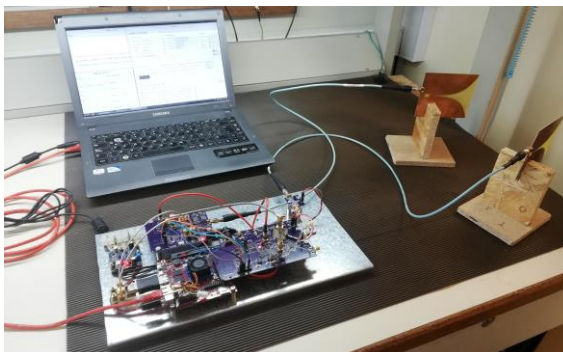


Figura 4: Plataforma desarrollada. Se ven las antenas utilizadas y la PC utilizada para la captura de datos.

Conclusiones

Este trabajo presenta una arquitectura simple, de bajo costo de una plataforma para señales UWB impulsivas que puede ser usada para desarrollar y validar aplicaciones de sensado y detección. Aunque el primer prototipo fue testado con un ancho de banda de 500 MHz, la arquitectura puede ser extendida fácilmente hasta 1 GHz. Mediante diversidad espacial se puede lograr mejorar el rango de aplicaciones de UWB incluyendo, por ejemplo, el armado de imágenes. Para ello está planeado el procesamiento de varios canales en paralelo. También se planea implementar algoritmos de extracción de features de la señal sobre el SoC, como por ejemplo el Matrix Pencil Method[8].

Referencias

- [1] C. E. Baum, E. J. Rothwell, K.-M. Chen, and D. P. Nyquist, "The singularity expansion method and its application to target identification,"
- [2] D. Kurrant and E. Fear, "Technique to decompose near-field reflection data generated from an object consisting of thin dielectric layers," *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, vol. 60, no. 8, pp. 3684–3692, Aug 2012.
- [3] Liuqing Yang and G. B. Giannakis. Ultra-wideband communications: an idea whose time has come. *IEEE Signal Processing Magazine*, 21(6):26–54, Nov 2004.
- [4] P. CIAA. Computadora industrial abierta para aplicaciones de alto costo computacional. [Online]. Available: <http://www.proyecto-ciaa.com.ar/devwiki/doku.php?id=desarrollo:ciaa> acc:ciaa acc inicio
- [5] R. Barry. FreeRTOS. [Online]. Available: <https://www.freertos.org/>
- [6] Qt framework. [Online]. Available: <http://www.qt.io/>
- [7] Valgrind's tool suite. [Online]. Available: <https://valgrind.org/info/tools>.
- [8] T. K. Sarkar and O. Pereira. Using the matrix pencil method to estimate the parameters of a sum of complex exponentials. *IEEE Antennas and Propagation Magazine*, 37(1):48–55, Feb 1995.

Generadores de Pulsos para Electroporación

Fanego, D. A.^{a,b}; Tacca, H. E.^{a,d}; Olaiz, N. M.^{c,b,e}

^{a.} Universidad de Buenos Aires, Facultad de Ingeniería. Laboratorio de Control de Accionamientos, Tracción y Potencia (LabCATyP). Buenos Aires, Argentina.

^{b.} CONICET – Universidad de Buenos Aires. Instituto de Física del Plasma (INFIP). Buenos Aires, Argentina.

^{c.} Universidad de Buenos Aires, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Buenos Aires, Argentina.

^{d.} Director de tesis.

^{e.} Co-director de tesis.

Contacto: dfanego@fi.uba.ar

Resumen

La generación de impulsos de tensiones de varios kilovolt y duraciones de solamente unos pocos nanosegundos tiene aplicaciones en tecnología de materiales, investigación de procesos físicos o químicos, en biología y medicina. Los requerimientos actuales para la investigación y nuevos desarrollos en estas áreas, tanto de amplitud como de duración de los pulsos, no pueden ser satisfechos con los dispositivos de silicio de alta tensión. El desarrollo de dispositivos basados en semiconductores compuestos con ancha banda de energía, en particular SiC o GaN, ha permitido realizar interruptores de varios kilovolt y corrientes de hasta un centenar de ampere, con anchos de pulsos de varios nanosegundos. Se buscan nuevas estrategias de generación de pulsos usando transistores SiC y la combinación de Silicio y GaN en los circuitos de excitación. Se propone una topología para la generación de los pulsos con transistores SiC y se realizan simulaciones de la misma a fin de evaluar su desempeño. Como resultado de la simulación se obtienen pulsos con una duración inferior a la centena de nanosegundos.

Abstract

The generation of impulses with voltages of several kilovolt and durations of only a few nanoseconds has applications in materials technology, research on physical or chemical process, biology and medicine. The current requirements, both in terms of pulse amplitude and duration, for research and new development on these areas can't be fulfilled with the high-voltage silicon devices. The development of devices based on compound semiconductors

with wide bandgap energy, in particular SiC or GaN, has made it possible to implement switches of several kilovolt and currents up to a hundred ampere, with pulse widths of several nanoseconds. New pulse generation strategies are sought using SiC transistors and the combination of silicon and GaN in the driver circuits. A pulse generation topology with SiC transistors is proposed and simulations are made to evaluate its performance. As a result of the simulation, pulses with a duration of less than a hundred nanoseconds are obtained.

Palabras clave: Electrónica de potencia, Electroporación, Semiconductores WBG, SiC.

Introducción

La electroporación consiste en la aplicación de campo eléctricos, de corta duración y gran intensidad, para generar la apertura de poros en las membranas celulares. Sus efectos pueden ser seleccionados mediante la combinación de la intensidad del campo y la duración de los pulsos. La intensidad y distribución del campo eléctrico son definidas por la geometría y distribución de los electrodos utilizados, además de la tensión aplicada a los mismos durante los pulsos. Los efectos de la electroporación pueden ser reversibles o irreversibles y pueden afectar la membrana celular o la nuclear dependiendo de las características de los pulsos utilizados.

Esta técnica tiene aplicación en una gran cantidad de campos de investigación e industriales, entre estos se destaca la tecnología de materiales, la investigación de procesos físicos o químicos, la biología y medicina y el tratamiento de alimentos. En la Figura 1 se ilustran los efectos sobre las células en base a la configuración de los pulsos junto con algunas aplicaciones de esta técnica

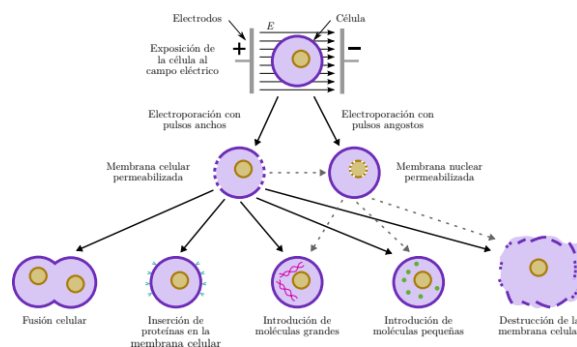


Figura 1: Efectos de la electroporación en la célula dependiendo del tipo de pulso empleado y algunas aplicaciones de esta técnica.

En el área de la biología y la medicina las aplicaciones son muchas, dependiendo del tiempo de duración de los pulsos y el tipo de electrodo a utilizar. En general mientras mayor es la duración de los pulsos la intensidad del campo eléctrico es menor. Las principales aplicaciones son el tratamiento electroquímico del cáncer (EchT, por sus siglas del inglés Electrochemical Treatment), la terapia electro-genética (EGT, por sus siglas del inglés Electro-gene Therapy), electroquimio terapia (ECT, por sus siglas del inglés Electrochemo Therapy), la electroporación irrebersible (IRE, por sus siglas del inglés Irreversible Electroporation) y la aplicación de campos eléctricos pulsados de nanosegundos (nsPEF, por sus siglas del inglés nanosecond Pulsed Electricfield) [1]. En la Figura 2 se presentan estas aplicaciones según las características de los pulsos.

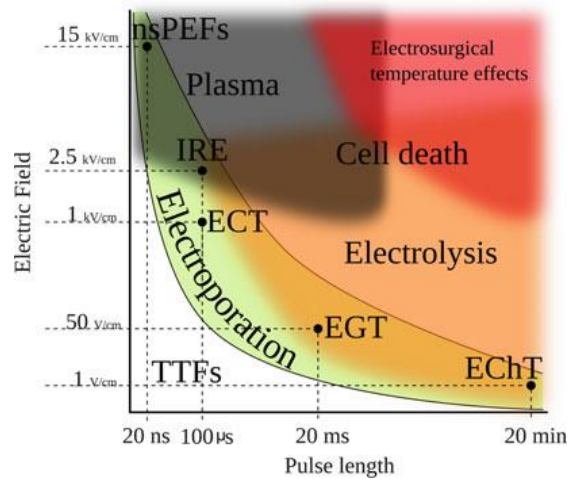


Figura 2: Aplicaciones de la electroporación según las características de los pulsos utilizados. Imagen extraída de [1].

Las aplicaciones nsPEF prometen importantes resultados, pero presentan un gran desafío para su estudio debido a las limitaciones de los generadores de pulsos necesarios para esto. La conformación de pulsos con duraciones menores al microsegundo y con la potencia necesaria se encuentra fuera del alcance de los dispositivos de potencia basados en silicio. El actual desarrollo de los dispositivos semiconductores compuestos con banda ancha de energía (WBG, por sus siglas del inglés Wide Band Gap), en particular el SiC y GaN, permiten alcanzar tiempos de conmutación de entre algunos a decenas de nanosegundos y centenares de amperes.

Los dispositivos basados en los materiales WBG superan a los basados en silicio en muchos aspectos, los más importantes para las llaves de potencia son: la tensión de bloqueo, la frecuencia y temperatura de operación [2]. Estas limitaciones del silicio reducen la eficiencia de los sistemas de conversión, forzando la necesidad de sistemas de enfriamiento complicados y elementos pasivos de disipación voluminosos, pesados y a veces caros.

Los materiales WBG, respecto al silicio, soportan un mayor campo eléctrico previo a la ruptura dieléctrica, presentan una mayor movilidad de los electrones, un mayor punto de fusión y mayor conductividad térmica. Estas características son las que permiten superar las llaves de potencia basadas en Si en los aspectos antes mencionados [3]. En la Figura 2 se presenta una comparación de estos parámetros entre los materiales y destacan en que características influyen.

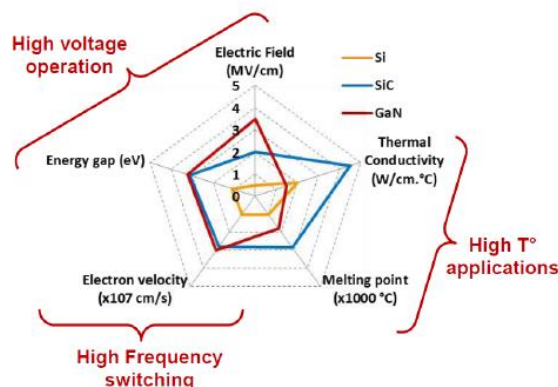


Figura 3: Comparación de las principales características de los semiconductores de silicio y los WBG. Imagen extraída de [2].

Con estos semiconductores se busca generar los generadores de pulsos necesarios para las aplicaciones nsPEF.

Desarrollo

Las técnicas de electroporación utilizan pulsos unipolares como también bipolares, estos últimos no siempre con características simétricas. Una topología que se adapta bien a estos requerimientos es el puente H. Esta puede ser analizada e implementada como dos semi-puentes [4]. Cada uno de estos se conforma por dos transistores y se debe tener especial cuidado en que no se produzca la conducción simultánea de ambas llaves.

Se plantea un circuito de topología tipo semi-puente con transistores SiC a fin de alcanzar los tiempos y corrientes necesarias para las aplicaciones nsPEF. Estas llaves de potencia necesitan, para conmutar en el tiempo deseado, pulsos de control con flancos más rápidos que los de los pulsos deseados y corrientes de algunos ampere en estos pulsos. Los circuitos encargados de generar estos pulsos de control para los transistores son llamados driver y son una parte fundamental de los circuitos de potencia. Una alternativa para esto es la utilización de transistores GaN o Sic en los drivers, otra es la utilización de circuitos integrados específicos para en este tipo de transistores y topologías. En estas aplicaciones, estos circuitos están expuestos a condiciones ambientales y de compatibilidad electromagnética muy severas.

Los transistores SiC adoptados son del fabricante Cree®, modelo C2M0045170P, con una corriente máxima de 72 A y una tensión de bloqueo máxima de 1700 V. Para comandar estos dispositivo se eligió un driver del fabricante Texas Instruments®, modelo UCC21530; este posee una capacidad de corriente de 4 A y -6 A para cada transistor del semi-puente, esto permite optimizar el tiempo de encendido y apagado de cada llave. Además permite la utilización de fuentes partidas para las tensiones de control de los transistores, donde el apagado con tensiones negativas mejora la respuesta de estos.

Se propone un circuito para evaluar los transistores y el driver seleccionados, y se realiza la simulación de este mediante LTSpice®. El circuito utilizado, los modelos provistos por los fabricantes, las directivas de simulación y configuración de las fuentes que generan los pulsos de control necesarios para estos circuitos [5] se presentan en la Figura 4.

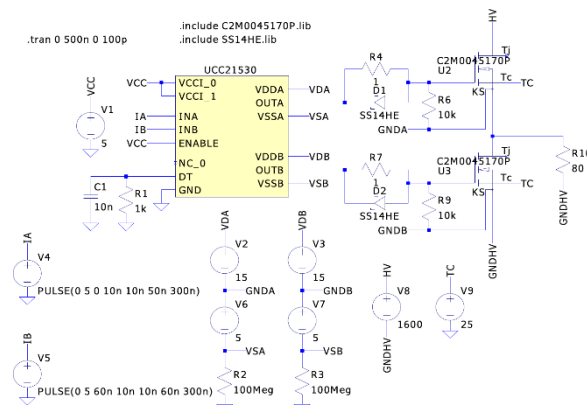


Figura 4: Circuito utilizado para la simulación del semi-puente con transistores SiC y driver.

La tensión adoptada para la fuente de alta tensión es de 1600 V. Para las tensiones de las fuentes de tensión que determinan los pulsos de encendido y apagado de los transistores se adoptó 15 V y -5 V. Finalmente, para la tensión de las señales de control se adoptó 5 V y los pulsos para el control, los que determinan el momento de encendido y apagado de los transistores, tienen un ancho de 60 ns medido a mitad de la amplitud. A pesar que las cargas que presentan las muestras utilizadas para la electroporación presentan una impedancia que varía en base a la energía entregada durante el proceso, se adoptó una carga resistiva

de 80Ω a fin de conocer fácilmente la forma de onda de la corriente en base a la tensión en la carga. En la Figura 5 se presentan los resultados de esta simulación, se observan los pulsos obtenidos sobre la carga y los pulsos de control utilizados.

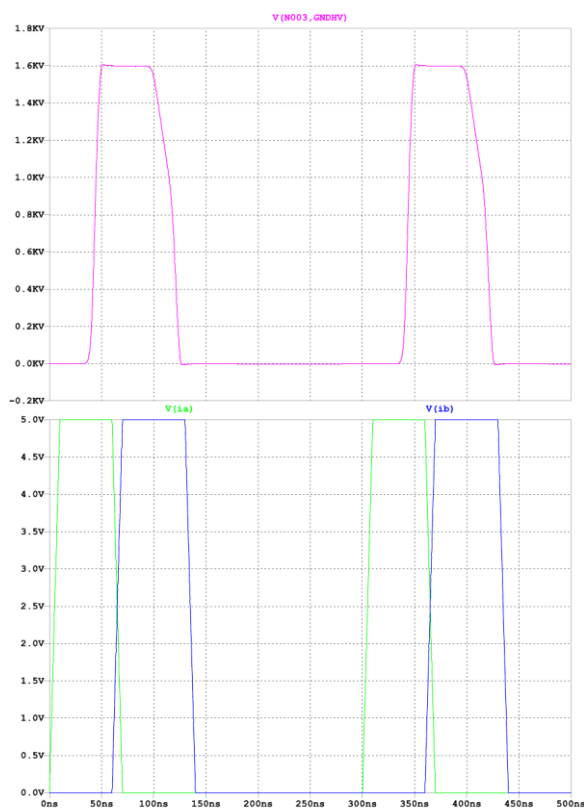


Figura 5: Resultados de la simulación. Pulsos de salida en el gráfico superior y pulsos de entrada, de control, en el inferior.

Los resultados de la simulación presentan pulsos de salida de 1600 V bien formados, el ancho de los mismos, medido al 50% de amplitud, es 75 ns. Los tiempos de subida y bajada de estos pulsos, medidos entre el 10% y el 90% de la tensión máxima, es de 7,8 ns y 20,4 ns respectivamente. La corriente alcanzada en la carga tiene un valor máximo de 20 A, con la misma forma que los pulsos de tensión.

Conclusiones

El circuito propuesto permite generar los pulsos necesarios para las aplicaciones nsPEF, con una duración menor a la centena de nanosegundos, siendo posible reducir los anchos obtenidos. La topología adoptada, los transistores y el driver permiten trabajar en el rango de tiempos deseado con un muy buen tiempo de subida de los pulsos de alta tensión. Esto brinda un prometedor punto de partida para el estudio y desarrollo de nuevas configuraciones de llaves y topologías que permitan la generación de pulsos de mayor tensión y corriente, como así también, pulsos bipolares y con configuraciones más complejas que puedan ser utilizadas para futuras investigaciones en los ámbitos de la medicina y la industria alimenticia.

Referencias

- 1) Marshall, G. (2014). Biomedical Applications of Electrochemistry, Use of Electric Fields in Cancer Therapy. En Kreysa, G.; Ota, K.; Savinell, R. F. (eds), Encyclopedia of Applied Electrochemistry (126-131). Springer, New York.
- 2) Millán, J.; Godignon, P.; Perpiñà, X.; Perez-Tomas, A.; Rebollo, J. (2014). A Survey of Wide Bandgap Power Semiconductor Devices. IEEE Transactions on Power Electronics, 29(5), 2155-2163.
- 3) Lutz, J.; Schlangenotto, H.; Scheuermann, U.; De Doncker, R. (2018). Semiconductor Power Devices; Physics, Characteristics, Reliability. Second Edition. Springer International Publishing.
- 4) Rashid, M. H. (2018). Power Electronics Handbook. Fourth Edition. Butterworth-Heinemann.
- 5) Rashid, M. H. (2012). SPICE for Power Electronics and Electric Power. Third Edition. CRC Press.

Análisis de oscilaciones forzadas no estacionarias en sistemas eléctricos de potencia aplicando transformada synchrosqueezing

Gill Estevez, Pablo^a; Galarza, Cecilia^b, Elizondo, Marcelo^c

^a Facultad Ingeniería Universidad de Buenos Aires FIUBA

^b Centro de Simulación Computacional CSC CONICET

^c Pacific Northwest National Laboratory PNNL, Estados Unidos

pgill@fi.uba.ar

Resumen

En este artículo, se presenta una metodología para el análisis y localización de fuentes de oscilaciones forzadas (FO) no estacionarias en sistemas eléctricos. En primer lugar, la transformada de “synchrosqueezing” de Fourier (FSST) se utiliza para proporcionar una representación concentrada de tiempo-frecuencia (TF). Sobre esta representación en el plano TF se aplica un algoritmo de detección de curvas (denominadas ridges) representativas de la frecuencia instantánea de las componentes oscilatorias no estacionarias. Luego, se realiza el filtrado y descomposición en el dominio del tiempo de las señales aplicando la anti-transformada sobre las curvas identificadas. Finalmente se aplica el método Dissipating Energy Flow (DEF) para localizar la fuente de las oscilaciones forzadas. Este método efectúa una integración numérica de los términos de la función de energía del sistema para las componentes oscilatorias filtradas. La tasa del DEF de cambio permite rastrear y localizar la fuente de la FO en el sistema de potencia. La metodología se prueba utilizando datos simulados de unidades de medición fasorial (PMU).

Abstract

In this paper, we present a methodology for the analysis of non-stationary FOs. Firstly, Fourier synchrosqueezing transform (FSST) is used to provide a concentrated time-frequency representation of the signals that allows identification and retrieval of non-stationary signal components. To continue, the Dissipating Energy Flow (DEF) method is applied to the extracted components to locate the source of forced oscillations. The methodology is tested using simulated PMU data. The results show that the proposed FSST-based signal decomposition provides a systematic framework for the application of DEF Method to non-stationary FOs.

Palabras clave: oscilaciones forzadas, señales no estacionarias, unidades de medición fasorial (PMU), análisis tiempo – frecuencia.

Introducción

A diferencia de las oscilaciones naturales, que dependen principalmente de las características dinámicas del sistema, las oscilaciones forzadas (FO) están determinadas por entradas y perturbaciones que impulsan el sistema [1], [2]. Los FO pueden ocurrir en los sistemas de potencia debido a diferentes causas, como fallas del equipo, diseños de control inadecuados y condiciones anormales de funcionamiento del generador [3]. La presencia sostenida de oscilaciones forzadas significativas en el sistema eléctrico podría provocar efectos adversos a largo plazo. Por ejemplo, fatiga del equipo y posible daño a los ejes de rotores de generadores sincrónicos o reducción de la calidad de la energía. Es evidente que el seguimiento de estas oscilaciones, la comprensión de cómo actúan en los sistemas de potencia y la implementación de estrategias de mitigación son cuestiones relevantes a considerar [3].

La forma más eficaz de mitigar las oscilaciones sostenidas es localizar la fuente y desconectarla de la red. Esta acción requiere localizar el componente del sistema que causa las oscilaciones [4]. En los últimos años se han propuesto muchos métodos para localizar la fuente, y cada uno de ellos tiene ventajas y desventajas y solo se puede utilizar con éxito en circunstancias específicas [5]. Entre estos métodos, el método Dissipating Energy Flow (DEF) [4] ha mostrado el mejor rendimiento y se aplicó recientemente a datos obtenidos de una experiencia práctica [6]. La mayoría de los métodos para analizar FO asumen que la frecuencia de la fuente de oscilación es estacionaria [1], [3], [4], [6] - [10]. Sin embargo, eventos pasados han demostrado que la frecuencia fundamental de FO podría ser no estacionaria (por ejemplo, en el evento del 3 de octubre de 2017 en ISO-NE) [11].

Synchrosqueezing Transform (SST) es una técnica de análisis de tiempo-frecuencia (TF) que fue diseñada para descomponer señales en componentes constituyentes con características oscilatorias variables en el tiempo [12]. SST es una alternativa al método empírico de descomposición en modo (EMD) [13] con una base analítica más sólida [14]. La SST se introdujo originalmente en el contexto de la Transformada Wavelet Continua (CWT) [12]. La SST basada en CWT (WSST) reasigna los coeficientes de wavelet en escala o frecuencia combinando los coeficientes que contienen las mismas frecuencias instantáneas (IF), de modo que la energía resultante se concentra alrededor de las curvas de IF de las oscilaciones moduladas. En [15] se propuso una extensión natural de WSST mediante el uso de la transformada de Fourier de corta duración (STFT). Esta técnica se denominó SST basada en STFT (FSST) [14]. Los métodos tradicionales como STFT o CWT están restringidos por el principio de incertidumbre de Heisenberg, es decir, no se puede lograr una alta resolución en los dominios de tiempo y frecuencia simultáneamente. Por lo tanto, los métodos clásicos de análisis de TF lineal generan una representación TF "borrosa", sin poder caracterizar con precisión las características de TF de señales no estacionarias [16]. La SST está relacionada con la clase de algoritmos de post procesamiento de reasignación de tiempo-frecuencia (TFR) que se utilizan para la estimación de IF a partir del módulo de una representación de TF. Los métodos TFR aplican un mapa de reasignación que concentra y agudiza la energía del espectrograma alrededor de las curvas IF, lo que da como resultado un gráfico TF puntiagudo [17]. A diferencia de las técnicas clásicas de TFR, la SST permite la reconstrucción de los componentes [14]. Por lo tanto, la SST se ha aplicado con éxito para analizar señales no estacionarias en varias aplicaciones, como la lectura de electrocardiografía médica (ECG) [18], imágenes de cristales atómicos en física [19], [20], ingeniería mecánica [21]-[23], investigación artística [24][25], geología [26], etc. Anteriormente, la SST se ha aplicado en el campo de los sistemas de potencia para la identificación de parámetros de oscilaciones naturales de baja

frecuencia [27] y la detección de oscilaciones subsíncronas [28]. En ambos casos, el método se aplicó a datos simulados de modelos de sistemas de potencia reducida. Sin embargo, la SST aún no se ha aplicado para analizar FO en sistemas de energía eléctrica utilizando datos de PMU.

En este artículo, presentamos una metodología novedosa basada en el uso de FSST para extraer componentes no estacionarios de los sistemas de potencia FO. Esta técnica se aplica tanto a datos PMU simulados como reales. Luego aplicamos el Método DEF a los componentes extraídos para rastrear la fuente de la FO. El propósito de la metodología propuesta es proporcionar un marco sistemático para la aplicación del método DEF en el caso de FO no estacionarios.

Fundamentos

La transformada de Fourier ventaneada (STFT) de la señal $s(t)$ es:

$$V_s^g(\eta, t) = \int_{\mathbb{R}} s(\tau)g(\tau - t)e^{-j[2\pi\eta(\tau-t)]}d\tau \quad (1)$$

La señal no estacionaria $s(t)$ se representa mediante la superposición de componentes oscilatorias:

$$s(t) = \sum_{k=1}^K s_k(t) + r(t) \quad (2)$$

$$s_k(t) = A_k(t) e^{j2\pi \varphi_k(t)}, \quad (3)$$

La frecuencia instantánea IF de $s_k(t)$ es $\varphi'_k(t)$.

Se define el siguiente operador para estimar la IF localmente en un instante t :

$$\begin{aligned} \bar{f}(\eta, t) &= \frac{1}{2\pi} \partial_t \arg \{V_s^g(\eta, t)\} \\ &= \eta + \text{Im} \left\{ \frac{V_s^{g'}(\eta, t)}{2\pi V_s^g(\eta, t)} \right\} \end{aligned} \quad (4)$$

Partiendo de la STFT, la transformada synchrosqueezing mueve los coeficientes según el mapeo

Los coeficientes de la FSST se calculan según:

$$T_s^g(f, t) = \frac{1}{g(0)} \int_0^\infty V_s^g(\eta, t) \delta[f - \bar{f}(\eta, t)] d\eta \quad (5)$$

Donde δ denota la distribución de Dirac. La FSST concentra la información de las componentes oscilatorias de la señal en torno a las curvas denominadas ridges asociadas a cada $\varphi'_k(t)$.

Las componentes pueden ser reconstruidas en dominio del tiempo integrando en torno a un banda de frecuencia d sobre las ridges:

$$s_k(t) = \int_{|f - \varphi'_k(t)| < d} T_s^g(f, t) df \quad (6)$$

El método DEF se basa en el cálculo del flujo la energía disipativa (términos de la función de energía del sistema dinámico que varían según la trayectoria) que permite rastrear la fuente de una oscilación forzada. Para una rama del sistema se calcula según:

$$W_{ij} \approx \int \Delta P_{ij} d\Delta\theta_i + \int \Delta Q_{ij} \frac{d\Delta V_i}{V_i}. \quad (7)$$

Donde P_{ij} y Q_{ij} son los flujos de potencia activa y reactiva en la rama i - j , V_i y θ_i tensión y el ángulo de la tensión en la barra i . Δ indica que son señales filtradas para una componente oscilatoria del sistema. La tasa de cambio del W permite localizar la fuente de la perturbación en la red: si es positiva implica que la fuente está en más atrás de la barra i , sino de la barra j .

Metodología

La metodología consta de los siguientes pasos:

- 1) Pre-procesamiento de datos PMU
- 2) Generar representación tiempo-frecuencia de las señales de V P Q y θ de las ramas y generadores monitoreadas del sistema mediante FSST
- 3) Aplicar algoritmo de detección de ridges asociadas a cada componente no-estacionara de la señal, sobre el plano TF.
- 4) Reconstruir componente de la señal en dominio del tiempo, aplicando transformada inversa sobre las curvas identificadas.
- 5) Aplicar método DEF para localizar la fuente de la oscilación forzada

Resultados

La figura 1 muestra el sistema de prueba WECC 179. Los datos para la simulación se obtuvieron de [11].

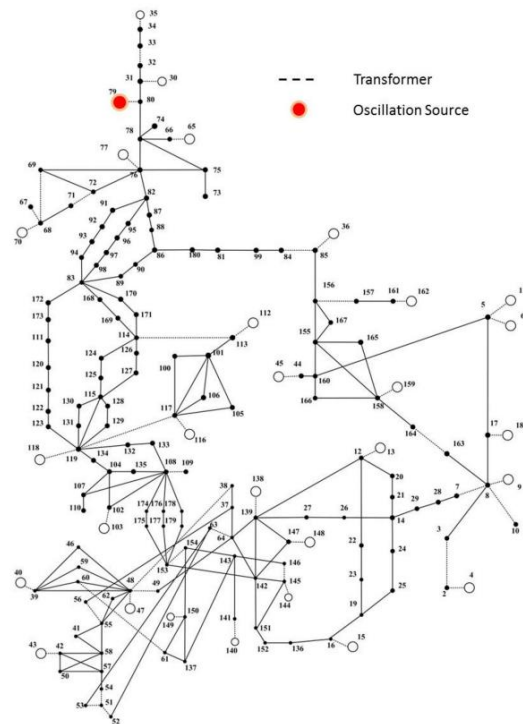


Figura 1: Sistema de prueba WECC 179.

Se aplicó una potencia mecánica no estacionaria en el generador 79 (indicado como la fuente de oscilación en la Figura 1) utilizando una señal cuadrada cuya frecuencia fundamental aumenta linealmente de 0,1 Hz a 0,3 Hz en 100 s. La figura 2 muestra la potencia mecánica P_{mec} , la potencia eléctrica P , la magnitud de la tensión terminal V , la potencia reactiva Q del generador 79.

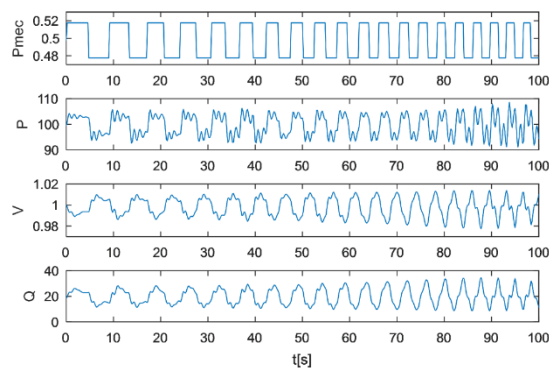


Figura 2: Potencia mecánica, potencia eléctrica, tensión y potencia activa y reactiva del generador 79

La Fig. 4 muestra la amplitud de STFT sobre el plano TF para P , V , Q y ángulo de tensión terminal $\text{ang}V$ del generador 79, usando una ventana gaussiana con $\sigma = 2.5$ s. Puede verse que STFT concentra la información alrededor de las crestas que corresponden a la frecuencia fundamental variable en el tiempo y las frecuencias armónicas de la oscilación forzada. Luego, FSST se calcula usando (5). La Figura 4 muestra que FSST mejora la

definición alrededor de cada cresta permitiendo una mejor identificación de los componentes en el plano tiempo-frecuencia.

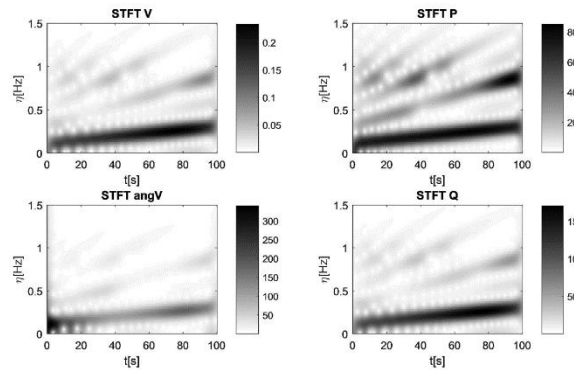


Figura 3: STFT de magnitudes de gen 79

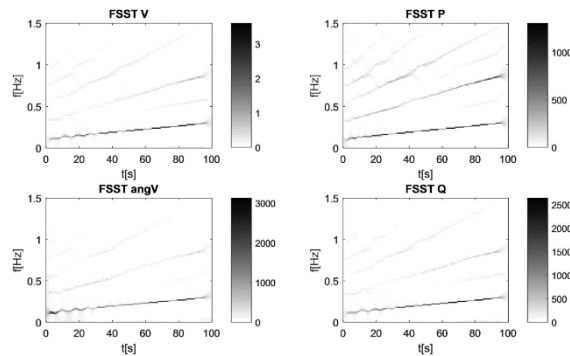


Figura 4: FSST de magnitudes de gen 79

La figura 5 muestra los resultados del algoritmo de identificación de crestas aplicado a la amplitud FSST del flujo de potencia activa del generador 79. Las curvas obtenidas se utilizan para descomponer las otras tres variables (V, Q y angV) del generador respectivo.

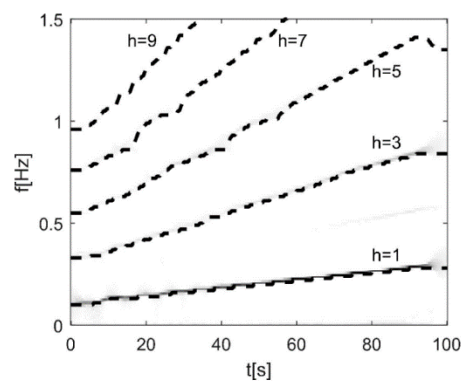


Figura 5: Identificación de ridges en gen 79

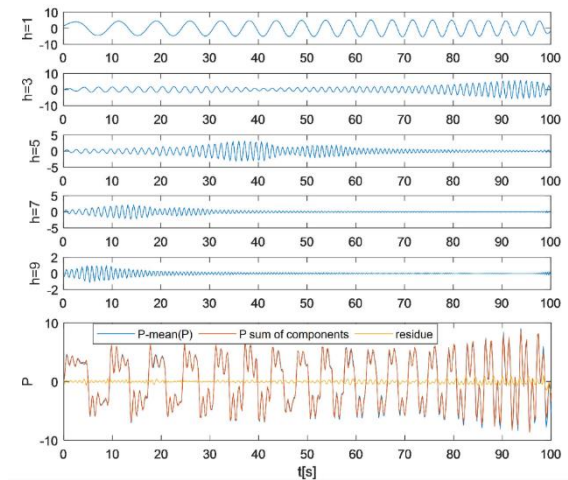


Figura 6: Descomposición de la potencia eléctrica P del gen 79

Por ejemplo, la Figura 6 muestra los armónicos de orden h extraídos aplicando la fórmula de reconstrucción (6) alrededor de cada ridge, para la potencia eléctrica del generador 79. El mismo procedimiento se realiza en los 29 generadores del sistema de prueba WECC179.

Después de realizar la descomposición para todas las variables de los generadores, calculamos la DEF asociada para todos los armónicos y generadores. La Figura 6 muestra la DEF de armónicos con mayor energía para los generadores con mayor participación en el proceso de oscilación. Al observar los diferentes armónicos, vemos que la tasa de cambio de DEF es positiva solo en el generador 79. Por lo tanto, se concluye que el generador 79 es la fuente de oscilaciones, identificando correctamente la fuente de la FO.

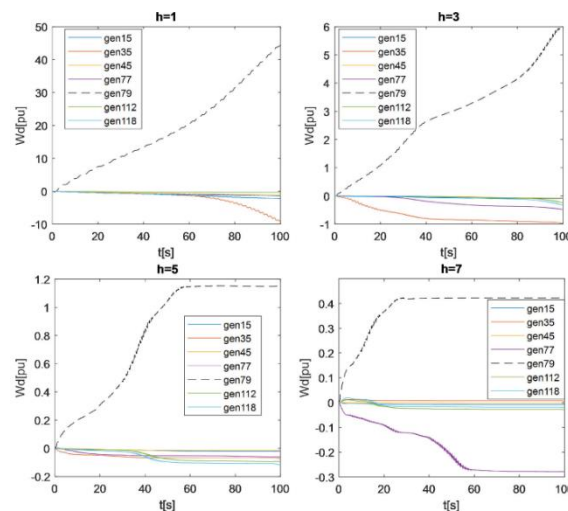


Figura 6: DEF gen 79 para cada componente oscilatoria

Conclusiones

Este artículo presenta una metodología basada en la FSST y el método DEF para analizar y localizar la fuente de FO no estacionarios. La FSTT proporciona un espectro de TF concentrado alrededor de las curvas de cresta, que representan las frecuencias variables en el tiempo de los componentes oscilatorios de la señal. El filtrado de componentes se

realiza directamente desde el plano TF mediante la integración del espectro FSST alrededor de las curvas de cresta identificadas, sin la necesidad de diseñar cuidadosamente varios filtros de paso de banda. Luego, la DEF calculada para cada componente no estacionario se usa para rastrear la fuente de FO. Los resultados del análisis sobre datos de PMU simulados muestran la eficiencia de la metodología propuesta, que es un método sistemático para el análisis de FO no estacionarios.

Referencias

- [1] J. Follum and J. W. Pierre, "Detection of periodic forced oscillations in power systems," *IEEE Trans. Power Syst.*, vol. 31, no. 3, pp. 2423–2433, May 2016.
- [2] J. Follum, J. W. Pierre, and R. Martin, "Simultaneous estimation of electromechanical modes and forced oscillations," *IEEE Trans. Power Syst.*, vol. 32, no. 5, pp. 3958–3967, Sep. 2017.
- [3] N. R. Guideline, "Forced oscillation monitoring & mitigation," North American Reliability Cooperation, Atlanta, GA, USA, Tech. Rep., 2017. [Online]. Available: https://www.nerc.com/comm/PC_Reliability_Guidelines_DL/Reliability_Guideline_-_Forced_Oscillations_-_2017-07-31_-_FINAL.pdf
- [4] L. Chen, Y. Min, and W. Hu, "An energy-based method for location of power system oscillation source," *IEEE Trans. Power Syst.*, vol. 28, no. 2, pp. 828–836, May 2013.
- [5] D. Trudnowski, "Available methods, algorithms and tools for oscillation detection and source location," in *Proc. IEEE Power Energy Soc. General Meeting*, Sep. 2018. [Online]. Available: http://web.eecs.utk.edu/~kaisun/TF/Panel_2018IEEEPEESGM/4-Dan_AvailableMethodsAlgorithmsAndTools.pdf
- [6] S. Maslennikov, B. Wang, and E. Litvinov, "Dissipating energy flow method for locating the source of sustained oscillations," *Int. J. Elect. Power*, vol. 88, pp. 55–62, 2017.
- [7] N. Zhou and J. Dagle, "Initial results in using a self-coherence method for detecting sustained oscillations," in *Proc. IEEE Power Energy Soc. General Meeting*, vol. 30, no. 1, pp. 522–530, Jan. 2015.
- [8] S. A. N. Sarmadi and V. Venkatasubramanian, "Inter-area resonance in power systems from forced oscillations," *IEEE Trans. Power Syst.*, vol. 31, no. 1, pp. 378–386, Jan. 2016.
- [9] M. Ghorbaniparvar, "Survey on forced oscillations in power system," *J. Modern Power Syst. Clean Energy*, vol. 5, no. 5, pp. 671–682, Sep. 2017.
- [10] R. Jha and N. Senroy, "Wavelet ridge technique based detection of forced oscillation in power system signal," *IEEE Trans. Power Syst.*, vol. 34, no. 4, pp. 3306–3308, Jul. 2019.
- [11] S. Maslennikov, X. Xu, K. Sun, and B. Wang, "Test cases library of power system sustained oscillations," Apr. 2018. [Online]. Available: <http://web.eecs.utk.edu/kaisun/Oscillation/>
- [12] I. Daubechies, J. Lu, and H.-T. Wu, "Synchrosqueezed wavelet transforms: An empirical mode decomposition-like tool," *Appl. Comput. Harmon. A.*, vol. 30, no. 2, pp. 243–261, 2011.
- [13] N. E. Huang et al., "The empirical mode decomposition and the Hilbert spectrum for nonlinear and non-stationary time series analysis," *P. Roy. Soc. A-Math. Phys.*, vol. 454, no. 1971, pp. 903–995, Mar. 1998.
- [14] A. Hemakom, K. Powezka, V. Goverdovsky, U. Jaffar, and D. P. Mandic, "Quantifying team cooperation through intrinsic multi-scale measures: Respiratory and cardiac synchronisation in choir singers and surgical teams," *Roy. Soc. Open Sci.*, vol. 4, pp. 1–23, Nov. 2017.
- [15] T. Oberlin, S. Meignen, and V. Perrier, "The fourier-based synchrosqueezing transform," in *Proc. IEEE Int. Conf. Acoust., Speech Signal Process.*, May 2014, pp. 315–319.

- [16] Z. Li, J. Gao, H. Li, Z. Zhang, N. Liu, and X. Zhu, "Synchroextracting transform: The theory analysis and comparisons with the synchrosqueezing transform," *Signal Process.*, vol. 166, 2020, Art. no. 107243.
- [17] G. Thakur, E. Brevdo, N. S. Fućkar, and H.-T. Wu, "The synchrosqueezing algorithm for time-varying spectral analysis: Robustness properties and new paleoclimate applications," *Signal Process.*, vol. 93, no. 5, pp. 1079–1094, 2013.
- [18] H.-T. Wu, Y.-H. Chan, Y.-T. Lin, and Y.-H. Yeh, "Using synchrosqueezing transform to discover breathing dynamics from ECG signals," *Appl. Comput. Harmon. A.*, vol. 36, no. 2, pp. 354–359, 2014.
- [19] H. Yang, J. Lu, and L. Ying, "Crystal image analysis using 2d synchrosqueezed transforms," *Multiscale Model. Simul.*, vol. 13, no. 4, pp. 1542–1572, 2015.
- [20] J. Lu, B. Wirth, and H. Yang, "Combining 2d synchrosqueezed wave packet transform with optimization for crystal image analysis," *J. Mechanics Phys. Solids*, vol. 89, pp. 194–210, 2016.
- [21] X. Tu, W. Bao, Y. Hu, S. Abbas, and F. Li, "Parameterized synchrosqueezing transform with application to machine fault diagnosis," *IEEE Sensors J.*, vol. 19, no. 18, pp. 8107–8115, Sep. 2019.
- [22] Y. Hu, X. Tu, and F. Li, "High-order synchrosqueezing wavelet transform and application to planetary gearbox fault diagnosis," *Mech. Syst. Signal Process.*, vol. 131, pp. 126–151, 2019.
- [23] S. Wang, X. Chen, C. Tong, and Z. Zhao, "Matching synchrosqueezing wavelet transform and application to aeroengine vibration monitoring," *IEEE Trans. Instrum. Meas.*, vol. 66, no. 2, pp. 360–372, Feb. 2017.
- [24] H. Yang, J. Lu, W. P. Brown, I. Daubechies, and L. Ying, "Quantitative canvas weave analysis using 2-d synchrosqueezed transforms: Application of time frequency analysis to art investigation," *IEEE Signal Process. Mag.*, vol. 32, no. 4, pp. 55–63, Jul. 2015.
- [25] B. Cornelis, H. Yang, A. Goodfriend, N. Ocon, J. Lu, and I. Daubechies, "Removal of canvas patterns in digital acquisitions of paintings," *IEEE Trans. Image Process.*, vol. 26, no. 1, pp. 160–171, Jan. 2017.
- [26] H. Yang and L. Ying, "Synchrosqueezed curvelet transform for twodimensional mode decomposition," *SIAM J. Math. Anal.*, vol. 46, no. 3, pp. 2052–2083, 2014.
- [27] W. Wang, Q. Di, Y. Jin, B. Wang, and M. Yu, "Parameter identification of low frequency oscillation based on Fourier synchrosqueezing transform," in *Proc. Int. Conf. Appl. Mechanics, Math., Model. Simul.*, 2018, pp. 1–10.
- [28] M. He, S. Nimmagadda, S. Bayne, and M. Giesselmann, "Subsynchronous oscillation detection using phasor measurements and synchrosqueezing transform," in *Proc. IEEE Power Energy Soc. General Meeting*, Jul. 2015, pp. 1–5.

23

Segmentación a partir de la similitud del movimiento

Javier Luiso - Juan I. Giribet
Facultad de Ingeniería - UBA

Se presenta en este trabajo los resultados de aplicar dos técnicas para segmentar un conjunto de puntos característicos que describen trayectorias a lo largo de una secuencia de frames. El criterio de la segmentación es la similitud de la trayectoria realizada. Se analizan dos enfoques distintos para la obtención de la matriz sobre la que se aplicará la segmentación. Por último se analizan tres técnicas para realizar la segmentación: k-means, Principal Component Analysis (PCA) y spectral clustering. Se trabaja con un set de datos que son parte de la base de datos de prueba "HOPKINS 155 DATASET" del Vision Lab de la Johns Hopkins University, Baltimore, USA. Se propone una mejora en la estrategia para mejorar la segmentación en casos ruidosos en donde las técnicas ensayadas no siempre conducen a una buena segmentación.

Introducción

La técnica de segmentación utilizada en los ensayos realizados está basada en el trabajo de Park et al [1], donde en primer lugar se propone construir la "Shape Interaction Matrix", SIM [2], a partir de la descomposición QR de la matriz de trayectorias. Si tenemos $X = [P_1, \dots, P_S]$, matriz de trayectorias de $2F \times N$, para un conjunto de N puntos que son trackeados a lo largo de una secuencia de F frames, resulta que:

$$X^T E = \hat{Q} R$$

donde E es la matriz de permutación. Park et al. demuestran que la matriz SIM $Q = \hat{Q} \hat{Q}^T$.

Es necesario notar que por lo dicho antes $k = \dim \text{span}\{X\} \leq N$, entonces

$$X^T E = \hat{Q} \begin{bmatrix} R_k \\ 0 \end{bmatrix}$$

R_k se obtiene eliminando las filas con cuyos elementos son nulos o por debajo de un umbral, también puede tomarse $k = \text{rango}(R)$.

$$X^T E = [\hat{Q}_k, \hat{Q}_2] \begin{bmatrix} R_k \\ 0 \end{bmatrix} = \hat{Q}_k R_k$$

Entonces la matriz SIM queda:

$$Q = \hat{Q}_k \hat{Q}_k^T$$

con Q matriz de $N \times N$.

Lo ideal es que la estructura de la matriz SIM sea diagonal por bloques, porque en estos casos la segmentación es directa. Esto solamente ocurre cuando los puntos están previamente ordenados según pertenezcan al mismo objeto. Pero justamente este no es el caso habitual. Para reconstruir la estructura diagonal por bloques, Park propone un problema de minimización denominado "min-max cut" [3]. EL trabajo de Zha et al. [4] demuestra que este problema termina siendo similar a realizar una descomposición QR con pivoteo sobre las columnas de una matriz \hat{Q}_k , pero ahora para obtener un espacio de cuya dimensión coincida con la cantidad de grupos (S) en que se desea segmentar. La descomposición es

$$\hat{Q}_k^T E_S = Q_S R = Q_S [R_{11}, R_{12}]$$

donde Q_S es una matriz ortogonal de $S \times S$, R_{11} es una matriz triangular superior de $S \times S$ y E es la matriz de permutación.

Luego se calcula la matriz

$$\hat{R} = R_{11}^{-1} [R_{11}, R_{12}] E_S$$

La matriz \hat{R} de $S \times N$ puede interpretarse como que el elemento \hat{r}_{sn} indica el nivel de confianza de asignar el punto característico n al grupo s . Por lo tanto la segmentación se puede realizar determinando la fila donde se encuentra el máximo de cada columna.

Debido a que estos niveles de confianza son sensibles a los casos donde los datos estén afectados por ruido, Park propone realizar un segundo paso de refinamiento de la segmentación. Este paso consiste en dejar sin clasificar aquellos puntos cuyos niveles de confianza para todos los grupos se encuentren por debajo de un umbral. A partir de los puntos que han sido bien clasificados para cada grupo, calcular una base para el subespacio generado por los puntos clasificados de cada grupo, $p_{i1}, p_{i2}, \dots, p_{iS_i}$, para $i = 1, \dots, S$ usando "Principal Component Analysis". Sea U_i la base del subespacio para el grupo i , la clasificación de los puntos que habían quedado sin clasificar se realiza calculando la distancia de ese punto a cada subespacio U_i y tomando la mínima distancia para decidir a que grupo pertenece.

$$\hat{S}_j = \underset{i}{\operatorname{argmin}} \|p_j - (c_i + U_i U_i^T (p_j - c_i))\|^2$$

para $j = 1, \dots, k$ y $c_i = \frac{\sum_{j=1}^{N_i} p_j}{N_i}$. El punto p_j es asignado al grupo \hat{S}_j

A continuación se muestra los resultados de aplicar esta técnica de segmentación en varios juegos de datos reales. En cada caso se calcula la matriz SIM para valores de $k = 2, 3, 4, 5$ y en cada caso se realiza la segmentación para luego aplicar la etapa de refinamiento para distintos valores de umbrales tanto para el umbral mínimo como el umbral máximo.

Ensayos

DataSet "cars4"

La secuencia de frames muestra un automóvil girando en un cruce, tomado frontalmente, ver fig. 1. La figura 2 muestra la segmentación correcta de los puntos.

Se realizó la segmentación para 4 valores de k , parámetro que determina el rango de la matriz Q a utilizar en la construcción de la SIM. Los resultados de las segmentación para cada valor se pueden observar en la figura 3. Puede observarse que para $k = 4$ y $k = 5$ la segmentación contiene pocos errores. Para cada uno de estos valores de k se aplica a continuación el proceso de refinamiento. Los resultados se pueden observar en las figuras 4 y 5.



Figure 1: Frame con los puntos característicos

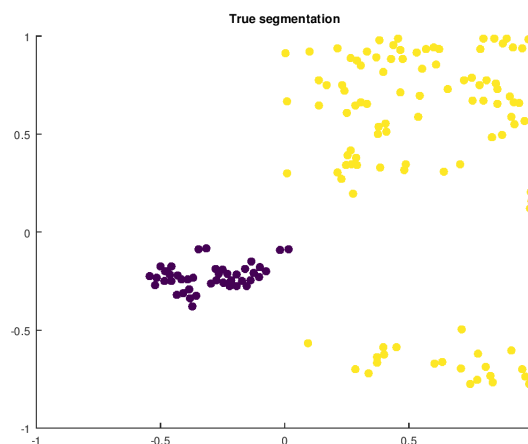


Figure 2: Segmentación correcta de los puntos

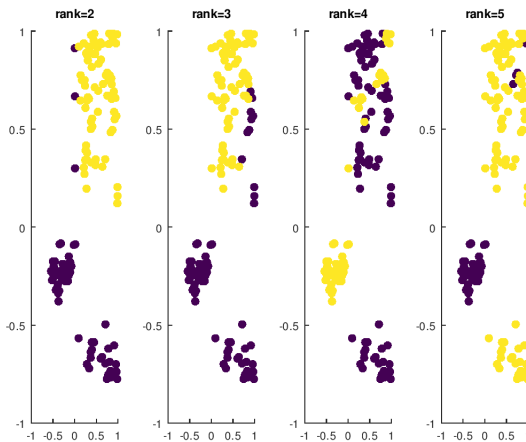


Figure 3: Segmentación para $k = 2,3,4,5$

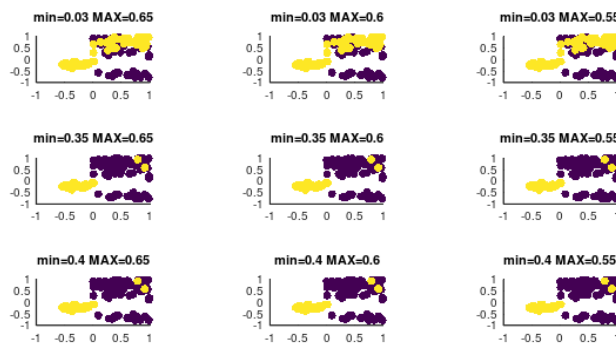


Figure 4: Refinamiento para $k = 4$

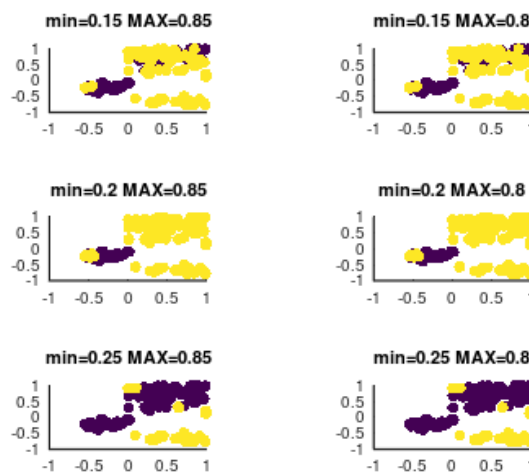


Figure 5: Refinamiento para $k = 5$

DataSet cars6

La secuencia de frames muestran un automóvil que hace un giro en un cruce, tomado desde el lado y seguido por la cámara, ver fig 6. La figura 7 muestra la segmentación correcta de los puntos.

Se realizó la segmentación para 4 valores de k , parámetro que determina el rango de la matriz Q a utilizar en la construcción de la SIM. Los resultados de las segmentación para cada valor se pueden observar en la figura 8. Puede observarse que para $k = 4$ la segmentación contiene pocos errores. Para este valor de k se aplica a continuación el proceso de refinamiento. Los resultados se pueden observar en las figuras 9.



Figure 6: Frame con los puntos característicos

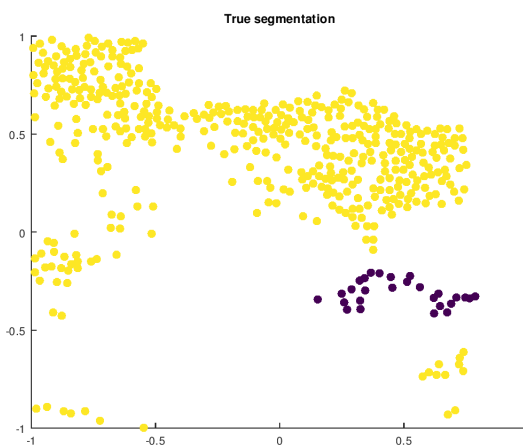


Figure 7: Segmentación correcta de los puntos

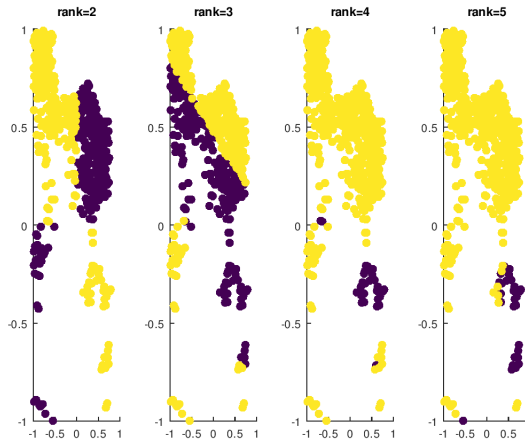


Figure 8: Segmentación para $k = 2,3,4,5$

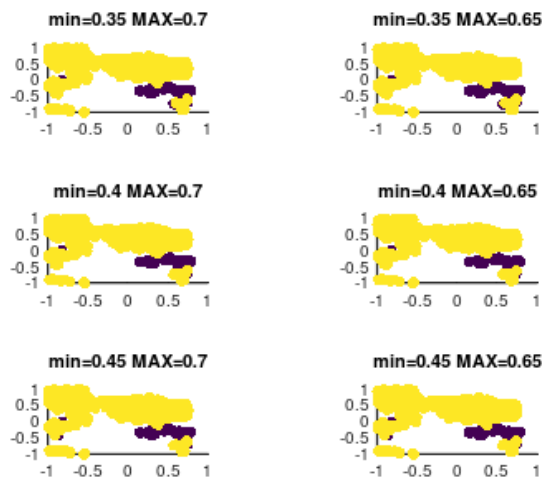


Figure 9: Refinamiento para $k = 4$

DataSet people2

La secuencia de frames muestran una mujer caminando. Es importante notar que una persona en movimiento es objeto parcialmente no rígido, ver fig 10. La figura 11 muestra la segmentación correcta de los puntos.

Se realizó la segmentación para 4 valores de $k = 2,3,4,5$, parámetro que determina el rango de la matriz Q a utilizar en la construcción de la SIM. Para ninguno de estos valores la segmentación es buena, fig. 12.

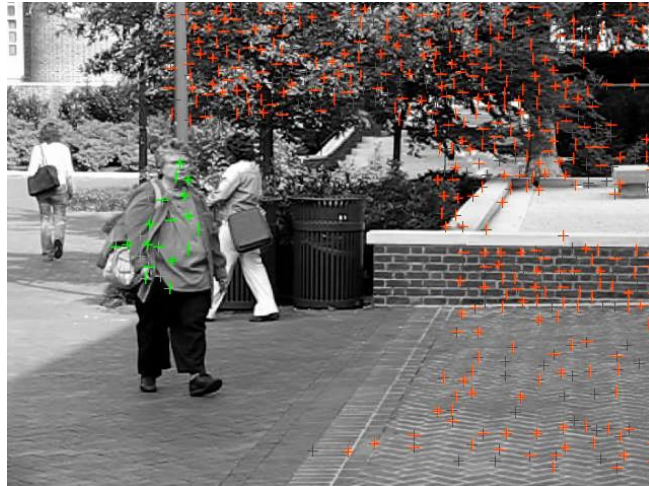


Figure 10: Frame con los puntos característicos

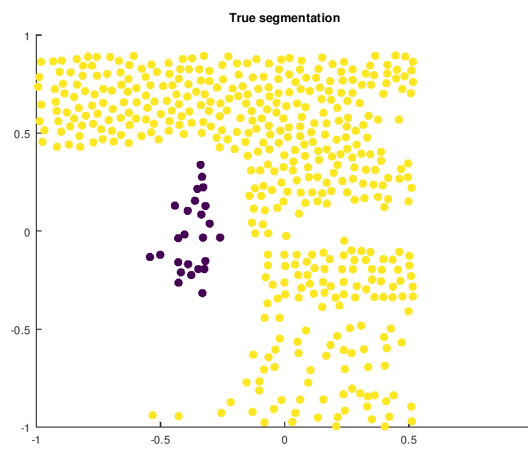


Figure 11: Segmentación correcta de los puntos

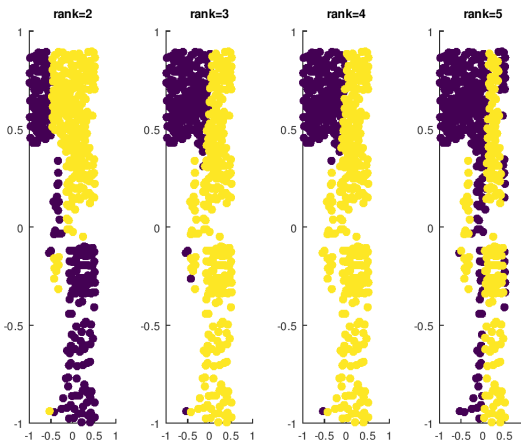


Figure 12: Segmentación para $k = 2,3,4,5$

Otros ensayos

Además de los datasets arriba detallados se probaron algunos juegos más con resultados parecidos a los anteriores. En algunos casos para algún valor de k en particular y luego de ajustar los valores de los umbrales la segmentación lograda es buena. Pero en otros casos, siempre resulta en un mal resultado al segmentar.

Valores óptimos para la segmentación correcta

La técnica propuesta de segmentación, a partir de construir la matriz SIM mediante la descomposición QR y haciendo un refinamiento, puede considerarse que en algunos casos da buenos resultados. Pero no es posible en este momento decir en cuales de esos casos, es decir que tienen de distinguibles los casos exitosos de los menos exitosos.

Pero aún para los datasets donde se ha logrado una buena segmentación, ésta se alcanza luego de determinar el mejor juego de parámetros. Esto es, en primer lugar decidir cuántas filas significativas de la matriz R se van a tomar:

$$X^T E = [\hat{Q}_k, \hat{Q}_2] \begin{bmatrix} R_k \\ 0 \end{bmatrix} = \hat{Q}_k R_k$$

Es decir cuál va a ser el valor de $k = \text{rango}(R_k)$. En todos los casos ensayados siempre se han evaluados valores de $k \in [2,7]$ y para los casos exitosos $\text{rango}(R_k) \leq 5$.

Pero una vez determinado k , la correcta segmentación se alcanza ajustando los valores de los umbrales de los niveles de confianza de asignar cada punto a uno de los clusters. En este punto el resultado es muy sensible a estos parámetros, ver fig. 5 y los valores óptimos son a su vez distintos para cada dataset, comparar figuras 4 y 9.

Propuesta: Segmentación intermedia

El principal problema con la segmentación es el nivel de ruido presente en los datos. La posición de los puntos característicos a lo largo de la secuencia de frames está afectada por ruido inherente a los procesos aplicados para la detección de dichos puntos característicos y la determinación de su posición en cada uno de los frames. Asumiendo que el ruido afecta de manera independiente a cada punto característico, es razonable suponer que dentro del conjunto de puntos característicos de un objeto habrá puntos con mayor niveles de ruido que otros.

En el caso ideal donde no hay ruido, la segmentación funciona bien porque las trayectoria de los puntos de un mismo objeto, entendida cada trayectoria como un vector dentro de un espacio, pertenecerán al mismo subespacio (o al menos estarán muy próximas) y decimos que ese subespacio caracteriza o esta asociado a dicho objeto. El criterio de pertenencia por proximidad resulta del hecho que el subespacio característico se define a partir de formar un conjunto generador con aquellos vectores (trayectorias) para los cuales tenemos un nivel elevado de confianza de que pertenecen a ese objeto.

En un caso real, el ruido termina “desplazando” a cada vector dentro del espacio en el que se encuentra. La presencia de ruido termina aumentando la varianza del conjunto generador; el subespacio generado cambia, no es el mismo que en ausencia de ruido. Incluso podría darse el caso que algunos elementos estuviesen muy afectados por el ruido, pero no todos. Los vectores “ruidosos” se alejan del subespacio original, podríamos especular escenarios donde se alejan tanto que dejan de pertenecer a dicho subespacio, de hecho pasarían a formar parte de otro.

Dicho esto podemos pensar entonces que la presencia de ruido causa que los vectores se distribuyan de modo que formen más sub-espacios que la cantidad de objetos reales que existen en la escena. Quizás si hiciésemos una segmentación con un número mayor de clusters que los objetos reales presentes, la asignación de los puntos característicos te mine siendo más apropiada. Lo que esperamos que ocurra es que los puntos de un objeto ahora queden agrupados en dos o más grupos pero estos grupos serán distintos a los grupos de los otros objetos.

Segmentando en un número mayor de clusters

Vamos a trabajar con el dataset “truck2”, que muestra un camión en un cruce, tomado desde la parte frontal, fig 13. donde la aplicación de la segmentación en dos clusters no es buena, ver fig. 14 y 15.



Figure 13: Dataset "truck2"

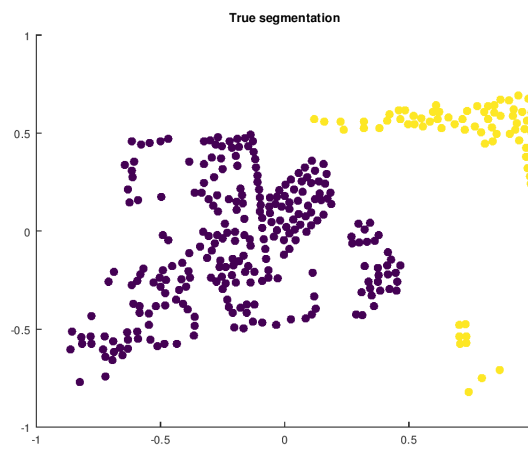


Figure 14: Segmentación correcta para el Dataset "truck2"

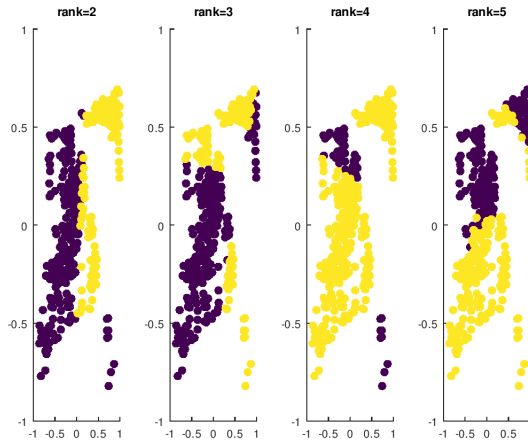


Figure 15: Segmentación con errores para el Dataset “truck2”

Se realiza una segmentación con 3 clusters. Los resultados para valores de $k = 3, 4, 5$ se pueden ver en la figura 16. Donde se puede ver que los puntos que pertenecen al camión quedan agrupados en dos clusters, y los puntos del fondo de la escena quedan agrupados en un tercer cluster. Un refinamiento posterior mejora aún más la segmentación, fig. 17.

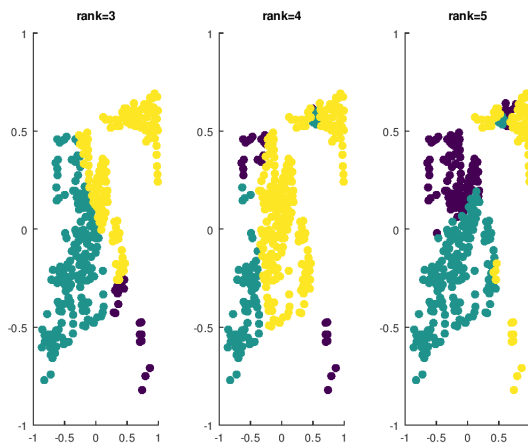


Figure 16: Segmentación con 3 clusters.

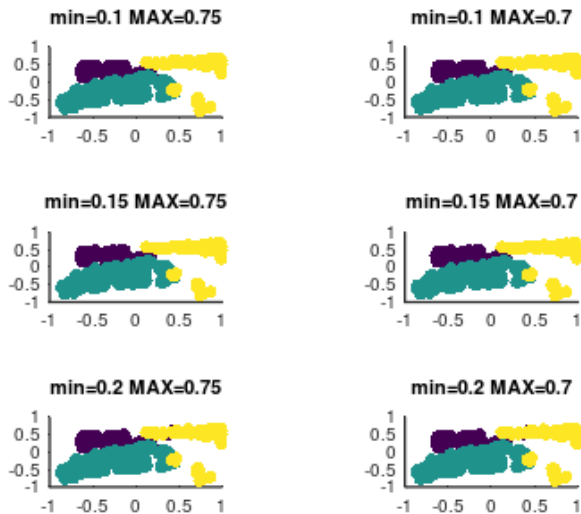


Figure 17: Refinamiento de la segmentación

Segmentación del dataset “people2”

En la sección anterior se ensayó la segmentación con el dataset que muestra una mujer caminando. Lo interesante de este dataset es que uno de los objetos es parcialmente no rígido, ver fig 10. La figura 11 muestra la segmentación correcta de los puntos. Se expuso que el resultado de la segmentación era malo.

Se volvió a realizar la segmentación pero ahora con 3 clusters y luego con 4. El primer caso muestra una mejor segmentación, pero todavía hay un número importante de puntos que quedan mal clasificados. Ver figuras 18 y 19.

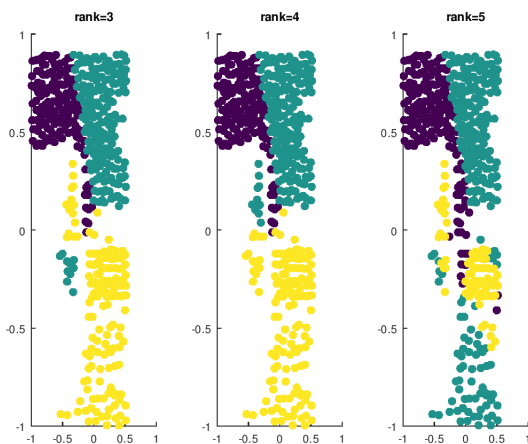


Figure 18: Segmentación con 3 clusters

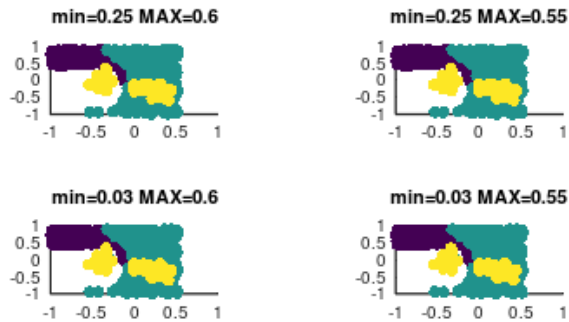


Figure 19: Optimización de la seg. con 3 clusters

En el segundo caso, cuando se realiza la segmentación considerando 4 clusters, el resultado es correcto aún sin necesidad de refinamiento, fig. 20.

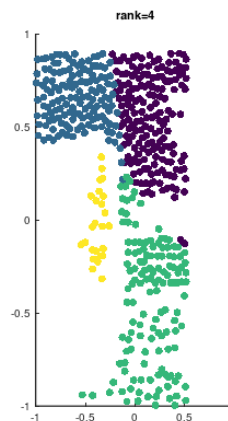


Figure 20: Segmentación con 4 clusters

Lo anterior parece confirmar que en escenarios con ruido es conveniente segmentar en un número mayor de clusters a la cantidad de objetos presentes en la escena. Lo que plantea la pregunta de cómo determinar cuál es el número óptimo de clusters a utilizar, porque no se puede suponer que la cantidad de objetos sea conocida a priori ni tampoco que tengamos información de como es la distribución correcta de los puntos. Sería de mucha utilidad poder definir una métrica que permita analizar los resultados de las segmentaciones realizadas con 2, 3 y 4 clusters, figuras 12, 18 y 20, y poder indicar cuál es la mejor.

Conclusiones y próximos pasos

Este ensayo ha permitido analizar la robustez de la solución propuesta por [1], la cual incluso

con la mejora en el criterio de refinamiento, en presencia de ruido no siempre conduce a una buena segmentación de los puntos. En algunos casos, la presencia de ruido lleva a resultados muy malos.

Nuestra propuesta de aumentar la cantidad de clusters parece funcionar mejor en esos casos ruidosos. Los puntos quedan asignados a una cantidad mayor de clusters, los cuales luego deberán ser asignados a los objetos. Se trata de agregar un nivel intermedio de agrupamiento.

A futuro se ve la necesidad de poder encontrar una métrica para determinar analíticamente cuál es el número óptimo de clusters a utilizar.

Queda luego por resolver que clusters pertenecen a un mismo objeto. Pero esto puede hacerse mediante el análisis del movimiento promedio de los puntos de cada clusters. Porque aún cuando hayan quedado agrupados en distintos clusters, por el hecho de pertenecer al mismo objeto su movimiento o trayectoria es similar. Aplicando otro criterio o método que extraiga información de la dinámica, ahora no de los puntos sino del cluster, es posible agruparlos en la cantidad real de objetos que existen en la escena.

References

- [1] Park, Jin & Zha, Hongyuan & Kasturi, Rangachar. (2004). Spectral Clustering for Robust Motion Segmentation. 3024. 390-401. 10.1007/978-3-540-24673-2_32.
- [2] J. Costeira and T. Kanade. 1995. A multi-body factorization method for motion analysis. In Proceedings of the Fifth International Conference on Computer Vision (ICCV '95). IEEE Computer Society, Washington, DC, USA, 1071-.
- [3] Chris H. Q. Ding, Xiaofeng He, Hongyuan Zha, Ming Gu, and Horst D. Simon. 2001. A Min-max Cut Algorithm for Graph Partitioning and Data Clustering. In Proceedings of the 2001 IEEE International Conference on Data Mining (ICDM '01), Nick Cercone, Tsau Young Lin, and Xindong Wu (Eds.). IEEE Computer Society, Washington, DC, USA, 107-114.
- [4] Hongyuan Zha, Xiaofeng He, Chris Ding, Horst Simon, and Ming Gu. 2001. Spectral relaxation for K-means clustering. In Proceedings of the 14th International Conference on Neural Information Processing Systems: Natural and Synthetic (NIPS'01), T. G. Dietterich, S. Becker, and Z. Ghahramani (Eds.). MIT Press, Cambridge, MA, USA, 1057-1064.

Detección de blancos dieléctricos mediante señales de ultra-wideband

Marchi, Edgardo^a; Cervetto, Marcos^a; Galarza, Cecilia^b

^a *Departamento de Comunicaciones - INTI / Facultad de Ingeniería - UBA*

^b *Centro de Simulación Computacional - CoNICET / Facultad de Ingeniería - UBA*
emarchi@fi.uba.ar; emarchi@inti.gob.ar

Resumen

Las señales de Ultra-Wideband (UWB) han recibido un gran interés en los últimos años debido a su gran ancho de banda, lo que conlleva una mayor resolución espacial, y su extremadamente baja densidad espectral de potencia, lo que resulta en una mejor coexistencia con otros sistemas y un menor impacto sobre los objetos iluminados.

En el presente trabajo se muestra el desarrollo e implementación de una plataforma experimental de UWB, también se introduce la implementación en software de un algoritmo para análisis tiempo-frecuencia (T-F), con el objetivo de poder analizar tanto movimientos oscilatorios de materiales dieléctricos como diferentes respuestas impulsivas de este tipo de blancos. El mismo permite potenciales aplicaciones de sensado de señales cardíacas o respiratorias sin contacto, como así también el sensado de humedad en suelo, granos, etc. Finalmente se muestra su aplicación y potencial en el sensado sin contacto de signos vitales.

Abstract

Ultra-Wideband (UWB) signals have received great interest in recent years due to their high bandwidth, which leads to higher spatial resolution, and their extremely low power spectral density, resulting in better coexistence with other systems and also in less impact over illuminated objects.

The present work shows the development and implementation of an experimental UWB platform, the software implementation of an algorithm for time-frequency analysis is also introduced, with the aim of analyzing both oscillatory movements of dielectric materials and different impulsive responses of this kind of targets. It allows potential applications of non-contact cardiac or respiratory signal sensing, as well as moisture sensing in soil, grains, etc. Finally, its application and potential in non-contact sensing of vital signs is shown.

Palabras clave: Ultra-Wideband, Signal Processing, Time-frequency analysis, System-On-Chip

Introducción

Los sistemas ultra-wideband (UWB) son, hablando en términos generales, sistemas de radio en los cuales el ancho de banda instantáneo es como mínimo 500 MHz o más del 20% de la frecuencia central. En la actualidad, los sistemas UWB se han convertido en una tecnología emergente debido a sus características únicas que hacen viables aplicaciones en diversos campos de las radiocomunicaciones. Estas aplicaciones incluyen posicionamiento [1], detección de objetos ocultos [2], imágenes, monitoreo y diagnóstico médico [3], comunicaciones de corto alcance [4], entre otras.

Durante el estudio y desarrollo de algoritmos y técnicas para procesamiento de señales, una plataforma de hardware digital versátil se vuelve indispensable para implementar y verificar su correcto funcionamiento. Hay un limitado número de soluciones comerciales en este aspecto para UWB, y su costo sigue siendo demasiado alto en la mayoría de los casos. Además, muchas poseen limitaciones en cuanto al acceso a los componentes de hardware y software del sistema, lo cual dificulta la validación de los algoritmos diseñados. Algunas están apuntadas a aplicaciones específicas, como localización [5], [6] o detección [7]. Otras son onerosas [6], [7] o de especificaciones limitadas [5], [6].

Muchas aplicaciones utilizan radios impulsivas, esto es, sistemas que transmiten y reciben pulsos muy cortos en tiempo. Las señales electromagnéticas UWB impulsivas, a diferencia de los radares tradicionales, pueden sensor la presencia de materiales no metálicos en la zona iluminada.

En este marco, se planteó el diseño de una plataforma experimental modular, con fines científicos. Posteriormente, se trabajó en el estudio y desarrollo de un algoritmo de análisis en tiempo-frecuencia para monitoreo de signos vitales sin contacto mediante señales UWB.

Plataforma digital basada en SoC

La arquitectura modular basada en *System-On-Chip* (SoC) [8] permite implementar algoritmos de DSP tanto en hardware como en software e intercambiar y modificar módulos independientemente.

El SoC dispone de dos secciones principales; el *Processing System* (PS) siendo un microprocesador embebido ARM Cortex-A9 *dual core*, y la *Programmable Logic* (PL) siendo una FPGA del tipo Kintex 7. Ambas partes se encuentran integradas en el mismo chip.

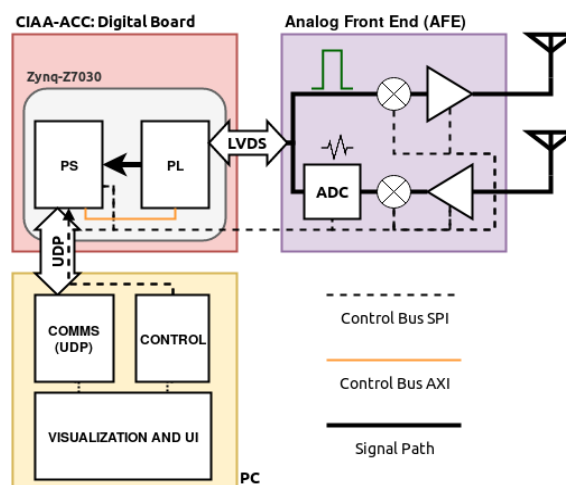


Figura 1: Diagrama en bloques de la plataforma desarrollada

Se desarrolló sobre la PL (FPGA) un esquema ADC de tiempo equivalente (TE) totalmente configurable y un *ensemble averager* para mejorar la SNR. Esto permitió utilizar convertores A-D de bajo costo, logrando frecuencias de muestreo equivalente superiores a los 5 GSps (configurable).

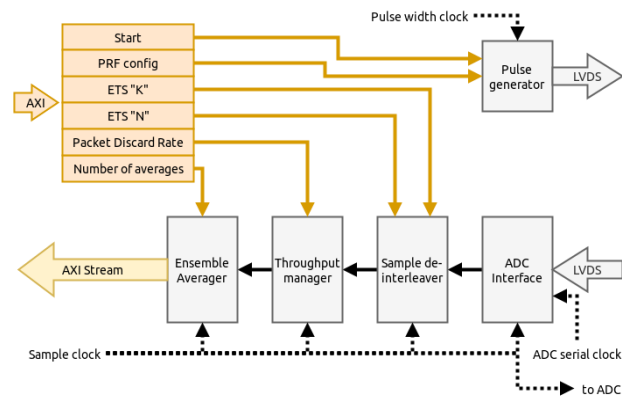


Figura 2: Bloques de procesamiento implementados en hardware sobre la PL

El prototipo experimental se implementó exitosamente con componentes *off-the-shelf*. Permite una frecuencia de portadora de hasta 4.5 GHz y un BW de 1.2 GHz con una tasa de muestreo en TE configurable de, por ejemplo, 5.04 GSps con 16 bits por canal (I+Q).

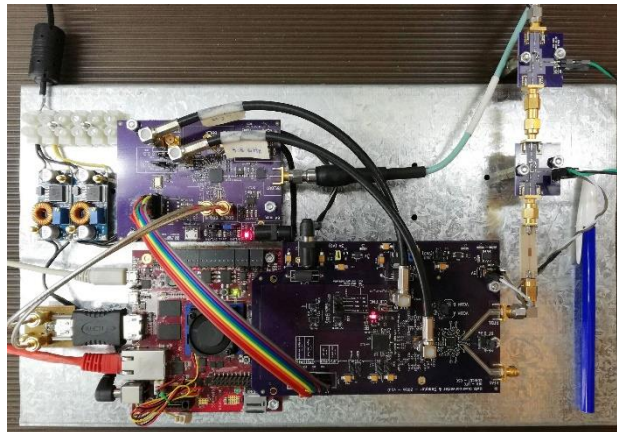


Figura 3: Prototipo experimental

Análisis t-f aplicado a detección de signos vitales

La alta resolución de las señales UWB permite sensar las variaciones involucradas, por ejemplo, en el movimiento torácico. Esto permite extraer las frecuencias respiratorias y/o cardíacas. Para ello es necesario contar con métodos de análisis tiempo frecuencia con

gran resolución espectral y temporal que permitan separar y reconstruir las señales individuales.

Los métodos tradicionales como la transformada Wavelet (WT), no logran obtener una discriminación adecuada de los distintos componentes de la señal UWB, obteniéndose representaciones T-F borrosas. Recientemente técnicas de remapeo del plano tiempo-escala al plano T-F lograron aumentar la resolución de dichas representaciones. Un método prometedor de este tipo, para esta clase de aplicaciones es el llamado *Synchrosqueezing Transform* [9]. El algoritmo propuesto en el presente trabajo se basa en esta última técnica pero incluye una adaptación a los datos de entrada. Esto es, redistribuye las frecuencias de análisis dentro de las bandas donde la señal a analizar transporta más energía y por ende más información. Esto permite un aumento local de la resolución sin un incremento significativo de la complejidad computacional del algoritmo, haciéndolo un buen candidato para aplicaciones de tiempo real.

La Figura 4 muestra el aumento de resolución obtenido luego de analizar una señal UWB, capturada a partir de iluminar el torso de una persona, respecto de los métodos de análisis T-F tradicionales.

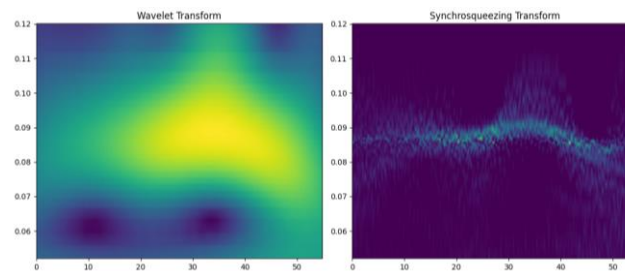


Figura 4: Análisis T-F de una señal respiratoria sensada con UWB mediante WT (izquierda) versus algoritmo adaptativo (derecha)

El aumento de resolución obtenido permite recuperar los modos oscilatorios de interés, pudiendo reconstruir selectivamente las componentes deseadas. La Figura 5 muestra la reconstrucción temporal de la representación T-F de la señal de la Figura 4.

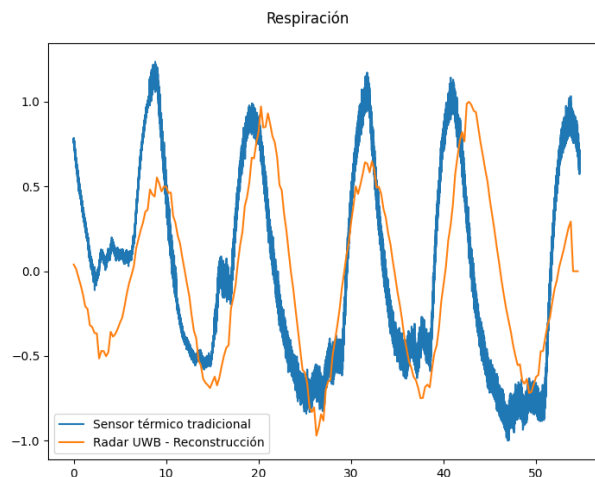


Figura 5: Señal respiratoria recuperada de un sensor UWB sin contacto (naranja) vs señal respiratoria capturada con un sensor térmico por contacto (azul)

Se observa que se puede recuperar la señal respiratoria a partir de la señal de radar, sin contacto con la persona monitoreada.

Conclusiones

Se logró desarrollar y construir una plataforma de UWB experimental capaz de alojar implementaciones de algoritmos de DSP tanto en SW como en HW. El diseño modular y la disponibilidad de tanto software como hardware programable ofrece una alta flexibilidad a la hora de implementar algoritmos, especialmente para aplicaciones de tiempo real.

Mediante el procesamiento de las señales de UWB desde una perspectiva de análisis T-F, se logró extraer las señales respiratorias sin contacto alguno con la persona iluminada. El algoritmo adaptativo demostró mejorar la resolución respecto de los métodos tradicionales.

Se puede concluir que este tipo de señales posee un potencial elevado en cuanto al sensado y detección sin contacto, especialmente de materiales dieléctricos como pueden ser tejidos orgánicos.

Trabajo futuro

Se investigarán e implementarán algoritmos más avanzados que permitan la extracción sin contacto de signos vitales que requieren mayor sensibilidad, como puede ser la frecuencia cardíaca, con una precisión adecuada para su uso como complemento o reemplazo de métodos tradicionales por contacto.

Referencias

- [1] H. Kobayashi y A. F. Molisch, «Localization via Ultra- Wideband Radios: a look at positioning aspects for future sensor», IEEE Signal Process. Mag., p. 15, jul. 2005, doi: 10.1109/MSP.2005.1458289.
- [2] A. Vasalos, «Late time response analysis in UWB radar for Concealed Weapon Detection:

feasibility study», p. 332.

- [3] F. Khan, A. Ghaffar, N. Khan, y S. H. Cho, «An Overview of Signal Processing Techniques for Remote Health Monitoring Using Impulse Radio UWB Transceiver», *Sensors*, vol. 20, n.o 9, p. 2479, abr. 2020, doi: 10.3390/s20092479.
- [4] G. B. Giannakis, «Ultra-wideband communications: an idea whose time has come», en 2003 4th IEEE Workshop on Signal Processing Advances in Wireless Communications - SPAWC 2003 (IEEE Cat. No.03EX689), Rome, Italy, 2003, p. 3. doi: 10.1109/SPAWC.2003.1318908.
- [5] A. De Angelis, M. Dionigi, A. Moschitta, y P. Carbone, «A Low-Cost Ultra-Wideband Indoor Ranging System», *IEEE Trans. Instrum. Meas.*, vol. 58, n.o 12, pp. 3935-3942, dic. 2009, doi: 10.1109/TIM.2009.2020834.
- [6] A. Feldman, A. Bahr, J. Colli-Vignarelli, S. Robert, C. Dehollain, y A. Martinoli, «Toward the Deployment of an Ultra-Wideband Localization Test Bed», en 2011 IEEE Vehicular Technology Conference (VTC Fall), San Francisco, CA, USA, sep. 2011, pp. 1-5. doi: 10.1109/VETEFC.2011.6093170.
- [7] Q. Liu, Y. Wang, y A. E. Fathy, «A compact integrated 100 GS/s sampling module for UWB see through wall radar with fast refresh rate for dynamic real time imaging», en 2012 IEEE Radio and Wireless Symposium, Santa Clara, CA, USA, ene. 2012, pp. 59-62. doi: 10.1109/RWS.2012.6175295.
- [8] M. Cervetto, E. Marchi, y C. G. Galarza, «A Fully Configurable SoC-Based IR-UWB Platform for Data Acquisition and Algorithm Testing», *IEEE Embed. Syst. Lett.*, vol. 13, n.o 2, pp. 53-56, jun. 2021, doi: 10.1109/LES.2020.2997660.
- [9] I. Daubechies, J. Lu, y H.-T. Wu, «Synchrosqueezed wavelet transforms: An empirical mode decomposition-like tool», *Appl. Comput. Harmon. Anal.*, vol. 30, n.o 2, pp. 243-261, mar. 2011, doi: 10.1016/j.acha.2010.08.002.

25

Acerca de la necesidad de introducir la enseñanza del cálculo fraccional en el ámbito de la ingeniería argentina

Salvó, Germán ^a; Piacquadio Losada, María Natividad ^a;
Gun, Marcelo Claudio ^{a, b}

^a Universidad de Buenos Aires, Facultad de Ingeniería, Argentina

^b Comisión Nacional de Energía Atómica, Argentina

mail de contacto: germansalvo@gmail.com

Resumen

El Cálculo Fraccional se trata, básicamente, de derivadas e integrales de orden no entero. En vez de calcular la derivada segunda (o de orden "2") de "y" respecto de "x", "2 veces", se trata de calcular, por ejemplo, la derivada de orden " π " de "y" respecto de "x", " π veces". El planteo original fue plasmado en una carta que L'Hôpital, enviara a Leibniz en 1695 consultando respecto a la derivada de orden "1/2". Este planteo original de orden fraccionario ha sobrevivido al tiempo y es la razón por la cual esta disciplina se llama "Cálculo Fraccional", aunque abarca órdenes de derivación de números reales e incluso complejos.

En el mundo, y en las últimas décadas, ha habido un gran desarrollo del tema. Se aplica a múltiples disciplinas científicas, diversas ramas de la física, sistemas complejos, biología, fisiología y ciencia de materiales, en particular al comportamiento viscoelástico y a relajación de dieléctricos.

En este trabajo se mostrarán aspectos básicos del cálculo fraccional, en particular su relación con la fórmula de Havriliak-Negami de relajación de dieléctricos, inicialmente empírica, y que hoy se obtiene en forma teórica aplicando el cálculo fraccional, surgiendo como figura estelar la función de Mittag-Leffler.

El objetivo último de este trabajo es mostrar, e idealmente impulsar, un área del conocimiento que no parece tener gran desarrollo en Argentina, más allá de algunos destacados casos puntuales, y donde no hay, o no hemos podido encontrar, asignaturas de grado o posgrado, cursos o congresos que lo traten.

Abstract

Fractional Calculus is basically about derivatives and integrals of non-integer order. Instead of calculating the second derivative (or of order "2") of "y" with respect to "x", "2 times", one tries to calculate, for example, the derivative of order " π " of "y" with respect to "x", " π times".

The original approach was embodied in a letter that L'Hôpital sent to Leibniz in 1695 inquiring about the derivative of order "1/2". This original approach of fractional order has survived time and is the reason why this discipline is called "Fractional Calculus", although it encompasses derivative orders of real and even complex numbers.

In the world, and in the last decades, there has been a great development of the subject. It is applied to multiple scientific disciplines, various branches of physics, complex systems, biology, physiology and materials science, in particular to viscoelastic behavior and relaxation of dielectrics.

In this work basic aspects of fractional calculus will be shown, in particular its relationship with the Havriliak-Negami formula of dielectric relaxation, initially empirical, and that today is obtained in theoretical form applying fractional calculus, emerging as a stellar character the Mittag-Leffler function.

The ultimate objective of this work is to show, and ideally to promote, an area of knowledge that does not seem to have a great development in Argentina, beyond some outstanding specific cases, and where there are not, or we have not been able to find, undergraduate or graduate courses, courses or congresses that deal with it.

Palabras clave: Cálculo Fraccional, Relajación, Dieléctricos, Havriliak-Negami, Mittag-Leffler.

Introducción

Desde la pregunta iniciática de fines del siglo XVII, hubo que esperar a mediados del siglo XIX para encontrarse con los trabajos fundacionales del Cálculo Fraccional desarrollados por Riemann, Liouville, y por Grünwald y Letnikov. Pero el tema explotó desde mediados de la década de 1970, en la que comenzaron a publicarse una importante cantidad de libros y trabajos. Una visión histórica resumida hasta 2010 puede consultarse en [1] y [2]. De estas referencias destacamos en forma no exhaustiva, ya sea por su importancia histórica, claridad, o por haberlos consultado para [3], el libro, editado por Ross, de 1975, que publica los anales de un congreso de 1974, el libro pionero de Oldham y Spanier de 1974, y el de Samko, Kilbas y Marichev de 1993. De importancia son también los libros citados en [2] de Baleanu, Tenreiro Machado, Hilfer y Kiryakova.

A la hora de analizar el comportamiento dinámico de sistemas se hace necesario explorar las ecuaciones diferenciales que describen su evolución, que ahora contendrán términos de derivadas fraccionarias, combinadas o no con derivadas de orden entero. Aquí de las referencias citadas en [2] se recomiendan el libro de Podlubny de 1993, el de Diethelm de 2010, o el capítulo de Gorenflo y Mainardi, en el libro editado por Carpinteri y Mainardi en 1997.

De Podlubny resultan también imperdibles sus notas de un curso que dictó en Italia en 2012 [4].

A posteriori de la reseña [2] del 2010, el tema ha avanzado en forma acelerada. De consulta obligada son los libros (y además los papers) de Uchaikin (y Sibatov) [5]-[7], con múltiples aplicaciones en física y ciencia de materiales.

De Bruce J. West, además de su libro de 2003 (junto con Bologna y Grigolini) [2], debe citarse [8].

Para aplicaciones en física, es de consulta [9].

En 2019 la editorial De Gruyter ha publicado un “Handbook” de ocho tomos, editado por Tenreiro Machado, incluyendo además de la teoría básica, a ecuaciones diferenciales, métodos numéricos, aplicaciones en física, control, ingeniería, ciencias de la vida y ciencias sociales.

Sólo para mencionar publicaciones recientes, mencionamos [10] que aplica a señales y sistemas, y a sistemas de control (que es el Volumen 7 de una serie iniciada en 2018 por De Gruyter sobre “Fractional Calculus in Applied Sciences and Engineering”), y [11] sobre ecuaciones diferenciales fraccionarias.

En lo que respecta a publicaciones periódicas específicas sobre estos temas, varias se describen en [2], entre las que podemos destacar:

- Fractional Calculus & Applied Analysis, <https://www.degruyter.com/journal/key/fca/html>, que se publica desde 2011.
- Journal of Fractional Calculus and Applications (JFCA), <http://math-frac.org/Journals/JFCA/default.php>, que se publica también desde 2011, y contiene trabajos de acceso libre, incluso anales de congresos.
- Progress in Fractional Differentiation and Applications (PFDA), de Natural Sciences Publishing, editada por Baleanu, <http://www.naturalspublishing.com/show.asp?JorID=48&pgid=0>, desde 2015.

Acercándonos a nuestra geografía, de México se destaca la gran cantidad de trabajos publicados por Martín Edgar Reyes Melo, de la Universidad Autónoma de Nueva León, e investigadores asociados, aplicados al comportamiento viscoelástico y dieléctrico de polímeros, entre otros tópicos.

En Brasil encontramos a Edmundo Capelas de Oliveira de la Unicamp (Universidade Estadual de Campinas Instituto de Matemática Estatística e Computação), especializado en estos temas (<https://www.ime.unicamp.br/pesquisa/grupos/fisica-matematica>), y muy activo en cuanto a trabajos presentados, al límite del conocimiento actual, y con un libro publicado [12]. La tesis de Ester Cristina Fontes de Aquino Rosa [13], una de las varias tesis dirigidas por Capelas de Oliveira, nos ha resultado de mucha utilidad en [3].

En Argentina, sólo encontramos destacados esfuerzos aislados:

- Craiem y otros investigadores de la Universidad Favaloro, en la Ciudad de Buenos Aires, sobre aplicaciones biológicas, citando por ejemplo a [14].
- En la Universidad Nacional del Nordeste, Formosa, el trabajo de Cerutti, Dorrego y Luque, plasmado en el libro [15].
- Sauchelli y Laboret, de la Universidad Nacional de Córdoba [16].
- Troparevsky y Fabio, de la Facultad de Ingeniería de la UBA, y de la Universidad Nacional de San Martín, respectivamente [17].
- Rosconi y Tarzia de la Universidad Austral de Rosario [18].
- Acevedo, Peralta y Di Bárbaro de la Universidad Nacional de Catamarca [19].

Sin duda, la situación descripta arriba respecto a la Argentina es parcial e incompleta. Como seguramente será inexacta la visión de lo que no hemos encontrado en Argentina como, por ejemplo, materias de grado o posgrado, congresos o seminarios dedicados, libros, además del citado [15]. Se piden disculpas de antemano por omisiones involuntarias, pero cuando decimos “no encontramos” no decimos que no existan, sino que no los hemos encontrado después de muchas horas de búsqueda en red.

A priori nos da la impresión de estar perdiendo aquí el tren de la historia en esta disciplina, que nos parece de gran utilidad, tanto en lo teórico, como en las aplicaciones. Basta con recorrer el índice de [5] y [6] para comprenderlo.

Pero lo más importante es que, parafraseando a West en [8], para comprender el comportamiento de la complejidad, de los sistemas complejos, es necesaria una nueva forma de pensamiento, que vaya más allá del tradicional método científico basado en los tradicionales métodos matemáticos, y ese nuevo enfoque estaría fundamentado en el uso del cálculo fraccional.

Desarrollo

En lo que sigue se mostrarán aspectos básicos del cálculo fraccional y su relación con la teoría fenomenológica de dieléctricos, en particular su relación con la fórmula de Havriliak-Negami, inicialmente empírica, pero que ahora puede “deducirse” a partir de la aplicación del cálculo fraccional.

Funciones especiales

En el cálculo fraccional son de uso común dos funciones especiales, la Función Gamma, y la función de Mittag-Leffler.

Función Gamma

Se define de la siguiente manera [20], con “z”, en general, un número complejo “(x + j. y)”:

$$\Gamma(z) = \int_0^{\infty} e^{-\tau} \cdot \tau^{z-1} \cdot d\tau$$

Tiene las siguientes propiedades, y resulta ser una generalización de la función factorial (“n” un número natural):

$$\Gamma(z + 1) = z \cdot \Gamma(z)$$

$$\Gamma(1) = 1$$

$$\Gamma(n) = (n - 1)!$$

$$\Gamma(1) = 1 = (1 - 1)! = 0!$$

Puede representarse así (Figura 1):

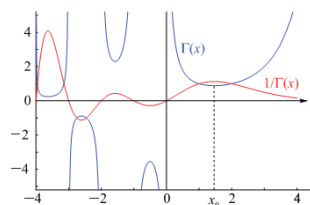


Figura 1: Representación de $\Gamma(x)$, o sea $\Gamma(z)$ para z real (adaptada de [21]).

En [21] puede verse también una representación tridimensional.

Una propiedad útil, que se desprende de la Figura 1, es que $1/\Gamma(x)$ es finita para todo valor de x .

Función de Mittag-Leffler

Se debe al matemático sueco Gösta Mittag-Leffler (1846-1927). No parece haber sido de gran interés durante mucho tiempo: no aparece en la versión original del clásico “Handbook” de funciones matemáticas de Abramowitz y Stegun de 1964, ni sus versiones renovadas del NIST de 2010 [21] y de 2021. Con el desarrollo del cálculo fraccional, esta función ha cobrado una importancia fundamental, incluso se la llama “La reina de las funciones del cálculo fraccional”.

Las hay de 1, 2 y 3 parámetros [12][13][22]: Función de Mittag-Leffler de 3 (tres) parámetros “ a, b y c ” definida como serie de potencias (para “ $c = 1$ ” se reduce a la de 2 parámetros, y para “ $b=1$ y $c = 1$ ” se reduce a la de 1 parámetro):

$$E_{a,b}^c(z) = \sum_{k=0}^{k=\infty} \frac{(c)_k}{\Gamma(a \cdot k + b)} \cdot \frac{z^k}{k!}$$

z : en general, número complejo

a, b, c : en general, números complejos, con parte real > 0

$(c)_k$: “Índice de Pochhammer”

$$(c)_k = \frac{\Gamma(c + k)}{\Gamma(c)}$$

Posee la interesante propiedad de reducirse a la función exponencial:

$$E_1(\pm z) = \sum_{k=0}^{k=\infty} \frac{(\pm z)^k}{\Gamma(k + 1)} = e^{\pm z}$$

Integrales fraccionales

Se toma como punto de partida a la “Fórmula de Cauchy de Integración Repetida” [23]:

$${}_a I_t^n f(t) = \int_a^t d\tau_{n-1} \int_a^{\tau_{n-1}} d\tau_{n-2} \dots \int_a^{\tau_3} d\tau_2 \int_a^{\tau_2} d\tau_1 \int_a^{\tau_1} f(\tau) \cdot d\tau$$

Es decir, la integral definida de la función “ $f(t)$ ”, repetida “ n ” veces, primero integrando entre límites “ a y τ_1 ”, y así siguiendo, para integrar finalmente entre límites “ a y t ”, resultando una función de “ t ”. La Fórmula de Cauchy es:

$${}_a I_t^n f(t) = \frac{1}{(n-1)!} \cdot \int_a^t (t-\tau)^{n-1} \cdot f(\tau) \cdot d\tau$$

Verifica para “ $n=1$ ”, al ser “ $0!=1$ ”.

Se define la Integral Fraccional, a la integral definida de una función real “ f ”, de variable real “ t ” (aquí el tiempo), de orden “ α ” (más arriba era “ n ” en vez de “ α ”, integral repetida “ n ” veces), con “ α ” un número real y “ $\alpha > 0$ ” (antes $n = 1, 2, 3, \dots$), con límites de integración inferior “ a ” y superior “ t ” genérico.

Entonces, como una extensión de la Fórmula de Cauchy:

$${}_a I_t^\alpha f(t) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \cdot \int_a^t (t - \tau)^{\alpha-1} \cdot f(\tau) \cdot d\tau$$

Condición: $t > a$, $\alpha > 0$

La integral fraccional definida antes es la que se llama de Riemann-Liouville de lado izquierdo (left-sided). Con “ $a = 0$ ” se la suele llamar integral de Riemann, y con “ $a = -\infty$ ” se la suele llamar integral de Liouville.

En cambio, la integral fraccional de Riemann-Liouville de lado derecho (right-sided) es:

$${}_t I_b^\alpha f(t) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \cdot \int_t^b (\tau - t)^{\alpha-1} \cdot f(\tau) \cdot d\tau$$

Condición: $b > t$, $\alpha > 0$

Existe una interpretación física de las integrales fraccionales, de lado izquierdo y lado derecho, en la cual, la de lado izquierdo es causal y la de lado derecho no lo es (Figura 2), razón por la cual, para problemas físicos se utiliza la de lado izquierdo.

RIEMANN-LIOUVILLE DE LADO IZQUIERDO (LEFT-SIDED)	RIEMANN-LIOUVILLE DE LADO DERECHO (RIGHT-SIDED)
${}_a I_t^\alpha f(t) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \cdot \int_a^t (t - \tau)^{\alpha-1} \cdot f(\tau) \cdot d\tau$ $t > a$	${}_t I_b^\alpha f(t) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \cdot \int_t^b (\tau - t)^{\alpha-1} \cdot f(\tau) \cdot d\tau$ $b > t$
ESCALA DE TIEMPO	
PASADO DE $f(t)$	FUTURO DE $f(t)$
CAUSAL	NO CAUSAL

Figura 2: Escalas de tiempo para integrales de Riemann-Liouville de lado izquierdo y lado derecho (adaptado de [24]).

Para las aplicaciones dinámicas es conveniente reordenar las integrales fraccionales de Riemann-Liouville de lado izquierdo (y con “ $a = 0$ ”), para poder interpretarlas como integrales de convolución [25]:

$$\begin{aligned} {}_0 I_t^\alpha f(t) &= \int_0^t f(\tau) \cdot \frac{(t - \tau)^{\alpha-1}}{\Gamma(\alpha)} \cdot d\tau = \\ &= \int_0^t f(\tau) \cdot g'(t - \tau) \cdot d\tau \end{aligned}$$

Se puede interpretar a la función “ $f(\tau)$ ” convolucionada con una función “ $g'(t) = \frac{t^{\alpha-1}}{\Gamma(\alpha)}$ ”, con “ $g'(t)$ ” la respuesta del sistema a un impulso unitarios de tipo “ $\delta(t)$ ” (Delta de Dirac) [26].

Esta función “ $g'(t)$ ” posee una singularidad, tiende a “ $+\infty$ ”, para “ $t \rightarrow 0$ ”. Pero, para “ α ” cada vez más chicos, y a medida que “ $\alpha \rightarrow 0$ ”, la singularidad de “ $(t^{\alpha-1} \cong 1/t)$ ” se

contrabalancea con el hecho de “ $\Gamma(\alpha)$ ” también tiende a “ $+\infty$ ” cuando “ $\alpha \rightarrow 0$ ”. Para “ $\alpha = 1$ ” resulta “ $g'(t) = 1 = h(t)$ ”, función escalón de Heaviside unitario.

Entonces,

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} {}_0I_t^\alpha f(t) = \int_{0+}^t f(\tau) \cdot \delta(t - \tau) \cdot d\tau = f(t)$$

representa un sistema “sin memoria”, donde todos los estados previos se han perdido, excepto el más reciente [25]. Por otro lado,

$${}_0I_t^{\alpha=1} f(t) = \int_0^t f(\tau) \cdot d\tau = \int_0^t f(\tau) \cdot h(t - \tau) \cdot d\tau$$

representa el caso de un integrador convencional, o sistema “con perfecta memoria”, y que captura toda la historia previa de la excitación [25].

Entonces, las integrales de Riemann-Liouville de lado izquierdo (y para el caso particular de límite inferior “ $a=0$ ”), con “ $0 < \alpha < 1$ ”,

$${}_0I_t^\alpha f(t) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \cdot \int_0^t (t - \tau)^{\alpha-1} \cdot f(\tau) \cdot d\tau$$


se pueden interpretar como la respuesta de un sistema a una excitación “ $f(t)$ ” (justamente la función a integrar) para sistemas de características entre sin memoria (para “ α ” acercándose a “0”), y de perfecta memoria (para “ α ” acercándose a “1”) [25].

Derivadas fraccionales

Se escribe como “ ${}_aD_t^\alpha f(t)$ ” a la derivada de una función real “ f ”, de variable real “ t ” (aquí el tiempo), de orden “ α ”, con “ α ” un número real, “ $\alpha > 0$ ”, con “ a ” y “ t ” genéricos denominados “terminales” de la diferenciación fraccionaria [2]. Condición: “ $t > a$ ”.

Para órdenes de derivación enteros podría pensarse en una secuencia de operadores (de los de tipo Heaviside) como la siguiente, con “ m ” y “ n ” números enteros:

$${}_aI_t^m f(t); {}_aI_t^{m-1} f(t); \dots; {}_aI_t^2 f(t); {}_aI_t^1 f(t)$$



$${}_aD_t^1 f(t); {}_aD_t^2 f(t); \dots; {}_aD_t^{n-1} f(t); {}_aD_t^n f(t)$$

Dando lugar a la idea de “diferintegración” fraccional:

$${}_aD_t^\alpha f(t) = {}_aI_t^{-\alpha} f(t) \quad \alpha > 0$$

O también,

$${}_aI_t^\alpha f(t) = {}_aD_t^{-\alpha} f(t) \quad \alpha > 0$$

Resultando la derivada fraccional de Riemann-Liouville (RL) de lado izquierdo,

$$\begin{aligned} {}^{RL}{}_aD_t^\alpha f(t) &= \\ &= \frac{1}{\Gamma(n - \alpha)} \cdot \frac{d^n}{dt^n} \left[\int_a^t (t - \tau)^{n-\alpha-1} \cdot f(\tau) \cdot d\tau \right] \end{aligned}$$

Donde “ n ” es la parte entera de “ α ”, +1. Por ejemplo, para “ $\alpha = 2,3$ ” es “ $n = 3$ ”.

α real y $\alpha > 0$ $t > a$	${}^{RL}I_a^\alpha f(t) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \cdot \int_a^t (t - \tau)^{\alpha-1} \cdot f(\tau) \cdot d\tau$ ${}^{RL}I_a^\alpha f(t) = {}^{RL}D_t^{-\alpha} f(t)$	<i>Integración</i> <i>Fraccional</i>
$\alpha = 0$	$f(t)$	<i>No operar</i> <i>(identidad)</i>
α real y $\alpha > 0$ $n = \varepsilon + 1$, $\varepsilon =$ parte entera de α $t > a$	${}^{RL}D_t^\alpha f(t) = \frac{1}{\Gamma(n - \alpha)} \cdot \frac{d^n}{dt^n} \left[\int_a^t (t - \tau)^{n-\alpha-1} \cdot f(\tau) \cdot d\tau \right]$ ${}^{RL}D_t^\alpha f(t) = {}^{RL}I_t^{-\alpha} f(t)$ <p style="text-align: center;"><i>Caso particular, $0 < \alpha < 1$:</i></p> ${}^{RL}D_t^\alpha f(t) = \frac{1}{\Gamma(1 - \alpha)} \cdot \frac{d}{dt} \left[\int_a^t (t - \tau)^{-\alpha} \cdot f(\tau) \cdot d\tau \right]$	<i>Derivación</i> <i>Fraccional</i>

Figura 3: Resumen diferintegración fraccional de Riemann-Liouville de lado izquierdo.

Existen otras muchas definiciones de la derivada fraccional, pero una de gran interés es la de Caputo [27].

Al calcular la derivada de RL de orden “ α ” primero se calcula la integral RL del orden “ $(n - \alpha)$ ” y luego se deriva con orden “ n ”.

Para calcular la derivada fraccionaria de Caputo (C) de orden “ α ”, se invierte el orden anterior, primero se calcula la derivada de orden “ n ” y luego “regresamos” [28] una cantidad “ $(n - \alpha)$ ” con la integral fraccionaria de orden “ $(n - \alpha)$ ”,

$$\begin{aligned}
 {}^C D_t^\alpha f(t) &= \\
 &= \frac{1}{\Gamma(n - \alpha)} \cdot \int_a^t (t - \tau)^{n-\alpha-1} \cdot \frac{d^n f(\tau)}{d\tau^n} \cdot d\tau = \\
 &= \frac{1}{\Gamma(n - \alpha)} \cdot \int_a^t (t - \tau)^{n-\alpha-1} \cdot f^{(n)}(\tau) \cdot d\tau
 \end{aligned}$$

La resolución de ecuaciones diferenciales fraccionales, en las cuales las derivadas se expresen según la derivada fraccional de RL, involucrará conocer los valores iniciales de las derivadas de orden fraccionario de la función incógnita. Pero, en la gran mayoría de las aplicaciones de interés estos valores iniciales de las derivadas de orden fraccionario no se conocen, sino que se conocen los valores iniciales de las derivadas de orden entero de la función incógnita. Resultaría pues una mejor opción el uso de una derivada fraccionaria cuya definición implique esta última posibilidad [28].

Se suele decir que la definición de derivada fraccional de RL es usada en la comunidad matemática, y la derivada fraccional de Caputo se prefiere en problemas de interés físico, cuando las condiciones iniciales están expresadas en términos de derivadas de orden entero y se aplica la transformada de Laplace.

Sin embargo, en lo que respecta a un tratamiento de las condiciones iniciales, según [29][30], deben aplicarse razonamientos más generales, que tengan en cuenta la historia del sistema caracterizado por sus ecuaciones diferenciales fraccionarias, en tiempos anteriores al momento “ $t=0$ ”. Debería aplicarse lo que esos autores llaman “Enfoque de estado infinito” (“Infinite state approach”). Sin embargo, en la aplicación que aquí se

mostrará, con el sistema relajado en “ $t=0$ ”, o sea, con condiciones iniciales nulas, será de aplicación RL como en [13].

Aplicación a relajación de dieléctricos

Cuando se aplica una excitación alterna senoidal a un dieléctrico, la permitividad relativa deja de ser un número real, y pasa a ser un número complejo $\tilde{\epsilon}_r(\omega)$, cuya parte real corresponde a la permitividad convencional y la parte imaginaria a pérdidas dieléctricas debidas a múltiples mecanismos, función de la frecuencia [3].

Se la suele tratar fenomenológicamente, siendo una expresión “empírica” de uso común la de Havriliak-Negami (HN):

$$\frac{\tilde{\epsilon}_r^{HN}(\omega) - \epsilon_\infty}{(\epsilon_s - \epsilon_\infty)} = \frac{1}{[1 + (j \cdot \omega \cdot \tau_{HN})^\alpha]^\beta}$$

Con “ τ_{HN} ” la constante de tiempo característica para el modelo HN, “ ϵ_s ” y “ ϵ_∞ ” son permitividades a frecuencia nula (static) e infinita (escalares), y

$$0 < \alpha \leq 1 \quad 0 < \beta \leq 1$$

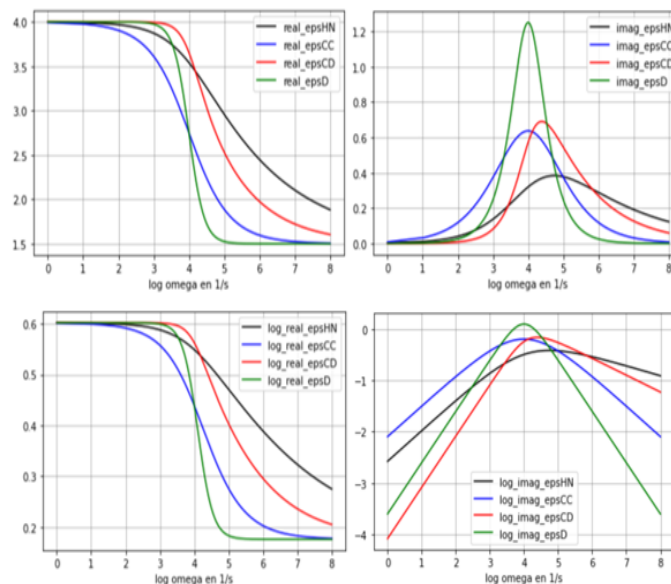
(“ $\alpha = 1$ ” y “ $\beta = 1$ ” es Debye) (D)

(“ $\alpha \neq 1$ ” y “ $\beta = 1$ ” es Cole-Cole) (CC)

(“ $\alpha = 1$ ” y “ $\beta \neq 1$ ” es Cole-Davidson) (CD)

Donde D refiere a un modelo teórico pionero y, CC y CD, a modelos empíricos previos a HN.

En Figura 4 se simulan estas funciones:



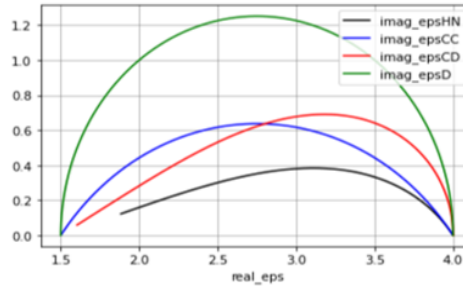


Figura 4: Representación de funciones $\varepsilon'_r(\log \omega)$, $\varepsilon''_r(\log \omega) / \log \varepsilon'_r(\log \omega)$, $\log \varepsilon''_r(\log \omega) / \log \varepsilon'_r(\log \omega)$ / diagrama Cole-Cole $\varepsilon''_r(\varepsilon'_r)$, con:

$$\varepsilon_s = 4 - \varepsilon_\infty = 1,5 - \omega_p = 10^4 1/s$$

$$\alpha = 0,60 \text{ y } \beta = 0,33 \text{ (HN)}$$

$$\alpha = 0,60 \text{ y } \beta = 1 \text{ (CC)}$$

$$\alpha = 1 \text{ y } \beta = 0,33 \text{ (CD)}$$

$$\alpha = 1 \text{ y } \beta = 1 \text{ (D)}$$

La aplicación del cálculo fraccional [13] permite, sorprendentemente, encontrar una ecuación diferencial (se muestra aquí sólo el caso CC):

$$\frac{d\varphi_{CC}(t)}{dt} + \frac{1}{\tau_{CC}^\alpha} \cdot {}^{RL}D_t^{1-\alpha} \varphi_{CC}(t) = 0$$

con solución en el dominio del tiempo (aparece la función de Mittag-Leffler, aquí de 1 parámetro):

$$\varphi_{CC}(t) = E_\alpha \left[-\left(\frac{t}{\tau_{CC}}\right)^\alpha \right]$$

y que la relaciona así con el modelo “empírico” fenomenológico (“L”: transformada de Laplace):

$$\frac{\tilde{\varepsilon}_r^{CC}(\omega) - \varepsilon_\infty}{(\varepsilon_s - \varepsilon_\infty)} = L \left\{ -\frac{d\varphi_{CC}(t)}{dt} \right\} = \frac{1}{1 + (j \cdot \omega \cdot \tau_{CC})^\alpha}$$

(para CD aparece Mittag-Leffler de 2 parámetros y para HN de 3 parámetros, reduciéndose todas al modelo clásico D, de decaimiento exponencial)

A $\varphi_{CC}(t)$ se la suele llamar “Función de Decaimiento de la Polarización Dieléctrica” (CC indica Cole-Cole), y se la suele relacionar con la importante función “ $f(t)$ ”, la “Función de Respuesta del Dieléctrico (Dielectric Response Function)”, así (donde $\varepsilon_0 \cong 8,85 \cdot 10^{-12} F/m$ es la permitividad del vacío en el Sistema Internacional de Unidades):

$$f(t) = -\varepsilon_0 \cdot (\varepsilon_s - \varepsilon_\infty) \cdot \frac{d\varphi(t)}{dt}$$

Conclusiones

Sólo se ha mostrado con un ejemplo de relajación de dieléctricos la potencia del cálculo fraccional para el análisis de sistemas complejos.

Pero el cálculo fraccional, hoy en día, es un corpus de conocimiento gigantesco: necesitamos ponernos al día en Argentina.

Es necesario preparar investigadores, organizar seminarios, implementar materias de doctorado tendiendo a materias de grado, pues este parece ser el nuevo idioma de la ciencia.

Referencias

- [1] Tenreiro Machado, J.; Kiryakova, V; Mainardi, F. (2010). History of Fractional Calculus. *Fractional Calculus & Applied Analysis*, Volume 13, N° 4. Poster recuperado de http://www.math.bas.bg/~fcaa/Poster_Old_History_FC_A3.pdf el 13/08/2021.
- [2] Tenreiro Machado, J.; Kiryakova, V; Mainardi, F. (2010). Recent History of Fractional Calculus. *Fractional Calculus & Applied Analysis*, Volume 13, N° 3. Poster recuperado de http://www.math.bas.bg/~fcaa/POSTER_Recent_History_FC_A3.pdf el 13/08/2021.
- [3] Salvó, G. (en progreso). Espectroscopía de Dieléctricos, en el Dominio de la Frecuencia y en el Dominio del Tiempo. Tesis Doctoral, FIUBA.
- [4] Podlubny, I. (2012). Fractional Calculus: Methods an Applications, Lectures Notes, XXXVII Summer School on Mathematical Physics, Ravello, Italy. Recuperado de <http://people.tuke.sk/igor.podlubny/ravello2012/podlubny-ravello2012-LN-draft-20121002.pdf> el 14/08/2021.
- [5] Uchaikin, V. V. (2013). Fractional Derivatives for Physicists and Engineers - Volume I Background and Theory. Springer and Higher Education Press. Beijing.
- [6] Uchaikin, V. V. (2013). Fractional Derivatives for Physicists and Engineers - Volume II Applications. Springer and Higher Education Press. Beijing.
- [7] Uchaikin, V.V.; Sibatov, R. (2013). Fractional Kinetics in Solids - Anomalous Charge Transport in Semiconductors, Dielectrics and Nanosystems. World Scientific.
- [8] West, B. (2016). Fractional Calculus View of Complexity. CRC Press – Taylor & Francis Group.
- [9] Herrmann, R. (2014). Fractional Calculus – An Introduction for Physicists. 2nd Edition. World Scientific.
- [10] Duarte Ortigueira, M.; Valério, D. (2020). Fractional Signals and Systems. De Gruyter.
- [11] Jin, B. (2021). Fractional Differential Equations – An Approach via Fractional Derivatives. Springer.
- [12] Capelas de Oliveira, E. (2019). Solved Exercises in Fractional Calculus. Springer.
- [13] Rosa Fontes de Aquino, E.C. (2017). Funcoes de Relaxacao Cinéticas Fracionarias (Fractional Kinetic Relaxation Functions), Tese (doutorado), Universidade Estadual de Campinas. Brasil.
- [14] Craiem, D.; Armentano, R.L. (2007). A Fractional Derivative Model to Describe Arterial Viscoelasticity. *Biorheology* 44, 251–263.
- [15] Cerutti, R.A.; Dorrego, G.A.; Luque, L.L. (2016). Cálculo Fraccionario y k-Funciones Especiales. Editorial Universitas, Córdoba, Argentina.
- [16] Sauchelli, V.H.; Laboret, S. (2007). Cálculo Fraccional Aplicado a Control Automático. *Mecánica Computacional*, Vol XXVI. 3308-3327. Asociación Argentina de Mecánica Computacional, Argentina.
- [17] Troparevsky, M.I.; Fabio, M.A. (2017). La Nueva Derivada de Caputo: Cálculo Aproximado de Primitivas Utilizando una Familia de Wavelets de Banda Limitada. *Mecánica*

- Computacional, Vol XXXV. 2547-2557. Asociación Argentina de Mecánica Computacional, Argentina.
- [18] Roscani, S.D.; Tarzia, D.A. (2019). Sobre Problemas de Tipo Stefan Modelizados por Derivadas Fraccionarias Temporales. 381-384. VII Congreso de Matemática Aplicada, Computacional e Industrial, Río Cuarto, Córdoba, Argentina.
- [19] Acevedo A.; Peralta, J.; Di Bárbaro, M. (2020) Introducción al Cálculo Fraccionario Discreto – El Cálculo Fraccionario Discreto y el Operador Nabla. Congreso Ciencia, Tecnología e Innovación, Universidad Nacional de Catamarca, Argentina. <https://www.youtube.com/watch?v=BOltxNEMfzk> , recuperado el 15/08/2021.
- [20] Podlubny, I. (1999). Fractional Differential Equations. Academic Press, London.
- [21] Askey, R.A.; Roy, R. (2010). Gamma Function. En Olver, F.W. J. et al., Ed., NIST Handbook of Mathematical Functions. Cambridge University Press, New York.
- [22] Gorenflo, R.; Kilbas, A.A.; Mainardi, F.; and Rogosin, S. (2020). Mittag-Leffler Functions, Related Topics and Applications, 2da Ed.. Springer.
- [23] Butzer, P.L.; Westphal, U. (2000). An Introduction to Fractional Calculus", en Chapter I de Hilfer, R., Ed., Applications of Fractional Calculus in Physics, World Scientific Publishing, Singapore.
- [24] Podlubny, I. (2005). Fractional Derivatives: History, Theory, Applications", IEEE, San Diego Section, Control Systems Society Chapter Meeting, San Diego, USA.
- [25] Moshrefi-Torbati, M.; Hammond, J.K. (1998). Physical and Geometrical Interpretation of Fractional Operators. J. Franklin Inst., vol. 335B, N° 6, 1077.
- [26] Netushil, A.V.; Strajov, S.V. (1963). Principios de Electrotecnia - Tomo II: Circuitos con Parámetros Concentrados y Distribuidos. Ediciones Nuestro Tiempo, Argentina.
- [27] Caputo, M. (1967). Linear model of dissipation whose Q is almost frequency independent. II. Geophysical Journal International, Volume 13, Issue 5, November, 529–539.
- [28] Fujioka Rojas, J. (2016). La Disyuntiva de Dios: ¿Derivadas Enteras o Fraccionarias?. Ciencia Ergo-sum, Universidad Autónoma del Estado de México, Vol. 23-1, Marzo-Junio. 87-91.
- [29] Trigeassou, J.C.; Maamri, N.; Sabatier, J.; Oustaloup, A. (2012). State Variables and Transients of Fractional Order Differential Systems. Computers and Mathematics with Applications 64, 3117-3140.
- [30] Trigeassou, J.C.; Maamri, N. (2019). Analysis, Modelling and Stability of Fractional Order Differential Systems 1 - The Infinite State Approach. ISTE and Wiley.

26

Deconvolución con super-resolución en imágenes de microscopía por superposición de fuentes virtuales

Toscani, Micaela^a; Lew, Sergio^c; Martínez, Sandra^b;
Martínez, Oscar E.^a

^a. Laboratorio de Fotónica, IIBM, FI-UBA, CONICET.

^b. Instituto de Investigaciones Matemáticas Luis A. Santaló, FCEyN-UBA, CONICET. ^c. Instituto de Ingeniería Biomédica (IIBM), FI-UBA.

mtoscani@fi.uba.ar

Resumen

El microscopio óptico es un instrumento fundamental en el estudio de las ciencias de la vida. Sin embargo, el límite de resolución intrínseco de este tipo de microscopía debido a los procesos de difracción e interferencia de la luz impide la correcta visualización de estructuras y eventos biológicos que tengan dimensiones por debajo de los 200 nm aproximadamente. Si bien las técnicas de microscopía electrónica poseen mejores niveles de resolución, las condiciones hostiles a las cuales debe ser sometida la muestra impiden que sean utilizadas para observar estructuras biológicas vivas o procesos biológicos dinámicos en su entorno natural. En los últimos años se han desarrollado distintas técnicas y algoritmos con el objetivo de superar el límite de difracción de los microscopios ópticos, algunos de ellos requieren cientos o miles de adquisiciones para super-resolver una sola imagen. En este trabajo presentamos el desarrollo de un algoritmo de deconvolución con superresolución llamado SUPPOSE, que permite reconstruir la estructura real subyacente a partir de una única imagen adquirida. Habiendo medido previamente la respuesta impulsiva del microscopio, SUPPOSE aproxima la estructura real mediante una superposición de fuentes puntuales de igual intensidad, llamadas fuentes virtuales. Mediante este enfoque SUPPOSE logra simplificar el problema de deconvolución, convirtiéndolo en un problema de minimización sin restricciones donde el único objetivo es encontrar las posiciones de las fuentes virtuales que mejor reconstruyen la imagen medida. En este trabajo se mostrarán resultados de aplicar el método SUPPOSE a imágenes sintéticas y de microscopía de fluorescencia.

Abstract

The optical microscope is a fundamental instrument in the study of life sciences. However, the intrinsic resolution limit of this type of microscopy due to diffraction and interference of light does not allow the correct visualization of biological structures that have dimensions below 200 nm. Although electron microscopy techniques have better levels of resolution, the treatment that must be done to the sample prevents observing living biological structures or dynamic biological processes in their natural environment. In recent years, different techniques and algorithms have been developed in order to overcome the diffraction limit of

optical microscopes, some of them require hundreds or thousands of acquisitions to super-resolve a single image.

In this work we present the development of a deconvolution algorithm with super-resolution called SUPPOSE, which allows us to reconstruct the underlying real structure from a single acquired image. Having previously measured the impulsive response of the microscope, SUPPOSE approximates the real structure by superimposing point sources of equal intensity, called virtual sources. Through this approach, SUPPOSE simplifies the deconvolution problem, turning it into an unrestricted minimization problem where the only unknown to be found are the positions of the virtual sources that best reconstruct the measured image. In this work, results of applying the SUPPOSE method to synthetic images and fluorescence microscopy will be shown.

Palabras clave: microscopía, deconvolución, super-resolución, fluorescencia.

Introducción

La microscopía óptica es una herramienta fundamental en el estudio de las ciencias de la vida. Su mayor ventaja, a diferencia de otras técnicas de microscopía, es que permite observar estructuras biológicas vivas o procesos biológicos dinámicos en su entorno natural. Sin embargo, el límite de resolución debido al fenómeno de difracción de la luz impide la correcta visualización de estructuras que tengan dimensiones por debajo de los 200 nm aproximadamente.

En los últimos años, diversos enfoques se han llevado a cabo con el objetivo de quebrar el límite de difracción teórico de este tipo de sistemas ópticos. Muchas de las técnicas desarrolladas requieren la implementación de sistemas sofisticados como son la microscopía STED (del inglés Stimulated emission depletion) [1] o RESOLFT (del inglés Reversible saturable optical fluorescence transitions) [2]. Otras técnicas basadas en la localización de moléculas fluorescentes individuales como STORM (del inglés Stochastic optical reconstruction microscopy) [3] o PALM (del inglés Photo-activated localization microscopy) [4] dependen fuertemente de las propiedades fotoquímicas y fotofísicas de ciertos fluoróforos para poder ser llevadas a cabo. A su vez muchas de estas técnicas requieren de la adquisición de cientos o miles de imágenes para poder generar una única reconstrucción con super-resolución, siendo esto un limitante importante de la resolución temporal a la hora de estudiar procesos biológicos dinámicos.

Otro tipo de enfoque está basado en métodos computacionales que pueden aplicarse a imágenes de fluorescencia obtenidas con microscopios convencionales. En [5] los autores realizan una comparación entre varios de los algoritmos estándar de deconvolución. Para todos estos métodos la mejora en la resolución lateral obtenida es marginal, y en algunos casos las reconstrucciones presentan artificios derivados de los mismos algoritmos. Otra rama de los métodos computacionales se basa en técnicas de procesamiento de señales de sensado compresivo CS (del inglés Compressed sensing) [6]-[7]. En este tipo de métodos la condición de que la señal sea rala es bastante restrictiva [8]. A través de técnicas de iluminación específicas que logran forzar la condición de rareza estos métodos se emplean para recuperar información con super-resolución [9]-[11].

Recientemente desarrollamos un algoritmo de deconvolución con super-resolución denominado SUPPOSE [12]-[14], que se basa en reconstruir la señal objetivo como una superposición de fuentes puntuales de igual intensidad. Este algoritmo no tiene restricciones de rareza y ha sido aplicado para super-resolver imágenes de microscopía de adquisición única. En este trabajo se detalla el algoritmo desarrollado así como los resultados obtenidos con imágenes sintéticas bajo distintas condiciones de señal-ruido e imágenes experimentales adquiridas en un microscopio de epi-fluorescencia.

Algoritmo suppose

Cualquier imagen adquirida en un microscopio se encuentra distorsionada por la respuesta impulsiva del sistema óptico lo que enmascara la estructura real presente en la misma. Podemos modelar la imagen adquirida S como

$$S(x) = R(x) * I(x) + \eta(x) + B(x) \quad (1)$$

donde R es la estructura real que se encuentra enmascarada, I es la respuesta impulsiva del sistema (o PSF del inglés Point spread function), η representa el ruido en la imagen y B un nivel de fondo constante. En este caso $x \in \mathbb{R}^2$ representa a la coordenada en que se desarrolla la medición.

El método SUPPOSE [12]-[14] asume que la función R (por ejemplo, la distribución de fluoróforos en una muestra fluorescente) se puede modelar como una superposición de fuentes puntuales de igual intensidad α , a las

que llamaremos fuentes virtuales. Basados en esta premisa podemos aproximar la imagen adquirida como

$$\tilde{S}(x) \approx \tilde{R}(x) * I(x) = \alpha \sum_{k=1}^N I(x - a_k) \quad (2)$$

donde $a_k \in \mathbb{R}^2$ corresponde a la posición de cada una de las N fuentes virtuales utilizadas para aproximar la imagen e I es una estimación de la PSF del sistema. Este enfoque simplifica el problema de hallar R , la intensidad en cada punto, y lo reduce a hallar las posiciones de las fuentes virtuales, las cuales son variables sin restricciones. Dado que todas las fuentes virtuales tienen la misma intensidad α , diferentes niveles de intensidad en la imagen son reconstruidos acumulando una mayor o menor cantidad de fuentes virtuales en esa área. Una vez elegido el valor de α y N , hallamos las posiciones a_k de las fuentes virtuales que minimizan la función objetivo $\|S - \tilde{S}\|^2$. Utilizamos un algoritmo genético para resolver el problema matemático de optimización y encontrar las posiciones de las fuentes virtuales.

Resultados

Para poner a prueba el algoritmo SUPPOSE procesamos imágenes sintéticas y experimentales ante distintas condiciones de adquisición, a continuación se muestran los resultados obtenidos.

Imágenes sintéticas y análisis de rendimiento Construimos un conjunto de imágenes sintéticas con estructuras de distintas características y distintos niveles de relación señal-ruido (SNR del inglés Signal to noise ratio) con el objetivo de poner a prueba el algoritmo y cuantificar la calidad de las soluciones obtenidas. La estructura real R consiste en dos segmentos paralelos separados una distancia d , cada segmento está construido a partir de 72 fuentes puntuales. Para generar la imagen sintética, la estructura real fue convolucionada con una función PSF gaussiana de parámetro $\sigma = 100\text{nm}$, se agregó un valor de fondo constante y ruido de distribución de Poisson. El tamaño de píxel es de $\sim 21\text{nm}$ dando como resultado una función PSF con $\sim 236\text{nm}$ de ancho a media altura (FWHM del inglés Full Width at Half Maximum), siendo este último un valor comúnmente utilizado para cuantificar la resolución de los sistemas ópticos.

La Figura 1 muestra un típico caso de aplicación del algoritmo SUPPOSE para el caso de

una imagen sintética. Se puede ver que en la imagen original (Figura 1a) no es posible detectar la estructura de dos segmentos paralelos. Tras procesar esta imagen con SUPPOSE obtuvimos una reconstrucción donde se distingue claramente la estructura real subyacente. La solución SUPPOSE consiste en un conjunto de posiciones de fuentes virtuales (Figura 1b), para generar una imagen de super-resolución (Figura 1c) se convolucionan dichas posiciones con una función gaussiana de ancho mucho menor al de la PSF del sistema [13].

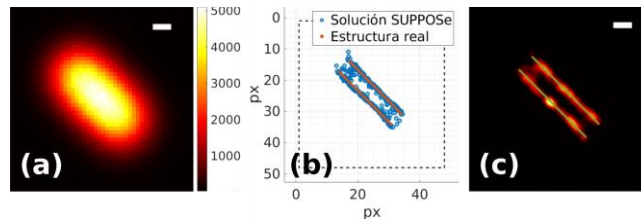


Figura 1: Aplicación del algoritmo SUPPOSE en una imagen sintética. La estructura real son dos segmentos paralelos separados una distancia de 100 nm, la intensidad máxima en la imagen es de 5000 cuentas. (a) Imagen original procesada. (b) Posiciones de las fuentes virtuales de la solución. (c) Reconstrucción SUPPOSE, superpuesta la estructura real en color verde. Barras de escala 100 nm.

Construimos el conjunto de datos sintéticos variando la distancia de separación entre los segmentos paralelos en un rango de entre 70 nm a 200 nm y con distintos niveles de ruido en las imágenes, correspondientes a valores típicos de un experimento de fluorescencia convencional. A partir de los resultados obtenidos tras procesar el conjunto de datos sintéticos pudimos realizar un análisis de rendimiento del método ante distintas condiciones. En la Figura 2 se muestran algunas de las soluciones obtenidas tras procesar el conjunto de imágenes sintéticas. Se puede ver que el algoritmo SUPPOSE logra reconstruir los segmentos paralelos aún estando separados distancias mucho más pequeñas que el límite de resolución teórico por difracción. También se observa que para altos niveles de ruido en la imagen las fuentes virtuales SUPPOSE tienden a aglomerarse en la solución obtenida, seguramente esto se deba a un fenómeno de sobreajuste de las estructuras de ruido presentes en la imagen.

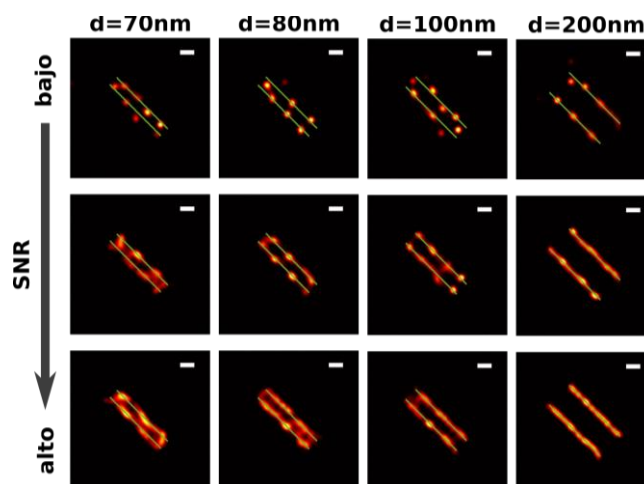


Figura 2: Algunas de las soluciones SUPPOSE obtenidas tras procesar el conjunto de imágenes sintéticas, variando la distancia d entre los segmentos paralelos y el nivel de ruido presente en las imágenes. Barras de escala 100 nm.

En [15] se definió una medida de distancia para comparar dos soluciones SUPPOSE entre sí, o una solución y la estructura real en el caso de imágenes sintéticas. Esa distancia nos permitió cuantificar la exactitud, la precisión y la resolución del algoritmo. Observamos que, para el caso de una resolución teórica de campo amplio de $\sim 236\text{nm}$, es posible distinguir segmentos separados hasta una distancia de 75 nm y los resultados obtenidos poseen un valor de exactitud de 20 nm y una precisión de 10 nm .

Imágenes experimentales de fluorescencia Las primeras pruebas de concepto las realizamos utilizando imágenes de fluorescencia adquiridas con un objetivo de microscopio de baja apertura numérica, y por lo tanto poca resolución lateral. El objetivo de estas pruebas fue poder validar los resultados SUPPOSE obtenidos con imágenes de la misma zona de la muestra adquiridas con otro objetivo de apertura numérica superior, y por ende mejor resolución. Para este ensayo utilizamos un objetivo de microscopio de magnificación $10\times$ (apertura numérica 0.3) y uno de magnificación $40\times$ (apertura numérica 0.95).

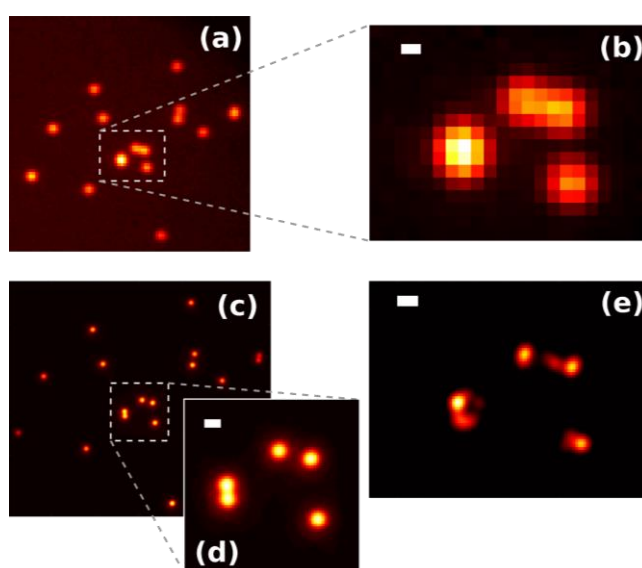


Figura 3: Muestra de nanopartículas fluorescentes de 500 nm de diámetro. (a) Imagen adquirida con el objetivo $10\times$. (b) Región procesada con SUPPOSE. (c) Misma región de la muestra que en (a) adquirida con el objetivo $40\times$. (d) Misma región que en (b) adquirida con el objetivo $40\times$. (e) Solución SUPPOSE obtenida tras procesar la imagen en (b). Barras de escala 500 nm .

La Figura 3 muestra los resultados obtenidos tras procesar una imagen de nanopartículas de 500 nm de diámetro fluorescentes. Adquirimos imágenes de la misma región de la muestra, tanto con el objetivo de baja resolución $10\times$ (Figura 3a) como con el objetivo de alta resolución $40\times$ (Figura 3c). El fluoróforo utilizado posee un máximo de longitud de onda de emisión en $\sim 520\text{ nm}$, en estas condiciones la resolución teórica del objetivo $10\times$ es de $\sim 867\text{ nm}$, por lo que no es posible determinar el diámetro real de las nanopartículas ni distinguir aquellas que se encuentren a una distancia menor que ese valor. La solución obtenida tras procesar con SUPPOSE la imagen de la Figura 3b se muestra en la Figura 3e. Se puede observar que el algoritmo SUPPOSE logra identificar la estructuras de las nanopartículas que se encontraban enmascaradas. Las distancias y los diámetros obtenidos son consistentes con los observados en la imagen adquirida con el objetivo $40\times$ (Figura 3d).

En la misma línea, adquirimos imágenes de redes mitocondriales presentes en una muestra de células endoteliales de arteria pulmonar bovina (BPAEC). En este caso el pico de emisión

de luz de fluoróforo utilizado es de ~ 599 nm resultando en un límite de resolución teórico para el objetivo 10x de ~ 998 nm.

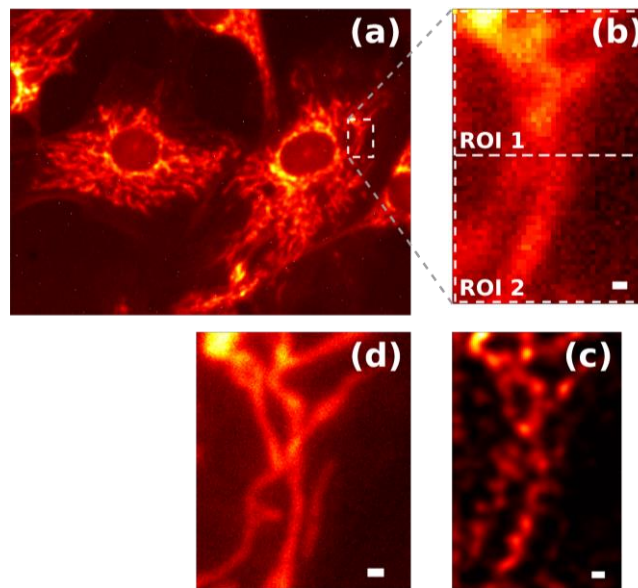


Figura 4: Redes mitocondriales en una muestra de células endoteliales de arteria pulmonar bovina. (a) Imagen de la muestra adquirida con el objetivo 10x. (b) Subregión de la imagen (a) que fue procesada con SUPPOSE. (c) Reconstrucción SUPPOSE obtenida tras procesar los mosaicos en (b). (d) Imagen de la misma región de interés de la muestra adquirida con el objetivo 40x. Barras de escala 600nm.

Procesamos con SUPPOSE la imagen adquirida con el objetivo 10x (Figura 4b) y comparamos el resultado obtenido con lo observado en la imagen adquirida con el objetivo 40x (Figura 4d). En este caso además dividimos la región de interés en dos mosaicos que fueron procesados por separado para luego juntar las soluciones obtenidas y generar una reconstrucción final sin que se vea afectado el rendimiento del algoritmo. Para ello realizamos una modificación del problema de optimización que nos permitió corregir artificios de borde que surgían con la primera versión del método (ver [14]).

Esto resulta de gran importancia dado que permite paralelizar el procesamiento de los datos optimizando el tiempo y los recursos de cómputo disponibles.

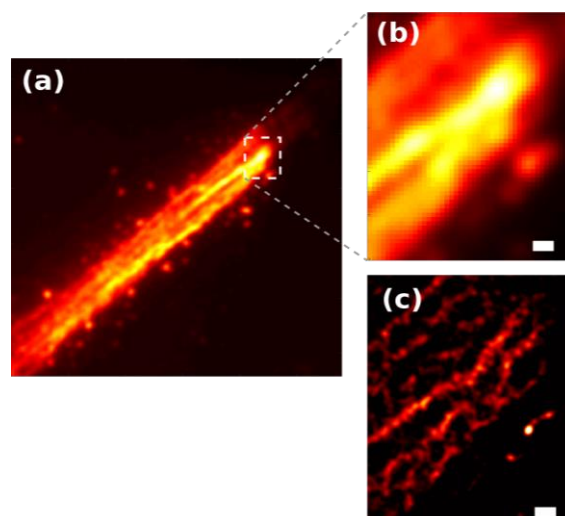


Figura 5: Microtúbulos en una muestra de células endoteliales de arteria pulmonar bovina. (a) Imagen de la muestra. (b) Región procesada. (c) Reconstrucción SUPPOSE obtenida. Barras de escala 200 nm.

En la Figura 5 se muestran resultados de procesar una imagen de microtúbulos adquirida con un objetivo 60x de apertura numérica 1.33. En esta muestra el fluoróforo utilizado tiene un pico de emisión en ~ 513 nm lo que resulta en un límite teórico de resolución de ~ 193 nm. En la Figura 5c se puede observar que se logra detectar dos microtúbulos cercanos entre sí que no era posible distinguir en la imagen original adquirida.

En la Figura 6 se muestran los resultados de procesar una imagen con filamentos de actina utilizando nuevamente el objetivo 60x previamente descrito. En este caso el fluoróforo utilizado tiene un máximo de emisión en ~ 512 nm lo que resulta en un límite teórico de resolución de ~ 192 nm. En este caso también subdividimos la región de interés en dos mosaicos que fueron procesados por separado para luego generar una única reconstrucción final de la zona.

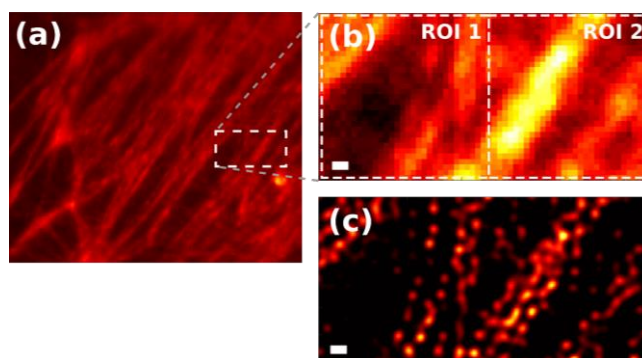


Figura 6: Filamentos de actina presentes en una muestra de células endoteliales de arteria pulmonar bovina. (a) Imagen adquirida. (b) Dos mosaicos procesados por separado con SUPPOSE

(c) Reconstrucción final de la solución obtenida. Barras de escala 200 nm.

En todos los casos mostrados se logran distinguir estructuras por debajo del límite de resolución de los sistemas de adquisición utilizados.

Conclusiones

Implementamos un método de deconvolución con super-resolución que puede ser aplicado en imágenes de adquisición única, lo que no solo permite obtener mejores resoluciones laterales que las impuestas por el límite teórico de difracción sino también poder registrar procesos dinámicos con la máxima resolución temporal que posea el sistema de medición utilizado. En base a resultados con datos sintéticos establecimos que el método es capaz de alcanzar una mejora de más de tres veces la resolución teórica del sistema. Logrando además valores de exactitud y precisión en las reconstrucciones de entre 10 nm y 20 nm para niveles de ruido típicos en experimentos de fluorescencia convencionales. El algoritmo fue probado también con imágenes experimentales donde validamos los resultados obtenidos con los datos sintéticos.

Referencias

- [1] Hell, S. W., & Wichmann, J. (1994). Breaking the diffraction resolution limit by stimulated emission: stimulated-emission-depletion fluorescence microscopy. *Optics letters*, 19(11), 780-782.
- [2] Hell, S. W. (2007). Far-field optical nanoscopy. *science*, 316(5828), 1153-1158. [3] Rust, M. J., Bates, M., & Zhuang, X. (2006). Sub-diffraction-limit imaging by stochastic optical reconstruction microscopy (STORM). *Nature methods*, 3(10), 793-796.
- [4] Betzig, E., Patterson, G. H., Sougrat, R., Lindwasser, O. W., Olenych, S., Bonifacino, J. S., ... & Hess, H. F. (2006). Imaging intracellular fluorescent proteins at nanometer resolution. *Science*, 313(5793), 1642-1645.
- [5] Sage, D., Donati, L., Soulez, F., Fortun, D., Schmit, G., Seitz, A., ... & Unser, M. (2017). DeconvolutionLab2: An open-source software for deconvolution microscopy. *Methods*, 115, 28-41.
- [6] Donoho, D. L. (1992). Superresolution via sparsity constraints. *SIAM journal on mathematical analysis*, 23(5), 1309-1331.
- [7] Candès, E. J., Romberg, J., & Tao, T. (2006). Robust uncertainty principles: Exact signal reconstruction from highly incomplete frequency information. *IEEE Transactions on information theory*, 52(2), 489-509.
- [8] Morgenshtern, V. I., & Candes, E. J. (2016). Super-resolution of positive sources: The discrete setup. *SIAM Journal on Imaging Sciences*, 9(1), 412-444.
- [9] Yu, J. Y., Becker, S. R., Folberth, J., Wallin, B. F., Chen, S., & Cogswell, C. J. (2018). Achieving superresolution with illumination-enhanced sparsity. *Optics express*, 26(8), 9850-9865.
- [10] Xing, J., Chen, S., Becker, S., Yu, J. Y., & Cogswell, C. (2020). l_1 -regularized maximum likelihood estimation with focused-spot illumination quadruples the diffraction-limited resolution in fluorescence microscopy. *Optics Express*, 28(26), 39413-39429.
- [11] Yu, J. Y., Narumanchi, V. V., Chen, S., Xing, J., Becker, S. R., & Cogswell, C. J. (2020). Analyzing the super-resolution characteristics of focused-spot illumination approaches. *Journal of biomedical optics*, 25(5), 056501.
- [12] Martínez, S., Toscani, M., & Martínez, O. E. (2019). Superresolution method for a single wide-field image deconvolution by superposition of point sources. *Journal of microscopy*, 275(1), 51-65.
- [13] Toscani, M., Martínez, S., & Martínez, O. E. (2019, February). Single image deconvolution with super-resolution using the suppose algorithm. In *Single Molecule Spectroscopy and Superresolution Imaging XII* (Vol. 10884, p. 1088415). International Society for Optics and Photonics.
- [14] Toscani, M., & Martínez, S. (2021). Solving the boundary artifact for the enhanced deconvolution algorithm SUPPOSE applied to fluorescence microscopy. *Computer Optics*, 45(3), 418-426.
- [15] Vazquez, G. D. B., Martínez, S., & Martínez, O. E. (2020). Super-resolved edge detection in optical microscopy images by superposition of virtual point sources. *Optics Express*, 28(17), 25319-25334.

Filtrado de señales inmersas en ruido estructurado utilizando redes neuronales

Pitiddu, Ornella S.^a; Veiga, Ricardo A.^b

^a *Universidad de Buenos Aires, Facultad de Ingeniería*

^b *Universidad de Buenos Aires, Facultad de Ingeniería, Instituto de Ingeniería Biomédica*
rveiga@fi.uba.ar

Resumen

En este trabajo se analizan dos redes neuronales para el filtrado de señales inmersas en ruido. En ciertas aplicaciones, el ruido suele ser del tipo estructurado, donde tanto la señal original como el ruido representan trayectorias de baja complejidad en espacios similares, o aparecen otros procesos no lineales involucrados. En particular aquí se filtrarán dígitos manuscritos que han sido tachados con líneas verticales y horizontales aleatorias, conociéndose la cantidad pero no su ubicación en la imagen; similares a los que suelen encontrarse en los métodos automáticos para determinar cuándo el usuario es un ser humano, denominados CAPTCHA. La mayoría de las técnicas que abordan este problema asumen el acceso a imágenes sin ruido, lo cual muchas veces no es factible en la práctica. Aquí se utiliza un generador capaz de producir muestras limpias, observando únicamente aquellas con el ruido incorporado, pero asumiendo conocida la estructura de ese ruido. Se utilizan redes neuronales generativas adversarias con dos esquemas diferentes: a) perceptrones multicapa y b) redes neuronales convolucionales. Ambas redes cumplen con el objetivo pero con distinta calidad. Para medir sus capacidades de filtrado, se hicieron encuestas sobre 400 imágenes elegidas al azar generadas por ambas redes en partes iguales. Se diseñaron además varios métodos semi-supervisados para etiquetar las imágenes no etiquetadas a partir de los resultados de la clasificación manual. Sobre la base de los resultados obtenidos se seleccionó al mejor para medir el desempeño de cada filtro. Finalmente se presentan los resultados y conclusiones de su comparación.

Abstract

In this paper, two neural networks for removing structural noise from images are analyzed. In certain applications, noise is usually structured, where both the original signal and the noise represent trajectories of low complexity in similar spaces, or where other nonlinear processes are involved. In particular here, the filtering process will be done over manuscript digits that have been crossed out with random vertical and horizontal lines, knowing the amount but not their location in the image; similar to those usually found in automatic methods to determine when the user is a human being, called CAPTCHA. Most

techniques addressing this problem assume access to images without noise, which is often not feasible in practice. Here, a generator capable of producing clean samples by only observing noisy images is used. The noise structure is assumed to be known. Generative Adversarial Neural networks are used with two different schemes: a) multilayer perceptrons and b) convolutional neural networks. Both networks meet the objective but with different quality. To measure their filtering capabilities, subjective evaluations were made on 400 randomly chosen images generated by both networks in equal parts. Several semi-supervised methods were also designed to label unlabeled images from the results of manual classification. Based on these results, the best one was selected to measure the performance of each filter. Finally, the results and conclusions of their comparison are presented.

Palabras clave: Filtrado de señales, redes neuronales, aprendizaje automático, GAN.

Introducción

El filtrado de imágenes con ruido estructurado, donde se asume cierto conocimiento sobre su estructura, es de interés para el reconocimiento automático de caracteres que se encuentran parcialmente obstruidos por tachaduras. Por ejemplo, esto suele ocurrir en sistemas que buscan vulnerabilidades en métodos automáticos que intentan determinar cuándo el usuario es un ser humano, que suelen denominarse CAPTCHA (*Completely Automated Public Turing tests to tell Computers and Humans Apart*) [1].

Una de las alternativas más populares para resolver el problema del filtrado es el uso de *autoencoders* [2]-[4]. Otra alternativa es convertir las señales de las imágenes a otro dominio en el que sean más fácilmente separables del ruido, como por ejemplo el dominio de las wavelets [5].

Últimamente, las redes generativas adversarias o antagónicas (GAN - *Generative Adversarial Network*) han emergido como una alternativa atractiva de aprendizaje no supervisado para la resolución de este tipo de problemas, entre otros, buscando la generación de nuevos datos similares a los del conjunto original utilizado para entrenar a la red [1]-[10].

La mayoría de las técnicas que abordan el problema de filtrar ruido estructurado en imágenes de dígitos manuscritos, asumen el acceso a imágenes sin ruido, lo cual muchas veces no es factible en aplicaciones prácticas. En [11] se hace mención de esta dificultad y se desarrolla un modelo *denoising-GAN* donde se propone un generador capaz de producir muestras limpias, observando únicamente aquellas con ruido, asumiendo conocida la estructura de este último. En [12] se avanza en esa línea de trabajo planteando el uso de dicho generador para filtrar dígitos manuscritos con ruido estructurado que no fueron utilizados para entrenar la red, aplicando un algoritmo de gradiente descendiente.

En este trabajo se presentan los resultados de comparar el desempeño de dos modelos de redes neuronales *denoising-GAN* que permiten generar números filtrados a partir de otros inmersos en ruido estructurado.

Desarrollo

A continuación, se diseñan e implementan dos redes generativas antagónicas, una de convolución y la otra con capas de tipo *dense* (donde todas las neuronas de una capa se conectan con todas las neuronas de la capa siguiente), aplicadas en el filtrado de señales

inmersas en ruido, particularmente números manuscritos. Para ello, las mismas fueron entrenadas únicamente con imágenes de números ruidosos, y se espera que éstas aprendan a generar dígitos sin ruido; asumiendo conocida la estructura o distribución del ruido a filtrar. Una vez entrenadas las dos GAN, se comparan los dígitos generados a la salida de cada una de las redes. Y para ello, se diseñan e implementan *Clasificadores* encargados de evaluar su desempeño, clasificando una imagen de entrada como un número o algo irreconocible.

Redes generativas adversarias

El modelo de una GAN consiste de dos redes adversarias, un generador y un discriminador, que compiten entre sí continuamente en un juego de suma cero. Por un lado, el generador se encarga de generar una imagen ficticia que parezca real a partir de muestras de cierto espacio de entrada, llamado latente, z , que puede ser ruido blanco, por ejemplo. Por otro lado, el discriminador trata de identificar si una imagen es real o ficticia, es decir, estimando la probabilidad de que pertenezca al conjunto de las imágenes reales originales o a las producidas por el generador. Así, ambos modelos van a mejorar a lo largo de las iteraciones al intentar vencer a su adversario. Una representación de esta estructura se puede ver en la Figura 1.

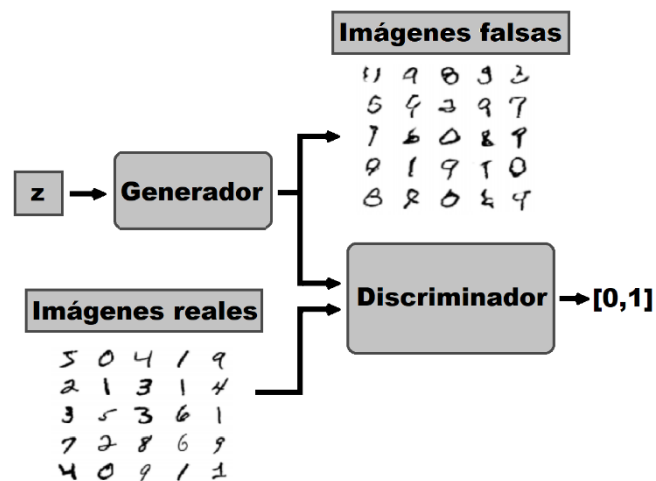


Figura 1: Modelo de una GAN.

El espacio latente, al final del entrenamiento, representará una versión comprimida del espacio de salida, que solamente el generador conoce cómo transformar en una imagen similar a las del conjunto de datos de referencia.

En el modelo completo, el generador recibe como entrada los puntos aleatorios del espacio latente y genera como salida las imágenes falsas que, a su vez, son ingresadas como entrada al discriminador. La salida de este último se utiliza para actualizar los pesos de su adversario.

El discriminador se entrena maximizando la probabilidad de asignar la correcta clasificación tanto a las imágenes falsas como a las verdaderas. Y, al mismo tiempo, se entrena el generador tal que se minimice $\log[1 - D(G(z))]$; donde G es el generador, con parámetros θ_g , y donde $G(z)$ representa el mapeo que realiza éste entre las muestras de entrada del espacio latente y el de las imágenes generadas; y D el discriminador, con

parámetros θ_d , donde $D(y)$ estima la probabilidad de que y provenga del espacio de imágenes verdaderas. En consecuencia, se debe resolver el siguiente problema de optimización *minimax* [1].

$$\min_G \max_D O(D, G) = E_{y \sim p_{data}(y)} [\log(D(y))] + E_{z \sim p_z(z)} [\log(1 - D(G(z)))], (1)$$

donde $p_{data}(y)$ y $p_z(z)$ son las distribuciones de probabilidad de las muestras deseadas y del espacio latente respectivamente. Así, G y D compiten en un juego *minimax* cuya función objetivo es $O(D, G)$.

Al principio, a la salida del generador se obtendrá ruido, por lo que el discriminador diferenciará fácilmente que se trata de una imagen falsa. Entonces se utiliza la salida de este último para actualizar los pesos del primero. De esta forma, la red del generador modificará sus pesos para que su salida no sea tan fácilmente identificable por el discriminador como falsa. A su vez, este último se tiene que adaptar para que las nuevas salidas del generador, que resultan más parecidas a las imágenes verdaderas, puedan seguir siendo identificadas como falsas. Esta competencia sucesiva genera que ambas redes evolucionen tratando de ganarle a su adversario.

Generación de imágenes libres de ruido

A partir de imágenes ruidosas de entrada, se busca obtener imágenes sin ruido, asumiendo que éste tiene una distribución conocida. Esto se puede expresar como:

$$y = x + n, \quad (2)$$

donde $y \in \mathcal{Y}$, siendo \mathcal{Y} el espacio de las imágenes observadas (con ruido), $x \in \mathcal{X}$, con \mathcal{X} el espacio de imágenes sin ruido y $n \in \mathcal{N}$, con \mathcal{N} la distribución de ruido conocida.

Se utilizaron los números manuscritos de la base de datos MNIST, con 60000 imágenes, donde cada una de ellas está compuesta por 748 píxeles (28x28). Algunas pueden observarse en la Figura 2 (a).

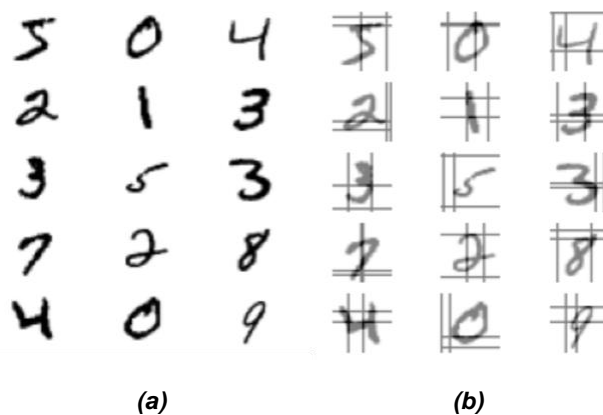


Figura 2: (a) Imágenes limpias, (b) imágenes con ruido estructurado.

En este trabajo, a las imágenes MNIST se les agrega ruido compuesto por líneas verticales y horizontales, correspondiente a muestras del espacio de ruido estructurado \mathcal{N} , como se observa en la Figura 2 (b). Éstas son generadas de manera aleatoria y permitirán transformar a los dígitos en el nuevo conjunto de datos ruidosos a utilizar como entrada de referencia a filtrar. Se estableció un nivel de corrupción dado por la cantidad de líneas que se agregan tanto verticales como horizontales, que en este caso fueron dos de cada una.

Por lo tanto, el objetivo ahora es obtener dígitos limpios, que pertenezcan al espacio de imágenes sin ruido \mathcal{X} , teniendo únicamente como entrada dígitos con ruido (que pertenecen a \mathcal{Y}), como por ejemplo los de la Figura 2 (b).

Al final del entrenamiento, se espera que a la salida del generador se obtengan muestras del espacio \mathcal{X} , libres de ruido. Por lo tanto, para poder engañar al discriminador, se le debe agregar el ruido estructurado a dichas muestras, ya que éste debería recibir imágenes ruidosas similares a las del conjunto \mathcal{Y} .

Así, por un lado, se tiene la red del generador encargada de generar imágenes a partir de las muestras del espacio latente z , que se espera que, una vez entrenada la red, no tengan ruido. Por otro lado, se tiene el discriminador, al cual se lo entrena con las imágenes de entrada, es decir dígitos con ruido del conjunto \mathcal{Y} , y con las obtenidas por el generador luego de agregarles un ruido del espacio \mathcal{N} que tiene la misma distribución que el de las imágenes de entrada, como se observa en el esquema de la Figura 3.

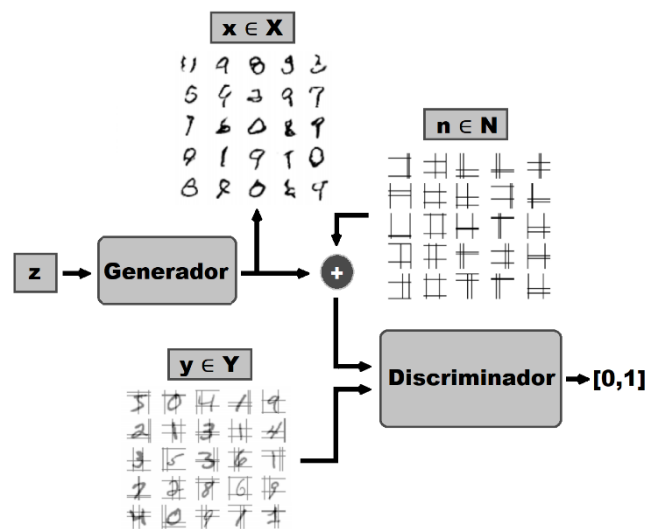


Figura 3: Esquema para generar imágenes limpias.

Para modificar los pesos sinápticos de las redes, se utilizó el método de *error backpropagation*. En primer lugar, se entrena al discriminador, al cual se le enseñan imágenes verdaderas (números con ruido) cuya salida deseada será 1 y ficticias (obtenidas por el generador sumándoles ruido) cuya salida deseada será 0. En segundo lugar, para entrenar al generador, se lo hace a través del modelo conjunto, ya que la actualización de sus pesos depende directamente de la salida del discriminador. Si éste detecta imágenes que parecen verdaderas cuando en realidad no lo son, los cambios en los pesos de la red del generador son modificados levemente, mientras que cuando las estima como falsas, los pesos son actualizados en mayor proporción. Dado que se desea entrenar al generador para que pueda engañar al discriminador, se establece a este último como “no entrenable”, y así no se altera su comportamiento. Y como se desea que el

generador produzca señales que el discriminador las interprete como verdaderas, se define como salida deseada un vector de 1's (imagen verdadera). De esta manera, cuando el discriminador haga la clasificación de las imágenes generadas, si su salida es 0 (imagen falsa), el error, definido como la diferencia entre la salida deseada y la del modelo, será más grande y esto conllevará un mayor cambio en los pesos del generador.

Filtrado de imágenes ruidosas

En la Figura 4 se observa un esquema para filtrar una imagen ruidosa en particular. En la entrada se ingresa un número manuscrito con líneas verticales y horizontales y se espera obtener a la salida el dígito filtrado; utilizando el generador GAN previamente entrenado.

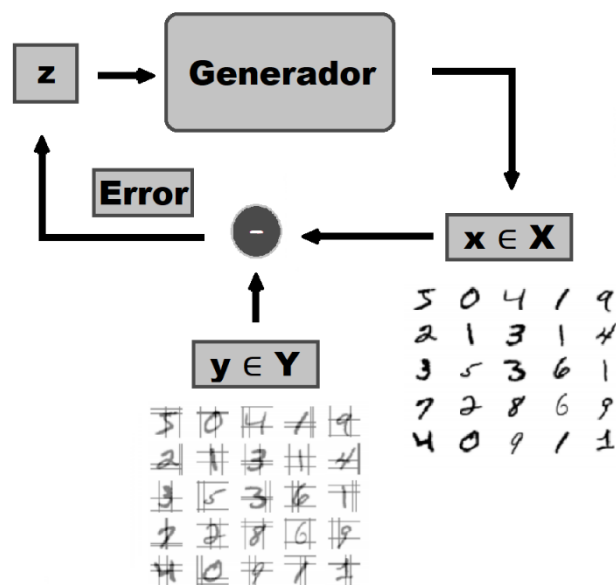


Figura 4: Esquema para filtrar imágenes inmersas en ruido.

Así, se debe resolver el problema del mapeo inverso, es decir, del espacio de imágenes ruidosas al espacio latente. Para ello, en [12] se plantea resolver el siguiente problema de optimización utilizando un algoritmo de gradiente descendiente:

$$\tilde{z} = \arg \min_z \left\{ \|y - G_{\tilde{\theta}_g}(z)\|_2^2 + \lambda \|z\|_2^2 \right\}. \quad (2)$$

Redes de convolución

Una de las soluciones propuestas para implementar estas GAN es utilizando redes de convolución.

Para el discriminador se usaron dos capas de convolución con 64 y 128 filtros respectivamente. Los *kernels* utilizados son de 5x5 y se usaron *strides* de 2x2. Esto hace que se genere un *down-sampling* de la imagen de entrada a la mitad en ambas dimensiones. A la salida de las capas de convolución se utilizó una función de activación *LeakyReLU*; y luego se agrega una capa *dropout*, para prevenir el sobreajuste (*overfitting*). Finalmente se usa una capa para cambiar la forma de los datos a una sola dimensión, para así alimentar los nodos de la capa *dense* de salida. Esta última tiene una sola neurona que estimará la probabilidad de que la imagen en la entrada sea del conjunto original.

Para el generador, se utiliza una primera capa oculta *dense*, con la dimensión de entrada correspondiente al espacio latente, en este caso de 100, y la salida de esa capa con la cantidad de nodos suficientes para representar 128 mapas de características distintos de baja resolución (7x7) de la imagen de salida. Luego de esta capa de 128x7x7 neuronas, se agrupa la información en estas 128 salidas de 7x7, donde cada una representa una interpretación distinta de la entrada. Luego se utiliza una capa para hacer la deconvolución, encargada de hacer un *up-sampling* de los distintos mapas de características generados y luego una convolución. Así se busca hacer el proceso inverso al de la convolución del discriminador, es decir, pasar de los mapas de características de baja dimensión a imágenes con mayor cantidad de píxeles. Para hacer el *up-sampling*, se usaron *strides* de 2x2. Se eligieron *kernels* de 4x4, de forma que el tamaño de los mismos sea un múltiplo del *stride*, para así prevenir el efecto “tablero de damas” (*checkerboard artifacts*), que se puede generar al hacer *upsampling*. Finalmente, se usa una capa de convolución, con un único *kernel* de 7x7 y función de activación *sigmoidea*, para reunir en una imagen final, la información de los 128 mapas de características de 28x28 cada uno.

Redes Dense

Otra de las soluciones propuestas para implementar estas GAN, es utilizando redes *dense*. Para el discriminador se usaron tres capas intermedias de 1024, 512 y 256 neuronas con función de activación *LeakyReLU* y precedidas por una capa *dropout*. En la capa de salida se tiene una única neurona con función de activación *sigmoide*. Para el generador también se utilizaron tres capas intermedias de 256, 512 y 1024 neuronas con *LeakyReLU*; y la de salida con 784 neuronas con tangente hiperbólica.

En la Figura 5 se pueden observar ejemplos de imágenes generadas con los generadores entrenados de convolución (a) y *dense* (b).

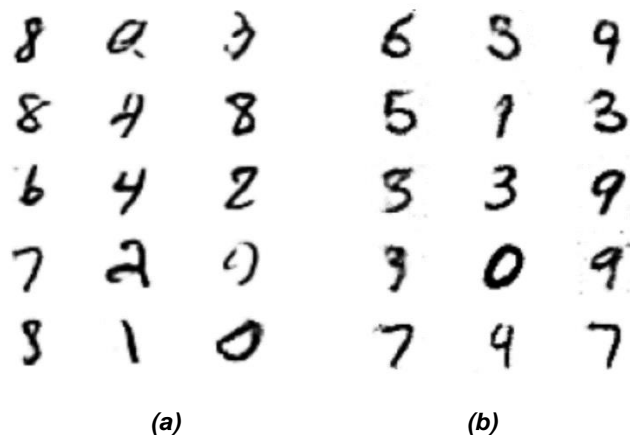


Figura 5: Imágenes generadas con los generadores (a) de convolución, (b) con capas dense.

Clasificadores

Para hacer un análisis estadístico de que aquello que genera la GAN está dentro del espacio de números y analizar cuán bien representados están estos dígitos generados dentro de dicho espacio, se necesita una herramienta capaz de determinar si una imagen de entrada se asemeja a un número.

Por lo tanto, se hicieron encuestas y luego se propusieron redes y algoritmos, que llamaremos *Clasificadores*, para automatizar el proceso que realizan las personas al clasificar las imágenes. Para ello se diseñó primero una herramienta auxiliar, donde una red con dos capas de convolución más una *dense* y una de salida aprendió a clasificar los dígitos del 0 al 9 a partir de la base de datos *Modified National Institute of Standards and Technology* (MNIST), que denominamos *Numerador 0-9*. Esta red luego se utilizará como parte del *Clasificador* en algunas de las estrategias planteadas.

Así, a partir de la encuesta, se desarrollaron los siguientes *Clasificadores*: a) *Umbrales*, b) *Discriminador Perceptrón Multicapa* (MLPD, por sus siglas en inglés), c) *10 entradas*, d) *20 entradas* y e) *MLPD con muestras ampliadas*. Se implementaron variantes con distinta función de activación: a) *sigmoidea*, b) *softmax*.

Encuesta

Se realizaron dos encuestas donde, en cada una de ellas, se mostraban 40 imágenes de dígitos manuscritos obtenidos con los dos generadores GAN indicados. La persona debía responder según su criterio, para cada imagen, si se trataba de algún número que considerase legible o por el contrario no parecía un número. Las 40 imágenes de la primera encuesta eran elegidas al azar de un conjunto de 200 imágenes obtenidas con el generador de capas de convolución y las 40 de la segunda de 200 imágenes obtenidas con el generador de capas *dense*. Cada persona podía responder alguna o ambas encuestas en caso que así lo deseara, en cualquier orden. La primera fue respondida por 89 personas, mientras que la segunda por 72. El total de personas que respondieron alguna o ambas encuestas fue de 94.

Una de las mayores dificultades que se presentó fue la poca cantidad de muestras para entrenar las redes. Adicionalmente, dado que las personas podrían ir variando su criterio o polarizarse a favor de alguna de las opciones, podría existir algún sesgo en la encuesta. De cualquier manera, al mezclarse para diferentes individuos, se asume que el resultado promedio será aplicable indistintamente a los dos generadores analizados.

Se considerará un acierto por parte de un *Clasificador* cuando la salida del mismo, para determinada imagen, coincida con la opinión de la mayoría.

Criterios para definir los conjuntos de datos

A partir de los votos de la gente, se usaron diferentes criterios para definir los conjuntos de entrenamiento con sus entradas y salidas deseadas.

Binario: la clasificación de cada una de las imágenes de la encuesta se define a partir de la opinión de la mayoría. El conjunto de entrada se conforma con las 400 imágenes de la encuesta, y el de salida con su respectiva clasificación binaria: 1 (dígito), 0 (no dígito).

Probabilidad: las 400 imágenes de la encuesta forman el conjunto de entrada, pero la salida deseada será la cantidad de gente que clasificó cada imagen como dígito respecto a la cantidad total de votos que recibió esa imagen.

Cantidad de votos: el conjunto de entrada está compuesto de forma tal que cada imagen de la encuesta es agregada tantas veces como votos recibió y la salida deseada de cada una será dígito o no dígito según lo que haya votado cada persona.

Probabilidad con cantidad de votos: se usa como salida deseada de cada imagen la probabilidad de que sea dígito. Aunque ahora el conjunto de entrada está definido de forma tal que cada imagen aparece una cantidad de veces proporcional a la cantidad de votos que recibió. Es decir, independientemente del resultado, la imagen que recibió más votos aparecerá repetida más veces en el conjunto de datos.

Umbrales

Este *Clasificador* se diseña a partir de las dos redes entrenadas del *Numerador 0-9*, fijándose 10 umbrales para cada una. Así, se determina que la imagen ingresada es un dígito si la salida de mayor valor supera su respectivo umbral, tanto para la red *softmax* como la *sigmoidea*. La determinación de los umbrales de cada dígito se realizó con un algoritmo iterativo de forma tal que la cantidad de aciertos de no dígitos de las imágenes de la encuesta sea la mayor, dado que la red estaba naturalmente entrenada para reconocer dígitos.

Del conjunto de datos de las 400 imágenes se seleccionaron las clasificadas como no dígitos y luego se dividió en una parte de entrenamiento y otra de prueba.

MLPD

Para este *Clasificador*, se utilizó un perceptrón multicapa para que aprenda a clasificar las imágenes como dígitos o no dígitos. La entrada eran los píxeles y la salida un valor entre $[0, 1]$ que estimaba la probabilidad de que sea cualquier número. Se implementó el mismo tipo de red que se usó en el discriminador que conforma la GAN, tanto para el caso de la red con capas *dense* como de convolución. Para entrenar la red se eligieron al azar imágenes de dígitos y no dígitos de la encuesta, 115 de cada una. Y se evaluó la red con las 170 muestras restantes. Para el entrenamiento se experimentó con los cuatro conjuntos de datos mencionados. En el caso *Binario* y *Cantidad de votos*, la función de pérdida usada fue entropía cruzada binaria, mientras que para *Probabilidad* y *Probabilidad con cantidad de votos* se utilizó el error cuadrático medio.

10 entradas

Para este *Clasificador* se agregó una segunda red a continuación del *Numerador 0-9*, que aprendió a determinar si la imagen de entrada era un dígito de acuerdo con las 10 salidas de la anterior.

En este caso se usa una variante de *transfer learning*, ya que el *Numerador 0-9* fue entrenado con el conjunto de datos MNIST para clasificar números de 0 a 9, y se lo utilizará como parte del *Clasificador* para intentar determinar si una imagen del nuevo conjunto de datos generados es un dígito. Así, la segunda red se encargó de asociar la incertidumbre del *Numerador 0-9* al clasificar la imagen, con la probabilidad de que sea un dígito según la opinión de la mayoría. Así se entrenó la red de 10 entradas con las 10 salidas del *Numerador 0-9*, provenientes de 320 imágenes elegidas al azar de la encuesta. Las pruebas se realizaron con los 80 datos restantes. Se usó el *Numerador 0-9* ya entrenado, tanto con función *softmax* como *sigmoidea* por separado. Las funciones de

pérdidas utilizadas en cada entrenamiento fueron las mismas que las mencionadas en el MLPD.

20 entradas

Este *Clasificador* es similar al anterior, pero en este caso, en vez de uno, se usan dos *Numeradores 0-9* simultáneamente, uno con función de activación *softmax* y el otro con *sigmoidea*; y se agrega una red en serie con 20 entradas, que se corresponden con la concatenación de las 10 salidas de cada *Numerador 0-9*. Así, se entrenó con las 20 entradas provenientes de 230 imágenes de la encuesta, 115 dígitos y 115 no dígitos, elegidas al azar; las 170 restantes fueron usadas para realizar las pruebas.

MLPD con muestras ampliadas

Dado que utilizar 400 imágenes para entrenar una red podría resultar limitante, se consideró la posibilidad de mejorar el desempeño del *Clasificador MLPD* ampliando el conjunto de datos. Para ello, se utilizaron dos redes GAN con capas de convolución para generar dígitos y no dígitos, respectivamente, a partir de las imágenes de la encuesta con su respectiva etiqueta, asignada según el voto de la mayoría.

Se separó del conjunto de las 400 imágenes de la encuesta (155 no dígitos y 245 dígitos) una parte para entrenar las redes GAN (115 no dígitos y 205 dígitos) y otra para probar el *Clasificador MLPD* (40 de cada una). Se entrenaron 5 GAN que generaron no dígitos y 5 que generaron dígitos, tomando al azar los 5 conjuntos de entrenamiento y prueba. Una vez entrenada cada GAN, se generaron 5000 imágenes al azar con cada una de ellas, las cuales fueron luego utilizadas para entrenar 10 *Clasificadores MLPD*.

Resultados

En la Tabla 1 se resumen los resultados obtenidos para los *Clasificadores* propuestos, indicándose los mejores valores obtenidos con cada uno de ellos, según las distintas pruebas realizadas. En la columna "Comentarios" se especifica la variante con la cual dicho *Clasificador* tuvo el mejor desempeño. Por ejemplo, para el caso del MLPD, el mejor resultado obtenido se corresponde con una red *dense* con el conjunto de entrenamiento *Binario*.

En la Tabla 1 se observa el porcentaje de coincidencia entre la salida del *Clasificador* y la opinión de la mayoría, tanto para los dígitos como no dígitos de las imágenes de prueba. Para el *Clasificador Umbrales* se muestra el valor promedio con su respectivo desvío al realizar 30 iteraciones; para los *Clasificadores MLPD, 10 entradas y 20 entradas*, al realizar 50 evaluaciones de cada uno y para el *MLPD con muestras ampliadas*, el resultado que se observa corresponde al promedio general obtenido al entrenar los 5 pares de redes GAN y evaluar los 10 *Clasificadores* con las imágenes de prueba para cada uno de ellos.

Tabla 1: Resultados finales de los clasificadores.

Clasificador	Acierto dígitos (%)	Acierto no dígitos (%)	Promedio (%)	Comentarios
Umbrales	73,1 ± 5,4	71,8 ± 8,1	72,45	-

MLPD	65,1 ± 4,3	65 ± 7	65,05	<i>Dense Binario</i>
10 entradas	72,2 ± 5,7	76,9 ± 6,6	74,5	<i>Sigmoidea Probabilidad</i>
20 entradas	72,9 ± 4,2	71,3 ± 7,8	72,1	<i>Cantidad de votos</i>
MLPD con muestras ampliadas	75,5 ± 6,2	54,8 ± 7,1	65,2	<i>Convolución</i>

De acuerdo con los valores de la Tabla 1, se seleccionó el *Clasificador 10 entradas* para aproximar las opiniones de la encuesta. Así, se procedió a utilizar el *Clasificador 10 entradas* para evaluar el desempeño de las dos GAN usadas para el filtrado de imágenes ruidosas.

En la Tabla 2 se muestran los resultados obtenidos al evaluar 10.000 imágenes generadas con cada una de ellas: la GAN de convolución y la *dense*. Se observa el porcentaje de imágenes filtradas generadas que fueron clasificadas como dígitos por el *Clasificador*, donde las redes *dense* entrenadas mostraron un mejor desempeño.

Tabla 2: Éxito en el filtrado de imágenes según el tipo de red.

Tipo de red	Cantidad de filtrados positivos
<i>Convolución</i>	63,54%
<i>Dense</i>	83,71%

Conclusiones

En el presente trabajo se diseñaron dos GAN, una convolucional y otra *dense*, para el filtrado de señales inmersas en ruido estructurado. Además de una evaluación de cada generador mediante una encuesta, se diseñaron varios *Clasificadores* con diversos criterios para medir el desempeño en forma automática. Según las pruebas realizadas, las *GAN dense* entrenadas, mostraron un mejor desempeño para generar dígitos sin el ruido estructurado original.

Agradecimientos

Los autores desean agradecer al Dr. Ing. Sergio Lew y al Dr. Ing. B. Silvano Zanutto por las fructíferas discusiones sobre versiones previas de este trabajo.

Referencias

- [1] Che, A., Liu, Y., Xiao, H., Wang, H., Zhang, K., & Dai, H.-N. (2021). Augmented Data Selector to Initiate Text-Based CAPTCHA Attack. *Security and Communication Networks*, 2021.

- [2] Vincent, P., Larochelle, H., Lajoie, I., Bengio, Y., & Manzagol, P.-A. (2010). Stacked Denoising Autoencoders: Learning Useful Representations in a Deep Network with a Local Denoising Criterion. *J. Mach. Learn. Res.*, 11, 3371–3408.
- [3] Agostinelli, F., Anderson, M. R., & Lee, H. (2013). Adaptive Multi-Column Deep Neural Networks with Application to Robust Image Denoising. In *Advances in Neural Information Processing Systems 26: 27th Annual Conference on Neural Information Processing Systems 2013*, 1493–1501.
- [4] Chen, G., & Srihari, S. N. (2014). Removing Structural Noise in Handwriting Images using Deep Learning. In *Proceedings of the ACM 2014 Indian Conference on Computer Vision, Graphics and Image Processing, ICVGIP'14*, 28:1–28:8.
- [5] Portilla, J., Strela, V., Wainwright, M. J., & Simoncelli, E. P. (2003). Image denoising using scale mixtures of Gaussians in the wavelet domain. *IEEE Trans. Image Process.*, 12(11), 1338–1351.
- [6] Goodfellow, I. J., Pouget-Abadie, J., Mirza, M., Xu, B., Warde-Farley, D., Ozair, S., Courville, A. C., & Bengio, Y. (2014). Generative Adversarial Nets. In *Advances in Neural Information Processing Systems 27: Annual Conference on Neural Information Processing Systems 2014*, 2672–2680.
- [7] Donahue, J., Krähenbühl, P., & Darrell, T. (2017). Adversarial Feature Learning. In *5th International Conference on Learning Representations, ICLR 2017, Conference Track Proceedings*. OpenReview.net.
- [8] Creswell, A., & Bharath, A. A. (2019). Inverting the Generator of a Generative Adversarial Network. *IEEE Trans. Neural Networks Learn. Syst.*, 30(7), 1967–1974.
- [9] Lipton, Z. C., & Tripathi, S. (2017). Precise Recovery of Latent Vectors from Generative Adversarial Networks. In *5th International Conference on Learning Representations, ICLR 2017, Workshop Track Proceedings*. OpenReview.net.
- [10] Tripathi, S., Lipton, Z. C., & Nguyen, T. Q. (2018). Correction by Projection: Denoising Images with Generative Adversarial Networks. *CoRR*, [abs/1803.04477](https://arxiv.org/abs/1803.04477).
- [11] Bora, A., Price, E., & Dimakis, A. G. (2018). AmbientGAN: Generative models from lossy measurements. In *6th International Conference on Learning Representations, ICLR 2018, Conference Track Proceedings*. OpenReview.net.
- [12] Soltani, M., Jain, S., Sambasivan, A. V., & Hegde, C. (2019). Learning Structured Signals Using GANs with Applications in Denoising and Demixing. In *IEEE 53rd Asilomar Conference on Signals, Systems, and Computers, ACSCC 2019*, 2127–2131.

28

Análisis del comportamiento de un reservorio shale fracturado hidráulicamente con open porous media

Alejandro C. Aroca Bavich ^{a b}; Gabriela B. Savioli. ^a

^a. Universidad de Buenos Aires, Facultad de Ingeniería, Instituto del Gas y del Petróleo, CABA, Argentina

^b. Departamento de Ingeniería Industrial, UTN - FRSC, Río Gallegos, Santa Cruz, Argentina
arocabavich@gmail.com

Resumen

Los niveles de consumo en permanente aumento, repercuten directamente sobre la demanda de recursos energéticos. Pese al sostenido avance de las energías limpias y renovables la matriz energética mundial aún depende en más de un 80% de los combustibles fósiles, lo que convierte a la explotación de hidrocarburos no convencionales, tanto en una necesidad como en un factor estratégico de productividad a nivel global. Además cobra gran relevancia la producción de gas natural en formaciones de baja y ultrabaja permeabilidad (tigh y shale), por su carácter de combustible puente durante la transición energética. La explotación de estos recursos depende de la fracturación hidráulica de la formación. Así, las predicciones de producción mediante simulación numérica presentan grandes desafíos debido, entre otros factores, al tamaño y complejidad de la red de fracturas y al contraste de permeabilidades entre matriz y fracturas. En el presente trabajo se modeló un yacimiento no convencional shale, con la herramienta de simulación OPM-Flow, la cual es parte del proyecto de código abierto *Open Porous Media* que abarca una serie de soluciones para la compilación de datos, simulación y procesamiento de resultados. A partir de ello se realizó un estudio de refinamiento sobre el modelo de fractura, obteniendo una buena aproximación tanto a las soluciones analíticas propuestas en el modelo trilineal. El objetivo del contraste con las soluciones analíticas radica en evaluar el alcance y la validez de estas aproximaciones simplificadas, utilizadas comúnmente en la industria para estimar parámetros físicos del reservorio.

Abstract

Consumption levels that are constantly increasing have a direct impact on the demand for energy resources. Despite the sustained advance of clean and renewable energies, the world energy matrix still depends on more than 80% of fossil fuels, which makes the exploitation of unconventional hydrocarbons, both a necessity and a strategic factor of productivity at global level. In addition, the exploitation of natural gas in formations with low

and ultra-low permeability (tight and shale) is of great importance, due to its nature as a bridge fuel during the energy transition. The exploitation of these resources depends on hydraulic fracturing of the formation. Thus, production predictions through numerical simulation present great challenges due, among other factors, to the size and complexity of the fracture network and the contrast of permeability between matrix and fractures. In this work, an unconventional shale reservoir was modeled with the OPM-Flow simulation tool, which is part of the open source project Open Porous Media that includes a series of solutions for data compilation, simulation and processing of results. Based on this, a refinement study was carried out on the fracture model, obtaining a good approximation both to the analytical solutions proposed in the trilinear model. The objective of the comparison with analytical solutions is to evaluate the scope and validity of these simplified approximations, commonly used in the industry to estimate reservoir physical parameters.

Palabras clave: OPM, Black-Oil, Modelo Trilineal, Shale

Introducción

En general para reservorios no convencionales de baja o ultrabaja permeabilidad la mejor estrategia de producción consiste en perforar pozos horizontales, cada vez de mayor longitud y realizar un fracturamiento intensivo en varias etapas. Si bien definir la separación óptima entre fracturas es un trabajo complejo, que requiere información geofísica y geomecánica, como ejemplo podemos decir que en la formación Vaca Muerta se perforan pozos con una porción horizontal de aproximadamente 1200 – 1500 m longitud y 15-20 etapas de fractura, con un distanciamiento entre etapas de 80 m [1].

La producción en estos pozos horizontales se puede considerar como el resultado de tres flujos que se mueven: 1) desde la fractura hidráulica hacia el pozo, 2) desde la zona estimulada por el fracking hacia la fractura y 3) desde la matriz original de la formación (región no estimulada) hacia la zona estimulada [2-3]. Ésta es la hipótesis básica de las soluciones analíticas monofásicas simplificadas, que se aplican no sólo para predecir el volumen de hidrocarburos recuperado sino también para ajustar la historia de producción y así estimar propiedades del yacimiento. En reservorios de tight gas, Wattenbarger et. al [4] muestran la validez del modelo simplificado de flujo lineal en las fracturas y Anderson y Liang [5] generalizan esta propuesta a shale gas; Brown [2] y Brown et al. [3] presentan un modelo analítico trilineal que contempla una sola región no estimulada, lo mismo que el modelo de 3 regiones de Stalgorova y Mattar [6] que difiere del anterior en la ubicación de dicha zona. En la publicación [7], Stalgorova y Mattar generalizan ambos modelos de 3 regiones a un modelo de 5 regiones que contempla 3 zonas no estimuladas. Igualmente hay controversia entre los autores sobre el real aporte de la región no estimulada a la producción [8].

En el presente trabajo se presentan los resultados de una serie de simulaciones realizadas con un software de código abierto cuyo funcionamiento se basa en las ecuaciones del modelo Black-Oil, y cuyos datos fueron adaptados a las características de las formaciones shale.

El objetivo del estudio es obtener información sobre la estabilidad y las limitaciones del software para representar este tipo de formaciones, buscando identificar su capacidad para tratar con el alto contraste de permeabilidades entre los modelos de matriz y fractura. Además se incluyen refinamientos de la grilla para lograr representar con mayor precisión las dimensiones y geometría de las fracturas con el objetivo futuro de incorporar distribuciones de permeabilidad más complejas.

Modelo matemático y numérico

El simulador numérico aplicado en este trabajo es el Software OPM flow del proyecto de código abierto Open Porous Media desarrollado por Equinor, SINTEF y las Universidades de Stuttgart y Bergen, bajo licencia Creative Commons [9]. Consiste en una solución completa de modelado de yacimientos, que incluye módulos de pre-procesamiento de datos, simulación y post-procesamiento de resultados. El módulo de simulación resuelve un sistema de ecuaciones diferenciales no lineales en derivadas parciales que representa el flujo de tres pseudo-componentes (Petróleo - Gas - Agua) en tres fases (oleosa-gaseosa-acuosa). Este sistema de ecuaciones, conocido como modelo Black-Oil, es ampliamente utilizado en ingeniería de reservorios [10]. Surge combinando la ecuación de conservación de masa para cada componente con la ecuación de flujo de Darcy para cada fase. Se basa en las siguientes hipótesis: 1) no hay transferencia de masa entre la fase acuosa y las otras dos; 2) el componente Gas se solubiliza en fase oleosa pero el componente Petróleo no se vaporiza en fase gaseosa; 3) la partición de los componentes entre fases está regida por un modelo termodinámico simplificado (Parámetros PVT) [11].

El simulador OPM Flow resuelve el sistema de ecuaciones por el método de volúmenes finitos utilizando un método de diferenciación automática [9].

Metodología y resultados

Con el objeto de testear la capacidad del software OPM Flow para modelar el flujo hacia un pozo horizontal en una formación no convencional, en esta primera etapa se compararon los resultados obtenidos numéricamente con soluciones analíticas simplificadas. Estos modelos simplificados se aplican en la metodología RTA (Rate Transient Analysis – análisis transitorio de caudales) en la que se analizan los datos de producción de pozos no convencionales para estimar propiedades de la formación y de la fractura hidráulica y predecir su comportamiento futuro [2-3, 6-7]. Como puede verse en la Figura 1, las etapas de fractura se aproximan por planos perpendiculares al pozo horizontal. Tanto Brown [2-3] como Stalgorova y Mattar [6-7] se limitan a estudiar un solo plano de fractura. La configuración considerada por el modelo trilineal de Brown, que es el utilizado en este trabajo, se representa en la Figura 2. Allí se muestra un dominio 2D donde se distinguen tres regiones: RF (fractura hidráulica), R2 (zona estimulada) y R1 (zona no estimulada) y se señalan los 3 flujos lineales considerados en la solución analítica. Específicamente, dicha solución se calcula en un cuarto de ese plano, basándose en la simetría del modelo. Así se resuelve la ecuación de difusividad en cada región, considerando una sola variable espacial, de acuerdo a la dirección principal del flujo, y aplicando condiciones de contorno que garanticen continuidad de flujo y presión entre las distintas regiones. La solución se obtiene mediante transformada de Laplace y se usan las presiones y los tiempos adimensionales definidos como:

$$P_d = \frac{2 \cdot \pi \cdot k_2 \cdot h}{q \cdot B_o \cdot \mu} (p_i - p) \quad (1)$$

$$t_d = \frac{k_2}{\phi_2 \cdot c \cdot \mu \cdot x_f^2} \cdot t \quad (2)$$

En las ecuaciones (1) y (2), k_2 y ϕ_2 son la permeabilidad y porosidad de la zona estimulada, h representa el espesor de la formación, B_o es el factor volumétrico del petróleo, p la presión, p_i la presión inicial, q el caudal de producción, c la compresibilidad total (fluido + formación), μ la viscosidad, t el tiempo y x_f la mitad de la longitud de la fractura.

Además de comparar con la solución analítica, también se consideraron los resultados obtenidos con otro simulador Black-Oil de dominio público, BOAST, utilizado en un trabajo anterior [12]. Este simulador resuelve las ecuaciones diferenciales mediante el método de diferencias finitas con la técnica IMPES (Implícito en Presión, Explícito en Saturación) [10].

En los experimentos numéricos y con el objetivo de analizar los límites prácticos del modelado de las dimensiones de la fractura, se utilizaron 2 tipos de grillas diferentes, una formada por bloques iguales y otra concentrando el refinamiento en torno a la fractura, y aplicando un cambio progresivo de permeabilidades.

En ambos casos se indujo un alto contraste de permeabilidad, entre la zona fracturada, la zona estimulada y la matriz original.

En el análisis realizado se simuló la producción de petróleo monofásico a caudal constante durante un período de 19 meses.

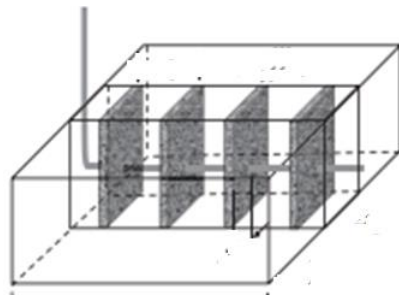


Figura 1: Modelo de pozo horizontal con fracturas

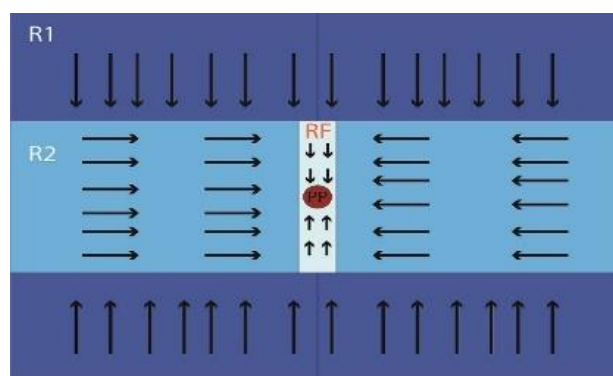


Figura 2: Modelo de simulación.

En la Tabla 1 se pueden observar los parámetros utilizados en las simulaciones, en donde la principal diferencia radica en la cantidad de bloques considerados en la dirección x .

En las figuras 3 y 4 se puede observar un detalle del modelo, en donde se aprecia el refinamiento de la grilla en torno al pozo productor. En el primer caso (Grilla 1) la fractura se

ubica en bloques centrales del mismo espesor que el resto, a los cuales se les asigna una permeabilidad constante de 1000 mD. A pesar de lo elemental de este modelo, en la Figura 6 se puede observar que se obtuvo una muy buena aproximación a la solución analítica, y lo mismo ocurre con el simulador BOAST.

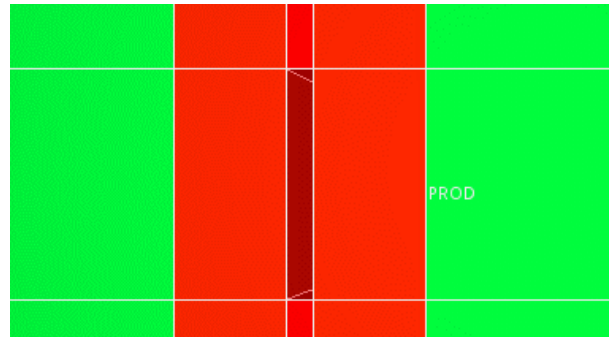


Figura 3: Primer modelo de fractura

Tabla 1: Resumen de parámetros utilizados

Espesor de la formación, h	30 m
Porosidad Región no estimulada R1	0,07
Porosidad Región estimulada R2	0,45
Porosidad Fractura	0,38
Permeabilidad Región no estimulada R1	0,01 mD
Permeabilidad Región estimulada R2	2 mD
Permeabilidad Fractura	1000 mD
Cantidad de bloques X	11
Cantidad de bloques Y	9
Cantidad de bloques Z	1
viscosidad, μ_o	0,6 cP
Factor de volumen, B_o	1,15
Presión inicial, p_i	90.10 bar
Caudal de producción, q	30 m ³ /d
Cantidad de bloques X (Refinamiento)	39

Cantidad de bloques Y (Refinamiento)	9
Cantidad de bloques Z (Refinamiento)	1

El objetivo de la segunda grilla (Grilla 2) es testear un modelo más realista, con una fractura de muy pequeño espesor, para analizar la capacidad de OPM de simular con altos contrastes en el tamaño de los bloques y en los valores de permeabilidad. En este caso, se incorporaron un total de 10 bloques previos a la fractura y 11 bloques en la zona de fractura. Pero fue necesario introducir un aumento progresivo de la permeabilidad: en los primeros 10 bloques la permeabilidad crece progresivamente desde 50 mD a 500 mD, mientras que los siguientes 5 bloques, ya dentro de la zona de fractura se asignaron 750 mD. Finalmente la permeabilidad del bloque central, conectado al pozo, se estipuló en 1000 mD.

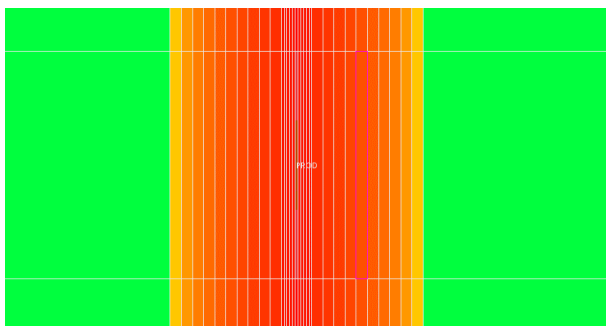


Figura 4: Segundo modelo de fractura

La simulación se ejecutó durante 19 meses, indicando una presión de abandono en fondo de pozo de 30 bar, que cuando es alcanzada, detiene la explotación. El comportamiento de las presiones en la matriz, región estimulada y fractura fue el esperado para un reservorio de estas características. En la Figura 5 se puede observar la distribución de presiones de los estados, inicial, intermedio y el final, correspondientes a la Grilla 2, distribución de presión que coincide a su vez, con la Grilla 1.

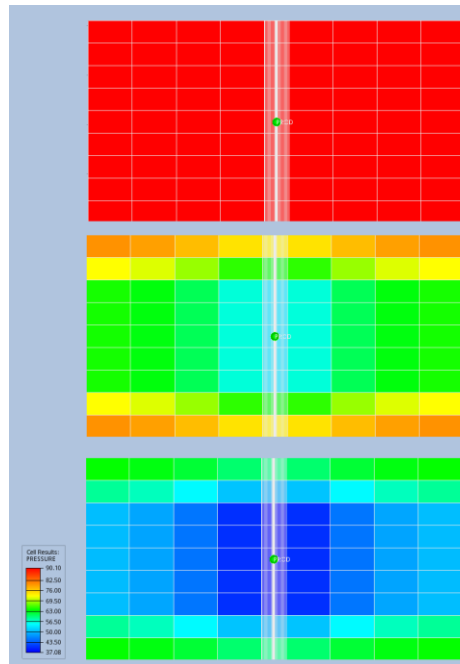


Figura 5: Presión inicial, intermedia y final.

Utilizando ambas grillas los resultados del simulador OPM flow se ajustaron correctamente a la solución analítica propuesta por Brown y a los valores obtenidos con BOAST. Los ajustes se pueden observar en la Figura 6. Esto implica que el simulador fue capaz de manejar altos contrastes de permeabilidades y tamaños muy disímiles en la grilla sin presentar problemas de estabilidad o convergencia.

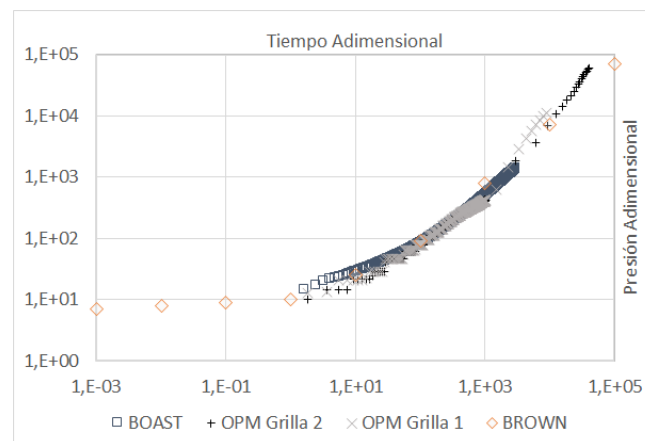


Figura 6: Comparación adimensional entre los resultados analíticos y numéricos

Esta misma observación se puede aplicar a la Figura 7 en donde se muestran, tanto para el primero como para el segundo modelo de grilla, las presiones dinámicas de fondo de pozo expresadas en BAR (en color naranja) y la producción acumulada de petróleo medida en m^3 (en color verde) en función del tiempo. Las curvas correspondientes a cada uno de los modelos se encuentran superpuestas, es decir que la diferencia en los resultados es casi

imperceptible (los correspondientes a la Grilla 1 se distinguen en la Figura 7 con el número 23 y los de la Grilla 1 con el número 21).

Conclusiones

Se verificó la capacidad del simulador OPM flow para modelar un reservorio con altos contrastes de permeabilidad, comparando sus resultados con los obtenidos por otro simulador (BOAST) y los correspondientes a un modelo analítico simplificado.

Se refinó la grilla para modelar espesores de fractura realistas, obteniéndose convergencia sin pérdida de estabilidad. En la grilla refinada debió incluirse una disminución progresiva de las permeabilidades.

Aplicando la grilla con distinto grado de refinamiento será posible incorporar geometrías complejas de fracturas que permitirán superar las restricciones de las soluciones analíticas tradicionales. Así se podrá analizar el rango de validez de los modelos simplificados, determinando cuáles son las restricciones más importantes para tener en cuenta en las futuras predicciones de producción.

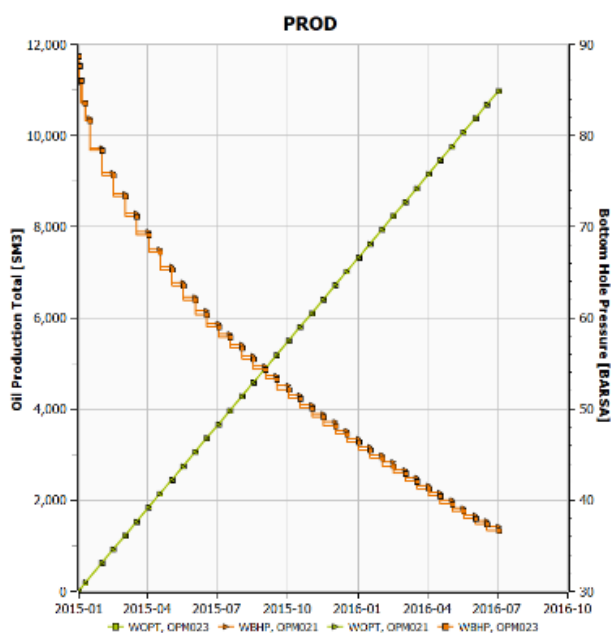


Figura 7: Producción acumulada de petróleo y presión dinámica de fondo de pozo en función del tiempo

Agradecimientos

Agradecemos al Ing. Rogelio Luperne por su invaluable aporte en relación al simulador OPM flow. Este trabajo fue parcialmente financiado por ANPCyT, Argentina (PICT 2015 1909) y la Universidad de Buenos Aires (UBACyT 20020190100236BA).

Referencias

- [1] Skalary M. (2018) *Informe estimulación por fractura hidráulica en formaciones no convencionales, Experiencia en Mendoza sobre Vaca Muerta. Secretaría de Ambiente y Ordenamiento Territorial. Gobierno de Mendoza*
- [2] Brown, M., (2009) *Analytical trilinear pressure transient model for multiply fractured horizontal wells in tight shale reservoirs*, Msc. Thesis, Colorado School of Mines.
- [3] Brown M., Ozkan E., Raghavan, R., Kazemi, H., (2011) *Practical solutions for pressure-transient responses of fractured horizontal wells in unconventional shale reservoirs*, spe 125043, spe reservoir evaluation & engineering, 663-676
- [4] Wattenbarger R., El-banbi A. H., Villegas M. E., Maggard J. B., (1998). *Production analysis of lineal flow into fractured tight gas wells*, spe 39931, proceedings of the 1998 rocky mountain regional low permeability reservoir symposium and exhibition, denver, colorado, 5-8 april
- [5] Anderson D. M., Liang P., (2011). *Quantifying uncertainty in rate transient analysis for unconventional gas reservoirs*, spe 145088. Proceedings of the spe north american unconventional gas conference and exhibition, the woodlands, texas, usa, 14–16.
- [6] Stalgorova, E., Mattar L., (2012) *Analytical model for history matching and forecasting production in multfrac composite systems*, SPE 162516, Proceedings of SPE Canadian Unconventional Resources Conference, Calgary, Alberta, Canadá, October 30- November 3.
- [7] Stalgorova E. and Mattar L., (2012) *Practical Analytical Model to Simulate Production of Horizontal Wells with Branch Fractures*, SPE 162515, Proceedings of SPE Canadian Unconventional Resources Conference, Calgary, Alberta, Canadá, October 30- November 3.
- [8] Ruiz Maraggi, L., (2018) *Mechanistic and Probabilistic Rate-Time Analysis of Unconventional Reservoirs*, Msc. Thesis, The University of Texas at Austin.
- [9] Rasmussen A.F, Sandve T.H., Bao K. Et Al., (2020) *The Open Porous Media Flow Reservoir Simulator, Computers And Mathematics With Applications*, <https://doi.org/10.1016/j.camwa.2020.05.014>
- [10] Fanchi, J. R., (1997) *Principles of Applied Reservoir Simulation*. Gulf Professional Publishing Company, Houston, Texas.
- [11] Bidner M. S., (2001) *Propiedades de la roca y los fluidos en reservorios de petróleo*. Eudeba (Editorial de la Universidad de Buenos Aires), Argentina
- [12] Aroca Bavich A.C.; Savioli G.B. (2019) *Análisis del modelo Black-Oil aplicado a la simulación de yacimientos no convencionales*. Mecánica Computacional, 37: 993 – 1002.

¿Baterías, GNC, Diesel o Hidrógeno? Cómo comparar tecnologías de buses urbanos usando índices económicos, energéticos y ambientales.

Levitán, D.^{a,1}; Muñoz, P.^b; Franceschini, E.^c; Rodríguez
C.R.^d; Humana, T.^b; Correa, G.^b

^a ITHES (UBA - CONICET), Pabellón de Industrias, Ciudad Universitaria, Intendente Güiraldes 2160, C1428EGA, Ciudad Autónoma de Buenos Aires, Argentina

^b CITCA, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad Nacional de Catamarca, CONICET, Prado 366, K4700BDH, San Fernando del Valle de Catamarca, Argentina

^c INFIQC, Departamento de Fisicoquímica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba, CONICET, Ciudad Universitaria, 5000 Córdoba, Argentina

^d Facultad de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales, Universidad Nacional de Córdoba, Av. Vélez Sarsfield 1611, X5016GCA, Córdoba, Argentina

¹ dlevitan@fi.uba.ar

Resumen

Se presenta una metodología para el cálculo de un Índice Integrado para comparar entre tecnologías de buses urbanos, compuesto por tres subíndices: El primero mide eficiencia en el uso de energía “desde el pozo a la rueda”. El segundo mide el potencial de calentamiento global en términos de la emisión de CO₂ equivalente a la atmósfera. El tercero compara económicamente utilizando el costo operativo total, desarrollando el análisis de costos para Argentina.

El análisis de sensibilidad entre los 3 subíndices muestra que incluso asignando un peso relativo del 66% al factor económico, que otorga ventaja a los buses a combustible fósil, las tecnologías alternativas resultarán superadoras en forma global en los próximos 10 años.

Abstract

A method is proposed for the calculation of an Integrated Index used to compare between urban bus technologies. The index is composed of three sub-indexes. The first sub-index measures energy efficiency Well-to-Wheel. The second measures Global Warming Potential in terms of CO₂ equivalent emissions. The third sub-index compares Total Cost of Ownership to make an economical comparison, developing the cost analysis for the case of Argentina.

Sensitivity analysis between the three sub-indexes shows that even if the relative weight for the economic factor reaches 66%, giving advantage to current fossil fuel based technologies, clean energy buses will present Index values overcoming Diesel and Compressed Gas over the course of the next 10 years.

Palabras clave: Eficiencia energética; Transporte sostenible; Índices integrados; Energía renovable.

Keywords: Energy Efficiency; Sustainable Transport; Integrated Index; Renewable Energy.

Introducción

El cambio climático es una realidad que afectará las condiciones de vida de las próximas generaciones. La transición energética es una necesidad para mitigar el efecto de la actividad humana en el calentamiento global. El transporte en nuestra región representa 24% de las emisiones de gases de efecto invernadero [1].

El transporte urbano de pasajeros, que requiere una renovación periódica de la flota de vehículos, brinda una oportunidad para disminuir la contaminación en las ciudades.

En la actualidad, los buses con motor de combustión interna que utilizan combustible Diesel son los más usados a nivel global, sin embargo se estima que hacia 2030 la mayoría de los nuevos vehículos serán eléctricos [1]. El interés en los vehículos eléctricos ha aumentado rápidamente en los últimos años, con más de 2 millones de vehículos de este tipo vendidos en todo el mundo solamente en 2019 [1]. Los vehículos eléctricos de celda de combustible de hidrógeno han avanzado hacia la comercialización y tanto buses de celda de combustible como vehículos en general han tenido un amplio despliegue en varios países [2]. Una alternativa que se encuentra actualmente en estudio en Argentina dada la infraestructura de recarga existente, es el pasaje de la flota de buses urbanos a GNC [3].

El análisis del pozo a la rueda (Well-to-Wheel, WTW), desarrollado por el Laboratorio Nacional de Argonne, es análogo al análisis del ciclo de vida (de sus siglas en inglés -LCA-) para productos de consumo, y permite comparar el comportamiento de los vehículos cuando se alimentan con diversas fuentes de energía y se conducen a lo largo de diferentes tipos de carreteras. Hay numerosos estudios en la literatura basados en el análisis WTW que realizan un examen detallado de los sistemas de transporte y tipos de generación aplicados a diferentes países [4].

El análisis WTW se puede desglosar en dos etapas. La etapa del pozo al tanque (Well-to-Tank, WTT) incluye los costos de energía de la extracción, explotación, transporte, procesamiento de los recursos naturales. En la etapa del tanque a la rueda (Tank-to-Wheel, TTW) se tiene en cuenta la eficiencia del propio vehículo, desde que se carga el combustible hasta que se transforma en calor y energía.

Un análisis que se centre únicamente en los factores ambientales o de eficiencia puede no considerar las dificultades de acceso al capital para un país periférico. Centrar el análisis en los costos económicos ignora aspectos en la salud y el medio ambiente, y puede llevar a

tomar decisiones conservadoras en términos tecnológicos. Es necesaria una visión global para analizar el comportamiento de los sistemas en diferentes escenarios.

El presente estudio se lleva a cabo dentro del alcance de WTW y se aplica a un autobús urbano de pasajeros con cuatro sistemas de propulsión diferentes, alimentados con sus respectivos vectores de energía obtenidos de distintas fuentes: bus de combustión interna Diesel y GNC, bus eléctrico a baterías de iones litio, y bus con celda de combustible alimentado con hidrógeno.

Metodología de cálculo

El método usado se basa en la descripción de los procesos discretos individuales, considerando la energía utilizada, los costos asociados a la inversión y operación de cada opción tecnológica, y las emisiones gaseosas al medio ambiente. En el presente estudio se utilizará la metodología desarrollada previamente en [5], [6], para el análisis de eficiencia energética.

Para el análisis de WTT, se propone el escenario para la producción de todos los vectores de energía en Argentina actual (año 2019, último con registros completos publicados en el momento de realizar este estudio); y se incluyen datos preliminares del estudio de escenarios futuros (hasta el año 2030) para la generación de electricidad, basados en el documento Escenarios Energéticos 2030, elaborado por el Ministerio de Energía y Minería en el año 2019 [7]. El estudio completo de la evolución de los índices a lo largo del período 2019-2030 se encuentra en proceso de elaboración y será publicado próximamente en un trabajo futuro.

Como se puede observar en la Figura 1, para la etapa WTT los combustibles Diésel, Gas Natural Comprimido (GNC), H₂ comprimido, y electricidad se consideraron como vectores de energía de salida. Para la generación de electricidad se utilizan los datos de la matriz energética Argentina para el año 2019 [11].

En la etapa TTW se propusieron cuatro trenes de potencia, que utilizan los vectores de energía analizados en la etapa WTT, para su uso en un autobús para el transporte urbano de pasajeros. Vehículo con motor de combustión interna alimentado con diésel (DV), vehículo híbrido con celdas de combustible (FCHEV) alimentado con hidrógeno, vehículo eléctrico a baterías (BEV) alimentado con electricidad, vehículo (GNCV) alimentado con gas natural comprimido. Para los DV y GNCV se utilizó el paquete de análisis ADVISOR provisto por el Departamento de Energía de EEUU, mientras que los BEV y FCHEV fueron analizados utilizando modelos dinámicos propios [5], [6]. Los consumos energéticos de cada tren de potencia (en MW/km recorrido), las emisiones (en kg de CO_{2,eq}/km recorrido) y el Costo Operativo Total asociado (en US\$/km recorrido) fueron procesados para obtener los valores de salida para cada tecnología (ver Figura 2).

El análisis WTW se hizo desde la perspectiva del transporte público estudiando los trenes de potencia en un autobús para el transporte urbano de pasajeros.

Los trenes de potencia se estudiaron con dos ciclos de conducción diseñados para evaluar los niveles de emisión y la eficiencia de combustible en los vehículos: Braunschweig como ciclo urbano y el Ciclo Armonizado Global para Vehículos (WHVC), que incorpora parte del ciclo de conducción urbano y parte en rutas.

Los patrones de conducción, tiempo de detención y cantidad de ciclos de aceleración y frenado afectan el consumo de combustible y la eficiencia del vehículo. Particularmente para los vehículos a combustión interna, también se ven afectados los perfiles de emisión de gases según el punto operativo del motor.

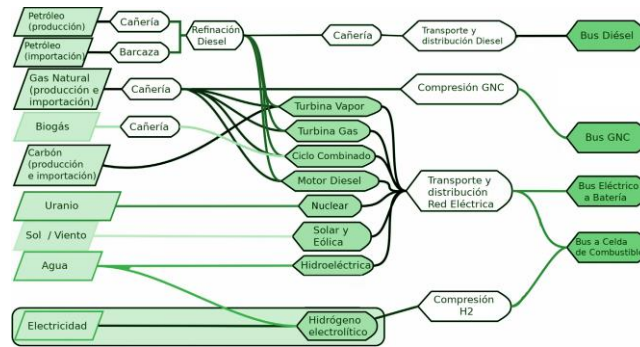


Figura 1: Fuentes de energía y procesos analizados para cada tecnología de Bus, etapa WTT.

a.

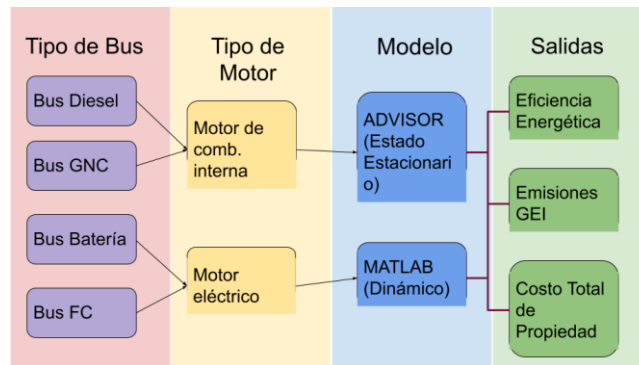


Figura 2: Modelos utilizados y parámetros de salida para cada tecnología de Bus, etapa TTW.

Para los buses BEV y FCHEV se estudió el impacto de la variación de la autonomía del vehículo (100, 200 y 300 km) en el desempeño de las unidades.

Para el vector H₂ se propone la generación de H₂ verde. Si bien el reformado con vapor de los hidrocarburos es el proceso más económico y ampliamente utilizado para la producción de H₂ [2], y aproximadamente el 90% del H₂ generado en el mundo se produce a partir de combustibles fósiles (H₂ gris), principalmente a través del reformado de metano con vapor [8], casi toda la producción actual (en Argentina y en el mundo) es cautiva, por lo que cualquier abastecimiento adicional de H₂ puede ser concebido por fuera de la matriz actual.

Actualmente la Argentina no cuenta con una infraestructura de producción, transporte, distribución y repostaje de H₂ apta para el consumo de una flota vehicular, por lo que se propone para el análisis un escenario de producción de H₂ verde a través de un proceso de electrólisis del agua con electricidad proveniente de fuentes renovables, el cual luego es comprimido y almacenado para posteriormente ser transportado y distribuido por hidrogenoductos. Al final de la etapa WTT se encuentra la estación de carga de H₂.

Como se puede ver en la Figura 1, en el caso del vector electricidad, se parte del mix de tecnologías: renovables, nuclear y fósiles. Posteriormente la electricidad es transmitida por redes de alta tensión y distribuida en redes de media y baja tensión. Para finalizar la electricidad es erogada a través de estaciones de carga dedicadas.

Se considera un 14,65% de pérdidas debidas a la distribución y transmisión en la red según los últimos datos disponibles del Banco Mundial [9].

Para generar las rutas de producción de diésel se tomaron los insumos actualizados de Argentina e incluyeron el combustible importado transportado en barcaza, crudo convencional y no convencional de las reservas nacionales, transporte de petróleo crudo, refinación, transporte y distribución de diésel (ver Figura 1).

También se tiene en cuenta el corte de biodiesel según lo establece la regulación de la Secretaría de Energía [10].

Para generar las vías de producción de Gas Natural Comprimido (GNC) se tomaron los datos actualizados de Argentina y se incluyó la producción de gas convencional y no convencional, y el transporte a través de gasoductos [11]. Además, como se muestra en la Figura 1, se tuvieron en cuenta las estaciones de compresión de GN necesarias para realizar el transporte y la distribución. La energía eléctrica requerida para el proceso se obtiene de la matriz eléctrica Argentina [11].

Respecto de la etapa TTW, los trenes de potencia de BEV y FCHEV se estudiaron utilizando modelos previamente desarrollados por los autores [5], [6], en tanto que los buses Diesel y GNC, que utilizan un tren de potencia convencional, se utilizaron los datos obtenidos a partir del informe de Söderena et al. [12].

Para referencia del modelo de batería se refiere al lector a [13].

El tren de potencia del FCHEV consiste en un sistema de celda de combustible con una batería de iones de litio. La principal fuente de energía es el hidrógeno almacenado en un recipiente a presión (350 bar) que se transforma en electricidad en la celda de combustible, con una batería de iones de litio para complementar en los momentos en que no logra generar la energía requerida. Este requerimiento puede surgir debido a retrasos en la respuesta de la celda de combustible, o bien por una solicitud de potencia que exceda la potencia máxima de la celda de combustible. Se contempla además la carga de la batería a través del frenado regenerativo.

Resultados

EFICIENCIA ENERGÉTICA

La eficiencia energética global se elabora a partir de la cantidad de energía necesaria por km recorrido para el bus considerando el alcance WTW.

Comparando entre los ciclos Braunschweig y WHVC para cada tecnología se puede apreciar que el ciclo urbano tiene una demanda energética mayor que el ciclo armonizado, como se puede ver en la Figura 3.

En términos absolutos de uso de energía, la tecnología BEV provee los menores consumos energéticos y por lo tanto los mayores valores de eficiencia energética para ambos tipos de ciclo, mientras que para un ciclo urbano los FCHEV tienen una eficiencia comparativamente mayor que los GNCV y DV. Para un ciclo urbano-interurbano, la eficiencia del DV se ubica por encima de la correspondiente a los FCHEV, si bien sigue por debajo de la eficiencia de los BEV.

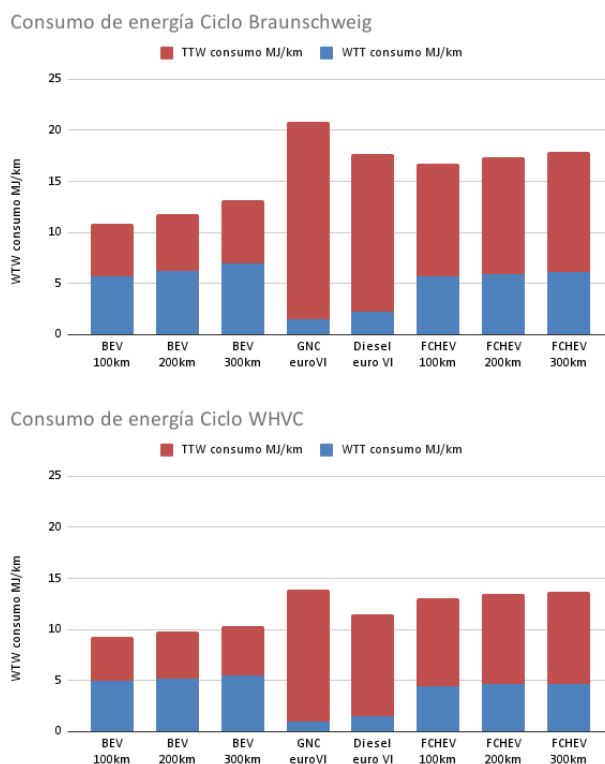


Figura 3: Consumo energético WTW en ciclos Braunschweig y WHVC.

EMISIONES DE GASES DE EFECTO INVERNADERO

El aspecto ambiental del análisis queda capturado por un índice que considera el potencial de efecto invernadero producido por las emisiones gaseosas vinculadas a cada tipo de vehículo y su vector energético asociado, a lo largo de su ciclo de vida [14].

Comparando los ciclos entre sí, para todas las opciones tecnológicas se observa una mayor emisión de GEIs para el ciclo Braunschweig que para el ciclo WHVC. Dicho resultado está vinculado al mayor consumo energético en el ciclo urbano, de forma similar a lo observado en la Figura 3 y a lo analizado en los párrafos precedentes.

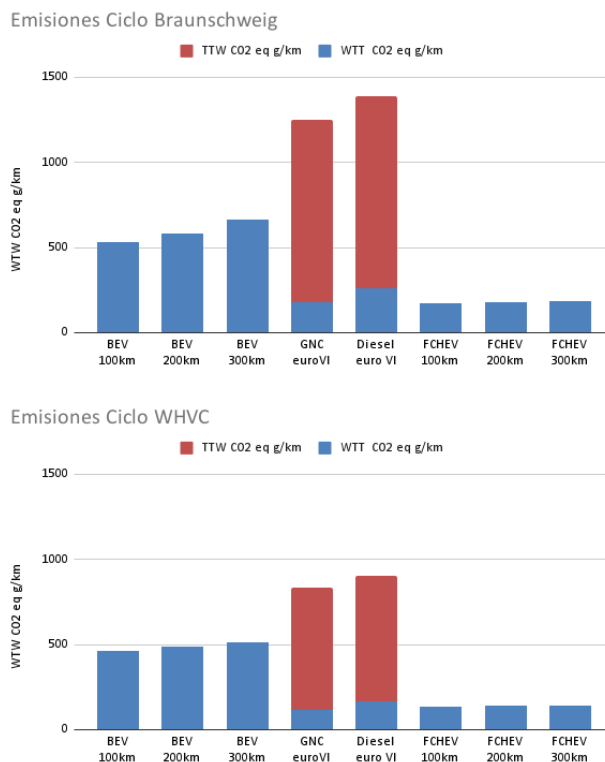


Figura 4: Emisiones WTW en ciclos Braunschweig y WHVC.

El vector hidrógeno utilizado para realizar la comparación es hidrógeno verde, y por lo tanto, sus emisiones de GEIs se deben únicamente al proceso de compresión, que utiliza energía de la red con la matriz eléctrica Argentina 2019.

Analizando las diferencias dentro de la categoría de BEV (Figura 4) vemos que las emisiones de GEIs dependen de la autonomía del vehículo.

Para ambos ciclos en los FCHEV, existen diferencias en las emisiones entre las distintas autonomías estudiadas, sin embargo estas diferencias parecen ser irrelevantes.

Las emisiones de GNCV y DV son las más altas en ambos ciclos, debido principalmente a las emisiones TTTW, ausentes para todos los vehículos eléctricos. En ambos casos las emisiones de GEIs de GNCV son menores a las del DV.

COSTO OPERATIVO TOTAL (TCO)

El costo operativo total se divide en los costos iniciales de inversión y los costos operativos. Para cada uno de estos costos se realiza un análisis detallado de cada uno de los componentes: motor eléctrico o a combustión, celdas de combustible, tanques de hidrógeno, paquetes de baterías, electrónica, frenos, carrocería, suspensión, etc. Se realizaron también consideraciones operacionales y sus costos asociados, como pueden ser el combustible, mantenimiento, infraestructura necesaria, etc. El desarrollo del análisis de costos para Argentina en 2019 excede el marco del presente trabajo y se encuentra en preparación para su futura publicación.

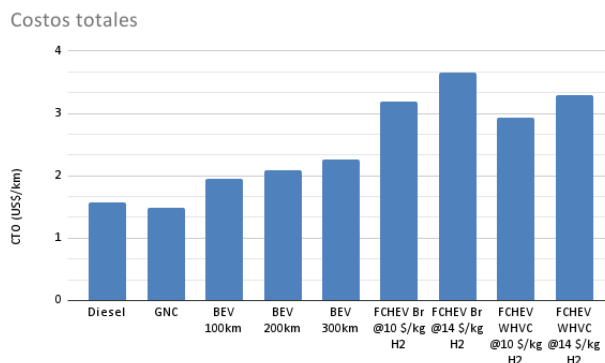


Figura 5: Costo total de operación para cada tecnología, considerando costo de H₂ para FCHEV.

Para el caso de los FCHEV el cálculo del costo del combustible se realizó tomando valores de 10 y 14 US\$/kg H₂ como límites inferior y superior respectivamente, para el costo del combustible.

El análisis del TCO para el escenario 2019 muestra que las opciones de mayor maduración tecnológica son las que actualmente presentan un menor costo total (DV y GNCV), mientras que tanto BEV como FCHEV presentan un costo mayor. En el caso de las BEV, debido al alto costo de las baterías, la modificación en la autonomía del vehículo (de 100 a 300 km) genera un aumento sensible en el TCO. En el caso de los FCHEV este efecto es menor, sin embargo se observa una notoria modificación producto del ciclo de manejo utilizado para el análisis (de manera similar a lo observado en las Figuras 3 y 4). Asimismo, un factor determinante en el TCO de los FCHEV es el costo del combustible. Se observa un aumento de entre el 12 y el 14% debido a la variación del costo del kg de H₂ entre 10 y 14 US\$.

Análisis de sensibilidad

Analizando cada índice por separado, podemos ver que las distintas tecnologías predominan dependiendo del aspecto que se esté analizando. En el aspecto de eficiencia energética, la opción tecnológica que resulta más apropiada es la de BEV; mientras que en el aspecto de las emisiones de GEIs son los FCHEV los que presentan la mejor característica. Por último, en términos de costos las tecnologías de motor a combustión interna GNCV y DV son las que resultan más convenientes en la actualidad.

Buscando una medida unívoca para evaluar el desempeño de los buses que incluya los índices estudiados, se propone una suma ponderada de los índices normalizados.

El primer paso consiste en normalizar cada índice dividiendo un valor de referencia por los valores obtenidos en las diferentes opciones tecnológicas. El valor de referencia se toma como el menor valor (en términos absolutos) obtenido entre todas las opciones analizadas. Se obtienen valores adimensionales normalizados entre 0 y 1, donde la opción seleccionada es más deseable cuanto mayor es el valor obtenido.

El segundo paso consiste en realizar la suma ponderada, afectando a los índices por un valor que refleje su importancia relativa. Se toma como condición que la suma de los pesos relativos otorgados a los tres índices sea 1. Para determinar el peso adecuado a cada índice se realiza un análisis del resultado para el Índice Integrado al variar el peso relativo de TCO, Eficiencia Energética y Emisiones. Como primera aproximación se otorgó idéntica

ponderación a los índices de Eficiencia Energética y Emisiones, lo que deja como único grado de libertad el peso relativo del TCO, utilizado como variable independiente en el análisis.

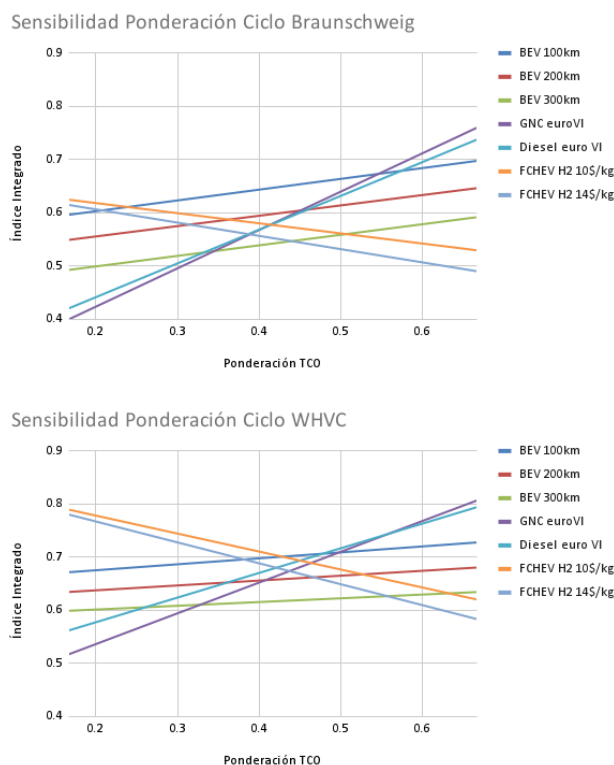


Figura 6: Índice Integrado obtenido para cada tecnología en función del peso asignado a TCO.

En la Figura 6 se observa que al otorgar un peso idéntico a los tres índices (valor de 0,33 para el índice TCO), la tecnología favorecida para el escenario 2019 resultan ser los BEV.

Al disminuir el peso relativo del TCO aumenta el peso relativo otorgado a los índices de eficiencia energética y a las emisiones de gases de efecto invernadero. Debido a las bajas emisiones de GEIs, la tecnología favorecida en este caso es la de los FCHEV, de mayor costo.

Al aumentar el peso relativo del TCO hasta valores por encima de 0,5 se observa que los DV y los GNCV presentan los valores de índice integrado más favorables para el escenario actual. El cruce se produce a ponderaciones más bajas en el caso del ciclo WHVC, mientras que en el Ciclo Braunschweig el cruce se produce por encima de 0,66. La mayor ponderación del índice económico refleja con fidelidad la importancia relativa que presentan los factores financieros debidos a las restricciones presupuestarias que se presentan en un país periférico como Argentina.

En una primer aproximación hacia la evolución temporal de los índices, se puede estimar que el TCO de las tecnologías que se encuentran en etapa de maduración y salida al mercado (BEV y FCHEV) tiendan a disminuir en la próxima década aprovechando las economías de escala, mientras que DV y GNCV mantendrán aproximadamente los costos actuales. En términos de eficiencia energética es esperable un mayor desarrollo de los FCHEV que actualmente se encuentran limitados por factores tecnológicos como, por ejemplo, la etapa de electrólisis. La incorporación de energías renovables en la matriz

eléctrica Argentina tenderá a mejorar los índices de emisiones para las opciones FCHEV y, en mayor medida debido a su dependencia con la matriz, a los BEV.

Conclusiones

Los resultados obtenidos para cada índice reflejan las condiciones particulares de las opciones tecnológicas. El TCO favorece a los vehículos a combustión interna, mientras que el uso de energía resulta más favorable a los vehículos eléctricos, especialmente BEV. Las emisiones resultan menores para los FCHEV que utilizan energías renovables como fuente primaria. Se observa un mayor consumo energético y una mayor cantidad de emisiones para cada tipo de tecnología en ciclo urbano por sobre un ciclo urbano-interurbano. El efecto del ciclo es mayor sobre los vehículos a combustión interna, seguido por los FCHEV.

La ponderación de los índices refleja el peso relativo que pueda tener cada factor en la decisión de una opción tecnológica. Una ponderación homogénea sobre los tres factores, resulta en el Índice Integrado más favorable para los BEV. Variando la ponderación del factor económico, de mayor determinación para un país con restricciones financieras como la Argentina, resulta en un Índice Integrado favorable a las tecnologías DV y GNCV en la actualidad para un factor de peso mayor a 0,6 en ciclo urbano, y mayor a 0,5 en ciclo urbano-interurbano.

La proyección del escenario hasta 2030 tiende a favorecer a las opciones electrificadas, que superan a las de combustión interna en todas las ponderaciones a partir de los próximos años.

Referencias

- [1] Agencia Internacional de Energía (2020), World Energy Outlook 2020. OECD Recuperado de: www.iea.org/reports/world-energy-outlook-2020
- [2] Dolf Gielen, D.; Taibi, E.; Mirand, R. (2019). Hydrogen: A renewable energy perspective. *International Renewable Energy Agency (IRENA)*, Abu Dhabi, Reporte Técnico. Recuperado de: https://www.irena.org/-/media/Files/IRENA/Agency/Publication/2019/Sep/IRENA_Hydrogen_2019.pdf
- [3] N. Calero; Schön, G. (2020). *SCANIA presenta su primer bus a GNC para transporte urbano*. Recuperado de: <https://www.scania.com/ar/es/home/experience-scania/news-and-events/News/2019/scania-presenta-su-primer-bus-a-gnc-para-transporte-urbano.htm>
- [4] Ramachandran, S.; Stimming, U. (2015). *Well to wheel analysis of low carbon alternatives for road traffic*. *Energy Environ. Sci.* 8, 3313
- [5] G. Correa, G.; Muñoz, P.; Rodríguez, C. (2019). *A comparative energy and environmental analysis of a diesel, hybrid, hydrogen and electric urban bus*, *Energy*, 187 (11) 115906.
- [6] G. Correa, G.; Muñoz, P.; Falaguerra, T.; Rodríguez, C. (2017). *Performance comparison of conventional, hybrid, hydrogen and electric urban buses using well to wheel analysis*, *Energy*, 141.
- [7] Alzieu, P.; et. al. (2017) *Escenarios Energéticos 2030*. Ministerio de Energía y Minería, Buenos Aires, Reporte Técnico. Recuperado de: http://www.energia.gob.ar/contenidos/archivos/Reorganizacion/planeamiento/escenarios/as_15160516401.pdf

- [8] Dufour, J.; Serrano, D.; Galvez, J.; Moreno Garcia, C. (2009). *Life cycle assessment of processes for hydrogen production. Environmental feasibility and reduction of greenhouse gases emissions*. International Journal of Hydrogen Energy, 34 (3) 1370–1376.
- [9] World Bank (2021), *Electric power transmission and distribution losses (% of output) | Data*. [Online]. Recuperado de: <https://data.worldbank.org/indicator/EG.ELC.LOSS.ZS>
- [10] Secretaría de Energía de Argentina (2013). *Resolución N° 1125/2013*. Recuperado de: <http://servicios.infoleg.gob.ar/infolegInternet/anexos/220000-224999/224799/norma.htm>
- [11] Secretaría de Energía de Argentina (2021) *Datos Energía* Recuperado de: <http://datos.minem.gob.ar/>
- [12] Söderena, P.; Nylund, N.-O.; Mäkinen, R. (2019). *City bus performance evaluation*. VTT Technical Research Centre of Finland ,Reporte Técnico. Recuperado de: <https://cris.vtt.fi/en/publications/city-bus-performance-evaluation>
- [13] Muñoz, P. M.; Correa, G.; Gaudiano, M. E.; Fernández, D. (2017). *Energy management control design for fuel cell hybrid electric vehicles using neural networks*. International Journal of Hydrogen Energy, 42 (48), 28932–28944.

Sistema de extracción de litio de salmuera, con electrodos porosos planos: simulación y experimentos

Romero, Valeria C.E. ^a; Tagliazucchi, Mariob; Calvo, Ernesto J. ^b

^a CIDMEJu (CONICET-UNJu), CDT Gral. Savio, Palpalá, Jujuy AR-4612

^b INQUIMAE (CONICET-UBA), Pabellón 2, Ciudad Universitaria, AR-1428 Buenos Aires
romerovce@gmail.com

Resumen

El sistema de extracción de cloruro de litio de salmuera en configuración flow-by con electrodos porosos planos se modela matemáticamente, se simula en el programa COMSOL Multiphysics® y la simulación se valida con resultados experimentales. Se caracteriza el sistema con algunas variables dependientes del modelo. Se encuentra el agotamiento de litio en salmuera en perfiles de concentración de cloruro de litio en electrolito, al aumentar el espesor de los electrodos planos, como así también el efecto predominante del transporte de materia por convección en el canal de electrolito y por difusión y migración dentro de los electrodos porosos. Se estudia el efecto de densidades de corriente aplicadas altas, en la capacidad de extracción del sistema estudiado, obteniéndose un sobrepotencial por caída óhmica, que podría generar una resistencia no deseada en los electrodos.

Abstract

The extraction system of lithium chloride from brine, in flow-by configuration with flat porous electrodes is mathematically modeled, simulated in the COMSOL multiphysics® program and the simulation is validated with experimental results. The system is characterized through some dependent variables of the model. The depletion of lithium in brine is found in lithium chloride concentration profiles in electrolyte, when the thickness of the flat electrodes increases, it is noted the predominant effect of transport by convection in the electrolyte channel and mass transport by diffusion and migration within porous electrodes. The effect of high applied current densities on the extraction capacity of the system is studied, obtaining

an overpotential due to ohmic drop, which could generate an unwanted resistance in the electrodes.

Palabras clave: litio, recuperación, electroquímico, reactor.

Introducción

El incremento global de la demanda de litio para el almacenamiento de energía en movilidad eléctrica, electrónica portable y energía renovable intermitente, aceleró la investigación de nuevos métodos sustentables de extracción de litio de salmuera natural [1].

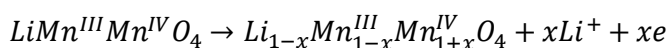
El método tradicional aplicado en salares de altura trabaja con evaporación lenta de la salmuera, en este trabajo se presenta un novedoso método de extracción electroquímica, caracterizado por ser rápido, eficiente, y de bajo impacto ambiental, que puede acoplarse o reemplazar al método tradicional.

El sistema de extracción [2] consiste principalmente de un reactor electroquímico que trabaja como una batería de flujo y utiliza electrodos de intercalación altamente selectivos al litio, cuyo material activo es un Óxido de Manganeso y Litio tipo espinela: $LiMn_2O_4$ (LMO). El reactor consta de dos electrodos porosos planos, cada uno en contacto con un electrolito distinto, uno con salmuera natural y otro con solución de recuperación LiCl 0,1 M, los electrolitos se recirculan en cada compartimento, que están separados por una membrana de intercambio aniónico que permite el paso de iones cloruros.

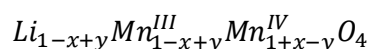
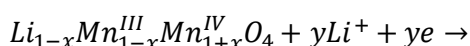
Desarrollo

El sistema de extracción de la Fig. 1 $Li_{1-x}Mn_2O_4 / LiMn_2O_4$, cuenta con el LMO como material activo en distintos estados de carga tanto para el cátodo como el ánodo, y una membrana de intercambio iónico. El reactor trabaja en dos etapas a corriente constante y temperatura ambiente. El procedimiento que se efectúa experimentalmente es el siguiente: en la (1ª) etapa ocurre litiación y delitiación simultáneamente, en el cátodo los iones Litio son intercalados en la estructura cristalina del $Li_{1-x}Mn_2O_4$ y en el ánodo los iones Litio son desintercalados del $LiMn_2O_4$. Los electrolitos que recirculan son, salmuera en el cátodo y solución de recuperación en el ánodo. Al finalizar esta etapa el estado de carga del cátodo y el ánodo está invertido, el cátodo se encuentra cargado de iones litio y el ánodo descargado. En la siguiente etapa (2ª) se realiza el enjuague de los electrodos con agua Milli-Q®, siendo de particular importancia el que estuvo en contacto con salmuera, y finalmente se invierten los electrolitos para que sea posible repetir las etapas 1 y 2 hasta concentrar la solución de recuperación y agotar la salmuera.

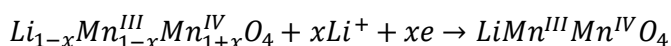
Las reacciones electroquímicas que ocurren son las siguientes. En el electrodo negativo, ánodo:



En el electrodo positivo, cátodo, con ($0 \leq x \leq 1$, y , $y \leq x$):



Si $x = y$, se logra la intercalación completa del litio, y se obtiene la ecuación:



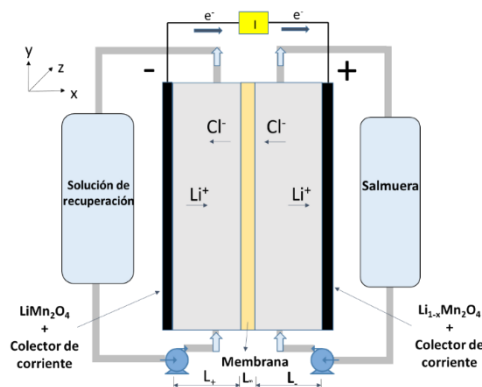


Figura 1: Representación esquemática del reactor de flujo electroquímico para extracción de LiCl

Metodología experimental

Los electrodos se prepararon con tinta de LMO, compuesto por el material activo 80% p/p LMO, material conductor 10% p/p Carbon vulcan, aglomerante 10% p/p PVDF y como solvente N-Metil Pirrolidona. La tinta se depositó sobre una malla cuadrada de titanio de 96 cm² de área geométrica y 1 mm de espesor, consiguiendo así tener dos electrodos planos. La membrana de intercambio aniónico utilizada tiene como grupo funcional Amonio cuaternario. La salmuera natural fue del salar del Hombre Muerto ubicado en Salta/Catamarca. El electrolito de recuperación fue KCl o LiCl 0,1 M. El proceso de delitaci3n para obtener el electrodo de $Li_{1-x}Mn_2O_4$ con bajo contenido de iones litio, se realizó químicamente con soluci3n diluida de Persulfato de Amonio (PA) 0,2 M. Respetando una relaci3n de moles de PA a moles de LMO de 2:1.

Modelo matemático

En el modelo matemático desarrollado para este sistema las variables dependientes que se resuelven para el tiempo y el espacio en el plano xy, son:

Concentraci3n de Li^+ en el electrolito.

Concentraci3n de $Na^+, K^+, Mg^{2+}, B_2O_7^{2-}$

y Cl^- en el electrolito.

Concentraci3n de Li^+ en la superficie de las partículas de LMO.

Potencial eléctrico en el electrodo.

Potencial en el electrolito.

El modelo fue desarrollado previamente, para el sistema de extracci3n con electrodos porosos tridimensionales [2] y considera el balance de materia en el electrolito (fase líquida) para cada especie i3nica i , involucrada en el proceso de obtenci3n de LiCl, que se obtiene de resolver la ecuaci3n de Nernst-Planck para la difusi3n, migraci3n y convecci3n, en combinaci3n con el balance de carga tanto en la fase s3lida como líquida, que considera la condici3n de electroneutralidad local y la relaci3n de Nernst-Einstein para la movilidad

iónica. Las i especies consideradas en este modelo son: $i = Li^+, Na^+, K^+, Mg^{2+}, B_2O_7^{2-}$ y Cl^- . Además, la intercalación de iones Litio en la reacción de electrodo del LMO, es descrito por la ecuación Butler-Volmer para la transferencia iónica del litio en la interfaz electrodo-electrolito. El balance de materia en los electrodos de intercalación (fase sólida) se realiza para una única especie química, el Litio. La difusión del ion Litio dentro de las partículas LMO con estructura cúbica espinela se describe como un proceso de difusión de Fick en partículas esféricas. Finalmente para el modelo matemático se considera que la membrana de intercambio aniónica es permselectiva a iones cloruros y no se considera el efecto que pudiera tener la interacción de los demás iones con la membrana. Las ecuaciones del modelo y los detalles de la implementación se pueden ver en [2].

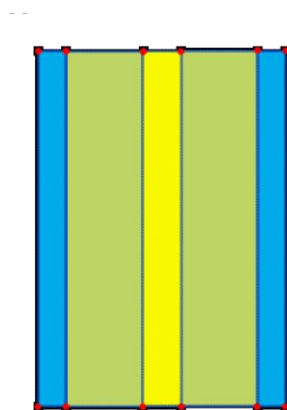


Figura 2: Geometría del reactor electroquímico simulado en dos dimensiones, electrodos en azul, membrana en amarillo y canales de electrolito en verde

Validación del modelo

La geometría del reactor simulado está en la Fig. 2, cuenta con electrodos porosos planos de $100 \mu\text{m}$ de espesor, canales de electrolito de $4,9 \text{ mm}$ de espesor y una altura de 10 mm . La validación de la simulación se realiza a través de la comparación de la evolución de la diferencia de potencial total del reactor registrada experimentalmente y a través de la simulación, y se muestra en la Fig. 3. La coincidencia entre la simulación y el experimento en general es buena, difieren en la pendiente de la caída óhmica inicial que vale alrededor de $0,18 \text{ V}$ y corresponde a una resistencia sin compensar de 9Ω en todo el reactor. Por otro lado, la curva simulada refleja en mayor detalle la forma ondeada del plateau característico del proceso de intercalación de Li^+ en los sitios tetraédricos de la estructura espinela del LMO, mientras que la curva experimental muestra un plateau más lineal. Las condiciones bajo las cuales se llevó a cabo el experimento son: $i = 0,21 \text{ mA.cm}^{-2}$, $I = 20 \text{ mA}$, $m_{Li_{1-x}Mn_2O_4} = 0,70 \text{ g}$, $u_y = 8 \times 10^{-4} \text{ m.s}^{-1}$ el electrolito de recuperación fué KCl $0,1 \text{ M}$ y la salmuera del salar del Hombre Muerto. Algunas condiciones implementadas exclusivamente en la simulación: fracción de volumen de LMO $\varepsilon_{LiMn_2O_4} = \varepsilon_{Li_{1-x}Mn_2O_4} = 0,21$, Resistencia de film $R_{film} = 6 \Omega.m^2$, la curva simulada fue tomada en el punto 1 de la Fig.2.

Caracterización del sistema de extracción

El reactor electroquímico a caracterizar a través de algunas de las variables dependientes del modelo simulado, cuenta con electrodos porosos planos de $100 \mu\text{m}$ de espesor y canales de electrolito de 1 mm de espesor. El electrolito simulado en el cátodo de $Li_{1-x}Mn_2O_4$ con

$x = 0,45$, fue salmuera del salar del hombre muerto y en el ánodo de $LiMn_2O_4$, solución de recuperación de LiCl 0,1 M.

Las condiciones de operación simuladas fueron: densidad de corriente aplicada

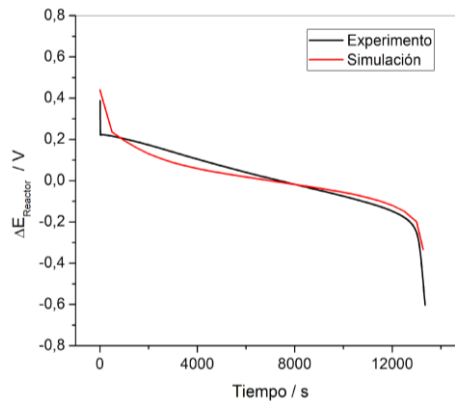


Figura 3: Comparación entre experimento y simulación de la curva de potencial del reactor versus tiempo.

$0,21 \text{ mA.cm}^{-2}$, correspondiente a una corriente total de 20 mA , fracción de volumen $\varepsilon_{LiMn_2O_4} = \varepsilon_{Li_{1-x}Mn_2O_4} = 0,21$, caudal volumétrico de electrolito $\dot{u} = 55 \text{ ml.min}^{-1}$, velocidad de flujo de electrolito $u_y = 8 \times 10^{-4} \text{ m.s}^{-1}$ y resistencia de film de $R_{film} = 6 \Omega.m^2$.

La evolución de la concentración de ión litio en el electrolito con el tiempo se muestra en la Fig. 4, se consideraron 250 ml de salmuera y 250 ml de LiCl 0,1M. La concentración en la salmuera cae linealmente de 191,6 a 183 mol.m^{-3} y en la solución de LiCl 0,1 M aumenta linealmente de 100 a 108,4 mol.m^{-3} , dados los procesos de intercalación y desintercalación, respectivamente.

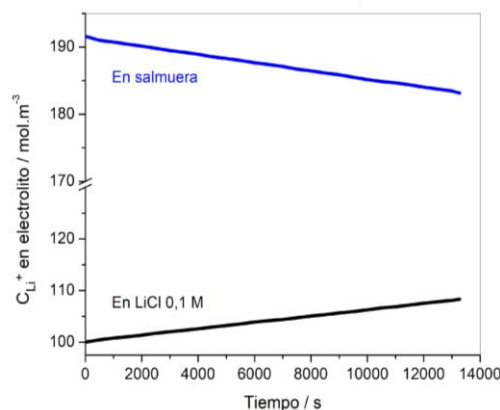


Figura 4: Perfiles simulados de concentración de ión litio versus tiempo, en salmuera (curva azul tomada en el pto 3 de la Fig. 2) y en LiCl 0,1 M (curva negra tomada en el pto 9 de la Fig. 2)

Al graficar la concentración de ión litio en la superficie de la partícula de LMO como función del tiempo, se obtiene la Fig. 5, la curva azul corresponde a $Li_{1-x}Mn_2O_4$ en contacto con salmuera desde donde los iones litio intercalan y la curva negra corresponde a $LiMn_2O_4$ en contacto con el electrolito de recuperación LiCl 0,1M hacia donde los iones litio desintercalan. En ambos casos la concentración se mueve entre los valores máximos y mínimos pre establecidos: 11250 a 25000 mol.m^{-3} , debido a que la cantidad de LMO disponible en

los electrodos es la limitante para la masa de litio obtenida por el sistema de extracción, a diferencia de la cantidad de litio en la salmuera que no limita al proceso, y que bajo estas condiciones supera la capacidad de extracción del electrodo dada por la cantidad del LMO.

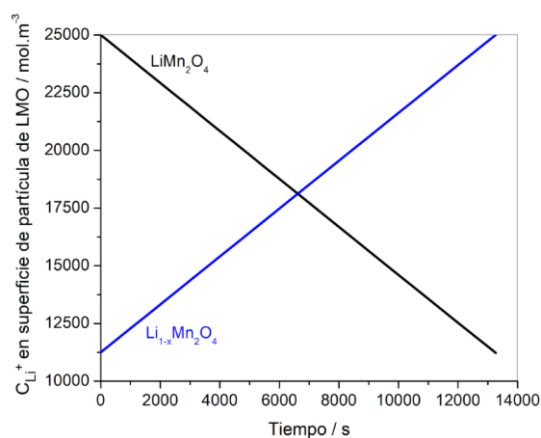


Figura 5: Perfiles simulados de concentración de ión litio en la superficie de las partículas de LMO versus tiempo, $\text{Li}_{1-x}\text{Mn}_2\text{O}_4$ (curva azul, tomada en el pto 3 de la Fig. 2) y LiMn_2O_4 (curva negra, tomada en el pto 9 de la Fig. 2).

Efecto de la densidad de corriente aplicada

El estudio de la densidad de corriente se realizó para el sistema caracterizado, bajo las mismas condiciones operativas a excepción de la velocidad de flujo de electrolito, que para este caso es $u_y = 8 \times 10^{-3} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$.

Las curvas de potencial del reactor simuladas, en función de la capacidad de carga, a distintas densidades de corriente aplicadas, se muestra en la Fig. 6. Al considerar una misma masa de litio en los tres casos y aplicar distintas corrientes, se alcanza la misma capacidad de carga, aunque al aplicar mayores corrientes los procesos de extracción y recuperación toman menos tiempo. Por otro lado, aplicar corrientes más altas implica una mayor caída óhmica inicial y un mayor sobrepotencial que se mantiene en el tiempo, lo que contribuye al aumento de la resistencia en el electrodo.

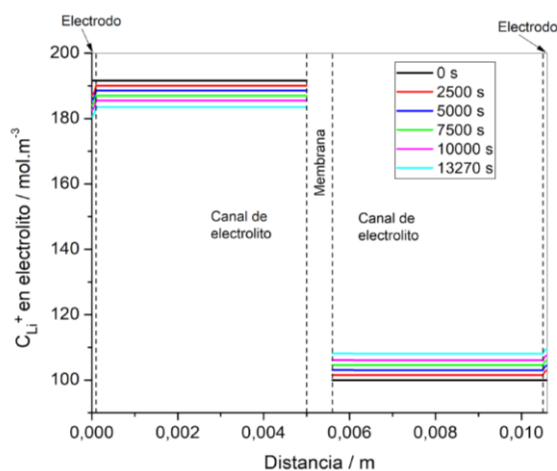


Figura 6: Curvas simuladas de potencial del reactor en función de la capacidad de carga, a 1 mA ó $0,01 \text{ mA} \cdot \text{cm}^{-2}$ (negro), a 20 mA ó $0,21 \text{ mA} \cdot \text{cm}^{-2}$ (azul) y 100 mA ó $1,04 \text{ mA} \cdot \text{cm}^{-2}$ (rojo).

Espesor de electrodos planos

Cuando se considera el caso en el que los electrodos porosos planos tiene un ancho mayor (4 mm) al del caso caracterizado (100 μm), y se grafica la concentración de ión litio en función de la distancia en x para distintos tiempos, se obtiene la Fig. 7, dentro del electrodo poroso no existe convección y por ello se observan gradientes pronunciados de concentración debido a la difusión y migración. Por otro lado, en los canales de electrolito la concentración es completamente homogénea en la dirección x para todos los tiempos, como consecuencia del predominio del transporte por convección en la dirección y. Para este espesor de electrodo, la cantidad de material

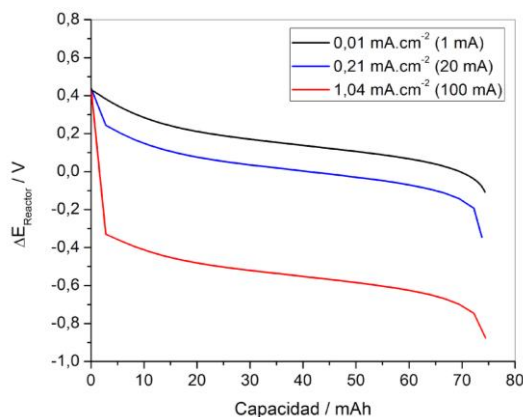


Figura 7: Curvas simuladas de concentración de litio en electrolito versus distancia en x, tomada a $y=0,005$ m, a distintos tiempos. Condiciones: 20 mA, 8×10^{-3} m.s⁻¹, $R_{\text{film}} = 6 \Omega \cdot \text{m}^2$, $\varepsilon_{\text{LiMn}_2\text{O}_4} = \varepsilon_{\text{Li}_{1-x}\text{Mn}_2\text{O}_4} = 0,21$. Espesor de electrodo 4 mm, espesor de canal 1 mm.

activo no es un limitante, pero si lo es la cantidad de litio en el volumen de salmuera considerado, por ello la concentración de litio en salmuera llega a cero al tiempo final de electrólisis.

En el caso de mantener el espesor del electrodo en 100 μm y ensanchar el canal de electrolito a 4,9 mm de espesor, se obtiene la Fig. 8 donde se muestran perfiles de concentración de litio en electrolito homogéneos en x, donde el limitante para el proceso es la cantidad de material activo, dado que la concentración de ión litio en el electrolito no llega a cero pero la simulación termina debido al agotamiento y llenado de Li^+ en el sólido.

Conclusiones

El reactor electroquímico de flujo con electrodos porosos planos a escala laboratorio se probó experimentalmente para la extracción de LiCl de salmuera natural. Las predicciones del modelo se validaron con el experimento, con las curvas de $\Delta E_{\text{Reactor}}$ en función del tiempo, durante la carga, operando a corriente constante.

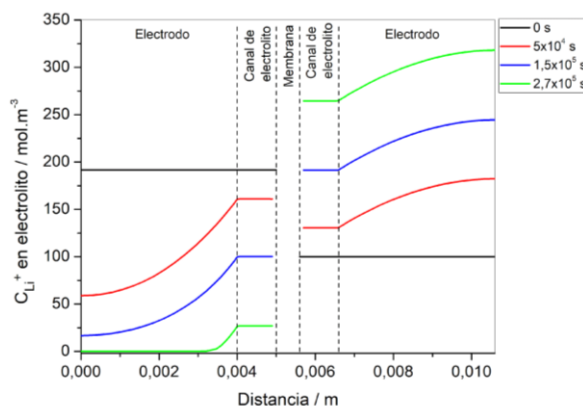


Figura 8: Curvas simuladas de concentración de litio en electrolito versus distancia en x , tomada a $y=0,005$ m, a distintos tiempos. Condiciones: 20 mA, 8×10^{-3} m.s $^{-1}$, $R_{\text{film}} = 6 \Omega \cdot \text{m}^2$, $\varepsilon_{\text{LiMn}_2\text{O}_4} = \varepsilon_{\text{Li}_{1-x}\text{Mn}_2\text{O}_4} = 0,21$. Espesor de electrodo $100 \mu\text{m}$, espesor de canal $4,9$ mm.

Para el reactor simulado y sus condiciones de operación, a altas corrientes del orden de 100 mA, se encuentra un sobrepotencial que no hace factible su aplicación. Es recomendable mantener los experimentos a 20 mA.

Si bien es deseable incorporar mayor cantidad de material activo al sistema [3], al aumentar el espesor de los electrodos, el efecto no es únicamente la mejora en la cantidad extraída sino que también aparecen gradientes de concentración muy marcados en los electrodos, debido a la difusión y migración, que no favorecen al uso uniforme del material activo.

El modelo desarrollado y sus correspondientes simulaciones hacen posible el estudio más profundo del sistema para encontrar el camino de mejora, de la capacidad de extracción del mismo.

Referencias

Artículos en publicaciones periódicas:

- [1] Joo, H.; Lee, J.; Yoon, J. (2020). Short Review: Timeline of the electrochemical lithium recovery system using the spinel LiMn_2O_4 as a positive electrode. *Energies*, 13, 6235.
- [2] Romero, V.C.E.; Putrino, D.S.; Tagliacruzchi, M.; Flexer, V.; Calvo, E.J. (2020). Electrochemical Flow Reactor for Selective Extraction of Lithium. *Journal of The Electrochemical Society*, 167(12), 1945-7111.
- [3] Romero, V.C.E.; Llano, K.; Calvo, E.J. (2021). Electrochemical extraction of Lithium by ion insertion from natural brine using a flow-by reactor: Possibilities and limitations. *Electrochemistry Communications*, 125, 106980.

31

Efecto del tamaño de partícula en baterías de $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ (LTO)- LiMn_2O_4 (LMO): un estudio de simulación numérica

Rozenblit, Abigail^{a,b}; Torres, Walter Ramón^c; Tesio, Álvaro Yamil^c; Calvo, Ernesto Julio^b

^a Departamento Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería, UBA.

^b Instituto de Química de los Materiales, Ambiente y Energía (INQUIMAE) UBA-CONICET.

^c Centro de Investigación y Desarrollo de Materiales Avanzados y Almacenamiento de Energía de Jujuy

arozenblit@fi.uba.ar

Resumen

Las plantas de energía solar y eólica son actualmente la tecnología más madura para la explotación de recursos naturales renovables. Dada su naturaleza intermitente, se requieren sistemas de almacenamiento de energía de alta eficiencia. Las baterías son dispositivos electroquímicos idóneos para este fin. En particular, las baterías de litio ion son la tecnología en mayor auge, y son de vital importancia para la Argentina, dada la disponibilidad de litio en La Puna. En este trabajo estudiamos las baterías de litio ion con electrodos de titanato de litio (LTO) y manganato de litio (LMO); un sistema de alta duración y ciclabilidad, permitiendo el acoplamiento a paneles solares o turbinas eólicas en ubicaciones remotas, sin necesidad de mantenimiento frecuente.

Nos enfocamos en el estudio del efecto del tamaño de partícula del LMO, haciendo un estudio teórico basado en la teoría del electrodo poroso, usando la herramienta de simulación numérica COMSOL 5.4.

Adaptamos un modelo de múltiples materiales para representar un material mezcla de distintos tamaños de partícula, simulando un material con una distribución bimodal de partículas. Los resultados de las simulaciones muestran que cuanto mayor es la proporción de partículas pequeñas (a masa de electrodo y densidad de corriente constantes) pueden aplicarse corrientes más elevadas, por la mayor área específica expuesta. Sin embargo, también se acrecientan los sobrepotenciales, indicando que existe un compromiso entre el trabajo eléctrico y la velocidad de carga/descarga. Este trabajo denota la importancia del estudio de la microestructura del electrodo en el diseño de baterías de litio ion.

Abstract

Wind and solar energy plants are of the most mature technologies for natural renewable resources exploitation. Given their intermittent nature, highly efficient storage systems are of vital importance. Batteries are electrochemical devices that are suitable for said purpose. In particular, lithium-ion batteries have been under ongoing research for decades and are crucial to Argentina, given the vast amounts of lithium that can be found in La Puna region. In this work we study lithium-ion batteries with lithium titanate (LTO) and lithium manganate (LMO) electrodes. This is known to be a highly durable and cyclable system, allowing for said batteries to be attached to solar panels or wind turbines in remote locations, without the need for frequent maintenance inspections.

We focus on the effect of LMO particle size, with a theoretical study based on Newman's Porous Electrode Theory. In COMSOL 5.4, we adapt a material-blend model to represent the different particle size blend within the same material. Our results show that higher small particle proportions (keeping electrode mass and current density constant) allow for higher currents, due to the higher exposed surface area. However, overpotentials also grow with smaller particle ratio, indicating the existence of a compromise between the electrical work output and the charge/discharge rate. This work highlights the importance of understanding electrode microstructure for lithium-ion battery design.

Palabras clave: Litio, baterías, simulación, tamaño de partícula.

Introducción

La mayoría de las baterías recargables tienen electrodos de materiales de inserción, debido a que las reacciones de inserción de iones son altamente reversibles. Dos características deseables en un material para batería son capacidad específica y una buena ciclabilidad. En particular, las baterías de ion litio con ánodos de $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ (LTO) y un cátodos de LiMn_2O_4 (LMO) han atraído mucho la atención de la comunidad científica por la alta estabilidad de ambos materiales frente a la (des)intercalación del litio [1]. Además, la estructura de espinela del LTO permite el transporte de iones litio en 3 dimensiones, mejorando la movilidad del ion en la red, y, por lo tanto, mejorando la reversibilidad del proceso [2].

El LMO ha demostrado ser una alternativa muy competitiva al LiCoO_2 como material de cátodo por su bajo costo, su seguridad, la alta temperatura a la que se descompone y su baja toxicidad [1]. Sin embargo, es un material que pierde mucha capacidad al dismutar el Mn III dando Mn IV y Mn II, que es soluble [3], junto con la subsiguiente pasivación de las superficies de ánodo y cátodo [4], en particular cuando se utiliza contra un ánodo de grafito. La reducción de electrolito ocurre principalmente a voltajes menores a los 0.8 V vs Li/Li+. Esto significa que la intercalación de Li podría solaparse con la descomposición del electrolito. Se sabe que dicha descomposición viene acompañada de la intercalación parcialmente reversible de los iones Li solvatados, lo que se asocia con una expansión pronunciada de la matriz gráfica, exfoliándola y deteriorando su capacidad de almacenamiento de carga [5]. Todas estas limitaciones han obstaculizado la implementación de baterías de LMO/C a la fecha.

El surgimiento de los ánodos de LTO para baterías de ion i [6], permitió reconsiderar al LMO como posible material de cátodo, porque se encontró que presentaba una vida útil más larga que cuando se usaba en baterías con grafito [7]. A diferencia del grafito, los parámetros de red del LTO permanecen sin alteraciones durante la intercalación de iones Li, lo que significa que el material no soporta tensiones estructurales durante la operación normal de la batería (son materiales que se conocen como "zero-strain" por esta razón) [8]. Esta

característica se traduce en una excelente retención de capacidad, y, por lo tanto en una larga vida de ciclado [9]. A diferencia del LTO, el grafito experimenta un cambio de volumen de un 10% durante el ciclado, ocasionando la rajadura de la SEI, lo que a su vez da lugar a mayor descomposición del electrolito [10]. Esto constituye un mecanismo de degradación a largo plazo en baterías con ánodos de grafito, y es completamente evitado con ánodos de LTO.

La microestructura del electrodo puede influir en el desempeño electroquímico de la celda, permitiendo la acumulación o consumo de iones Li [11]. En particular, se ha demostrado que aumentar el área de contacto entre el electrodo y el electrolito resulta en un mejor desempeño, indicando que altas relaciones de área a volumen son deseables dentro de la estructura del electrodo [12]. Una manera sencilla de modificar el ratio área/volumen es ajustar el tamaño de partícula (en adelante, TdP) Incluso, el TdP puede tener un efecto en la difusión de Li y en el transporte de electrones, afectando la velocidad de carga/descarga [13].

La simulación y el modelado son herramientas esenciales que ayudan a entender mecanismos fundamentales y propiedades estructurales y han sido ampliamente usadas en el mundo de las baterías. J. Newman ha sido el pionero en el modelado y simulación de baterías. Sus modelos incorporan aspectos de la microestructura del material para homogeneizar la distribución espacial de material activo mediante el uso de propiedades promediadas en volumen simulaciones de baterías [14,15]. Muchos otros autores han desarrollado modelos para mejorar el modelo de Newman, pero teniendo en cuenta un único TdP dentro de la estructura del electrodo [16]. Sin embargo, sería más realista considerar una multiplicidad de TdP coexistiendo dentro del mismo material. Ha habido algunos avances en contemplar esta característica en modelos matemáticos. Darling y Newman [17] modelaron una media celda de LMO con dos TdP diferentes dentro del electrodo poroso. Los autores comparan minuciosamente los fenómenos de ciclado galvanostático en celdas con distintos pares de TdP, y comparando con el caso de un solo TdP. Encontraron que el ciclado de las celdas con tamaño uniforme era superior al de las celdas con una distribución de TdP, para todos los casos considerados.

Albertus [18] adaptó el modelo de Newman para simular electrodos hechos de una mezcla de NCA-LMO.

En este trabajo simulamos celdas de LTO-LMO en COMSOL con uno y dos TdP posibles en el electrodo positivo, adaptando el modelo de Albertus para considerar una mezcla de TdP dentro del mismo material. En lo que a nosotros respecta, no estamos en conocimiento de que COMSOL permita incorporar distribuciones de TdP en el módulo de Baterías de Li-Ion, así que el enfoque que damos en este trabajo permitiría usar la herramienta de COMSOL para modelar un material con distintos TdP.

Desarrollo

Hemos implementado el modelo de pseudo 2 dimensiones (P2D) [14] para la operación isotérmica y galvanostática de celdas de LTO-LMO. Se han hecho modificaciones para poder considerar la no uniformidad de TdP en el electrodo positivo. Se han simulado las hemiceldas de LTO vs. Li y LMO vs Li así como también la celda completa de LTO LMO. Los resultados de las simulaciones se utilizaron para validar el modelo frente a datos experimentales publicados por otros autores. Al ser un modelo de P2D, se pueden capturar los fenómenos que ocurren tanto en la escala de la partícula como en la escala del electrodo. La celda típica tiene 3 regiones bien diferenciadas: el electrodo negativo de longitud L_{neg} , el separador de longitud L_{sep} y el electrodo de LMO de longitud L_{pos} .

En la escala de la partícula, las reacciones de (des)intercalación se describen a través de la difusión en estado sólido dentro de las partículas, acoplado a reacciones superficiales de transferencia de carga. En la escala del electrodo, se describe el transporte usando la teoría del electrodo poroso desarrollada por Newman et al. [19]. Las partículas de electrodo se consideran de geometría esférica con un radio r_p . El balance de masa y sus correspondientes condiciones de borde están dados en las ecuaciones 1 a 3.

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

$$\frac{\partial c_s}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0 \quad (2)$$

$$\frac{\partial c_s}{\partial r} \Big|_{r=r_p} = - \frac{j_n}{FD_s} \quad (3)$$

La densidad de corriente que atraviesa la interfase entre el LMO y el electrolito está dada por la velocidad de la reacción interfacial de inserción en la superficie del material, con una cinética dada por Butler-Volmer (ecuación 4)

$$j_n = i_0 \left(e^{\frac{\alpha_a F}{RT} \eta} - e^{-\frac{\alpha_c F}{RT} \eta} \right) \quad (4)$$

Donde η es el sobrepotencial, definido por la ecuación 5.

$$\eta = \phi_s - \phi_l - E_{eq} \quad (5)$$

E i_0 es la corriente de intercambio, definida en la ecuación 6.

$$i_0 = F k_c^{\alpha_a} k_a^{\alpha_c} (c_{s,max} - c_s)^{\alpha_a} c_s^{\alpha_c} \left(\frac{c_l}{c_{l,ref}} \right)^{\alpha_a} \quad (6)$$

El electrolito, que está hecho por una sal de litio en un solvente orgánico, llena los poros del electrodo y está presente en la región del separador. El transporte de carga en el electrodo se describe a través de la ley de Ohm y el transporte de carga y masa en el electrolito se describe con la teoría de la solución concentrada.

Se asume que vale la electroneutralidad en todo el dominio. La Tabla 1 resume las ecuaciones que gobiernan con sus correspondientes condiciones de borde.

Tabla 1: Ecuaciones del modelo para la escala del electrodo y condiciones de contorno.

Ecuaciones fase sólida
$i_s = -\sigma_s \nabla \phi_s$ $\nabla \cdot (i_s + i_l) = 0$ $a = 3\epsilon_s / r_p$
Ecuaciones electrolito
$\nabla \cdot i_l = F a j_n$ $i_l = -\sigma_l^{\text{eff}} \nabla \phi_l + \frac{2\sigma_l^{\text{eff}} RT}{F} \left(1 + \frac{\partial \ln f}{\partial \ln c_l} \right) (1 - t_+^0) \nabla \ln c_l$ $\sigma_l^{\text{eff}} = \sigma_l \epsilon_{\text{sep}}^{\beta_{\text{sep}}} \text{ región separador}$

$\sigma_1^{\text{eff}} = \sigma_1 \epsilon_s^{\beta_{\text{pos}}}$ región electrodo $\epsilon_1 \frac{\partial c_1}{\partial t} = \nabla \cdot (\epsilon_1 D_1 \nabla c_1) - \frac{i_l \cdot \nabla t_+^0}{F} + \frac{a j_n (1 - t_+^0)}{v_+}$ $\epsilon_1 = 1, j_n = 0$ región separador
Condiciones de borde para el sólido
$i_s = 0$ en $x = L_{\text{neg}} + L_{\text{sep}}$ $i_s = I$ en $x = L_{\text{neg}} + L_{\text{sep}} + L_{\text{pos}}$ $\phi_s = 0$ en $x = 0$
Condiciones de borde para el electrolito
$i_l = I$ en $x = L_{\text{neg}} + L_{\text{sep}}$ $i_l _{L_{\text{neg}}+L_{\text{sep}}} = i_l _{L_{\text{neg}}+L_{\text{sep}}+dx}$ $i_l = 0$ at $x = L_{\text{neg}} + L_{\text{sep}} + L_{\text{pos}}$ $\partial c_1 / \partial x _{L_{\text{neg}}} = \partial c_1 / \partial x _{L_{\text{neg}}+dx}$ $\partial c_1 / \partial x _{L_{\text{neg}}+L_{\text{sep}}} = \partial c_1 / \partial x _{L_{\text{neg}}+L_{\text{sep}}+dx}$ $\partial c_1 / \partial x _{L_{\text{neg}}+L_{\text{sep}}+L_{\text{pos}}} = 0$

En este estudio se realizaron dos sets de simulaciones: uno con un único TdP en el LMO del cátodo, representando un material con monodispersión de TdP, y otro set con dos TdP coexistiendo en el cátodo, representando una distribución binaria de TdP. La Tabla 2 muestra los parámetros utilizados. Para el segundo caso, las partículas de menor tamaño se denominarán “lmo”, mientras que las partículas más grandes se denominarán “LMO”. Se mantiene constante la masa de material activo en ambos tipos de estudio. El área específica, en cambio, se modifica con los distintos TdP (a diferencia del trabajo de Darling), para estudiar el efecto que tiene en las descargas galvanostáticas.

Tabla 2: Parámetros usados en COMSOL PARA SIMULACIONES con único TdP

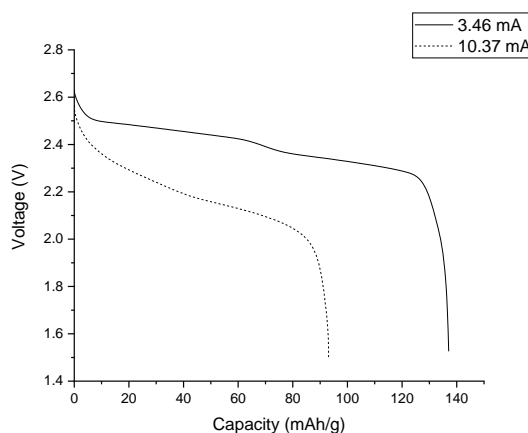
A_c	1.6 cm ² [20]	k_{pos}	5e-10m/s[18]
β_{pos}	2.98[18]	L_{neg}	50e-6 m
β_{sep}	3.15[18]	L_{pos}	100e-6 m
c_1^0	1200 mol/m ³	L_{sep}	50e-6 m
D_l	3.77e-10 m ² /s ^(b)	r_{pneg}	250e-9 m
D_s^{neg}	6.8e-15 m ² /s ^(b)	r_{ppos}	1e-10 m
D_s^{pos}	1e-14 m ² /s ^(b)	ρ_p	4140kg/m ³ ^(b)

$\epsilon_{l,neg}$	0.444 ⁽¹⁾	SOC _{cello}	0.98
$\epsilon_{l,pos}$	0.4[18]	σ_l	0.927S/m ^(b)
ϵ_{sep}	0.37	σ_s^{neg}	100 S/m ^(b)
$\epsilon_{s,pos}$	0.45 ^(a)	σ_s^{pos}	3.8S/m ^(b)
k_{neg}	$3.11 e - 8m/s$ [21]	T	298 K
$\epsilon_{s,pos,lmo}$	$\epsilon_{s,pos}fr_{pos,lmo}$	$\epsilon_{s,pos,LMO}$	$\epsilon_{s,pos}(1 - fr_{pos,lmo})$

Se simuló una celda de LTO-LMO con una capacidad de 12.44 C, con 24.6 mg de LMO en el electrodo positivo y 27.1 mg de LTO en el negativo en todos los casos. La solución electrolítica es LiPF₆ 1.2 M en una mezcla de carbonato de etilo y carbonato de etilo-metilo (EC:EMC 3:7 wt.%). Primero, se probó una celda con partículas de 100 nm en el LMO, descargándola a dos velocidades diferentes (ver Fig. 1). Estos resultados están en línea con el hecho de que la capacidad de la celda disminuye a mayores corrientes aplicadas, por la irreversibilidad de los procesos asociados [22].

Se sabe que partículas más chicas ofrecen una menor resistencia a la circulación de corriente, dado el más corto camino de difusión para el Li y la mayor área superficial expuesta por unidad de volumen en la reacción de intercalación, lo que hace que se puedan lograr menores densidades de corriente local [23]. Especialmente, a corrientes altas, la celda alcanza su potencial de cut-off mucho antes de que se utilicen las partículas más grandes, lo que significa que las partículas más chicas juegan un rol más importante [24].

En base a esto, se estudió el efecto de distintos tamaños de partícula en la performance de una batería de LTO-LMO para un único TdP y para dos TdP, representando materiales con distribuciones de TdP mono y bimodales, respectivamente. Para la misma masa de material activo, las partículas más pequeñas (llamadas "lmo") llevan corrientes más bajas que las partículas grandes ("LMO"). Esto significa que se pueden aplicar corrientes más altas a electrodos hechos de partículas más pequeñas, manteniendo constante la densidad de corriente.



^a Parámetro ajustado con balance de electrodos.

^b De la base de datos de COMSOL.

Figura 1: Simulación de una descarga de batería de LTO-LMO a diferentes corrientes.

Para aplicar la misma densidad de corriente a distintos TdP, la corriente aplicada se multiplicó por el cociente de las áreas electroactivas correspondientes, según la ecuación 7.

$$i_{lmo} = i_{LMO} \frac{A_e^{lmo}}{A_e^{LMO}} \quad (7)$$

Siendo i_{lmo} la corriente aplicada en simulación con partículas chicas (100 nm), i_{LMO} la corriente aplicada en simulaciones con partículas grandes (1000 nm), A_e^{lmo} y A_e^{LMO} son las áreas electroactivas de del LMO de partículas chicas y del LMO de partículas grandes, respectivamente. EL área electroactiva se expresa en la ecuación 8 en términos de la masa, m , que es constante en todas las simulaciones.

$$A_e = \frac{3m}{\epsilon_s \rho_p} \frac{1}{r_p} \quad (8)$$

Donde ρ_p es la densidad del LMO, ϵ_s es la fracción volumétrica de sólido en el electrodo, y r_p es el radio de la partícula. El detalle de las Corrientes aplicadas en cada caso se encuentra en la Tabla 3. La corriente aplicada para las partículas pequeñas corresponde a una velocidad de descarga de C/5, y las curvas de descarga se muestran en la Fig. 2.

Tabla 3 Corrientes aplicadas en sistemas con partículas grandes y chicas

Masa LMO [mg]	24.6
Capacidad de la celda [C]	12.44
i_{LMO} [mA]	0.6913
i_{lmo} [mA]	6.913
Densidad de corriente promedio $\left[\frac{\text{mA}}{\text{m}^2}\right]$	17.565

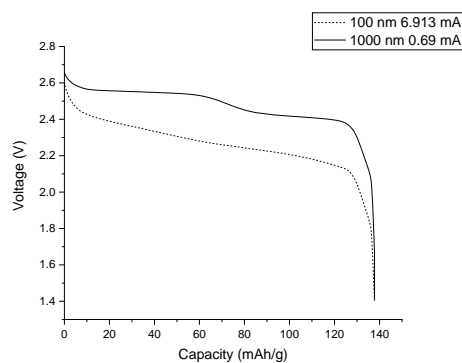


Figura 2: Simulación de una descarga de batería de LTO-LMO con distintos tamaños de partícula.

La Fig. 2 muestra que se pueden aplicar corrientes 10 veces más grandes a las celdas que tienen el electrodo con partículas más chicas, sin perder capacidad. No obstante, existe una penalidad en términos de sobrepotencial, de unos 150 mV de magnitud para la curva correspondiente a la mayor corriente.

Hacer electrodos con partículas de tamaño uniforme puede no ser posible desde el punto de vista de la síntesis. Un análisis SEM muestra que el LMO está formado por partículas con diferentes TdP: partículas de 100 y 1000 nm.

En este trabajo hemos considerado una distribución de TdP binaria, con partículas de 100 y 1000 nm coexistiendo en el cátodo. Hicimos una serie de simulaciones a diferentes proporciones de partículas chicas y grandes, llamando fr a la fracción másica de partículas pequeñas. Dada la mayor área específica por unidad de masa de las partículas chicas, mayores corrientes se pueden aplicar a cátodos con mayores proporciones de partículas chicas. Evaluamos el efecto de la eficiencia coulombica para los diferentes fr . El área electroactiva es la suma pesada de las áreas electroactivas de partículas chicas y grandes, como indica la ecuación 9.

$$A_e = (1 - fr)A_e^{LMO} + frA_e^{lmo} \quad (9)$$

Usando la ecuación 11 para cada una de las áreas electroactivas en la ecuación 12 obtenemos una expresión para el área electroactiva del material mezcla dependiente de la masa total del electrodo, la densidad del material y la fracción de partículas chicas, como se detalla en la ecuación 10.

$$A_e = \frac{3m}{\epsilon_s \rho_p} \left(\frac{1-fr}{r_{pLMO}} + \frac{fr}{r_{plmo}} \right) \quad (10)$$

Ahora, las simulaciones se llevaron a cabo con la misma masa de LMO, pero con dos posibilidades de TdP (una fracción es de 100 nm y otra de 1000 nm). Seguimos el trabajo de Albertus et al. [18], creando una aplicación de COMSOL para este fin. En nuestras simulaciones hemos considerado valores de fr desde 0.05 a 0.95, y corrientes mayores fueron aplicadas en los casos con mayor proporción de partículas chicas.

Para el caso $fr = 0.05$ se aplicó una corriente de 1.73 mA, manteniendo constante la densidad de corriente en un valor de 66.9 mA/m². La densidad de corriente fue calculada considerando las Corrientes totales aplicadas (dadas en la Tabla 4) y el área electroactiva en cada mezcla (ecuación 13).

Usando las ecuaciones 9 y 10 calculamos la corriente que se necesita aplicar en cada caso para lograr que se mantenga constante la densidad de corriente (ver ecuación 11).

$$\frac{i_{fr}}{i_{fr=0.05}} = \frac{\left(\frac{1-fr}{r_{pLMO}} + \frac{fr}{r_{plmo}} \right)}{\left(\frac{0.95}{r_{pLMO}} + \frac{0.05}{r_{plmo}} \right)} \quad (11)$$

Compilamos la corriente aplicada para cada valor de fr y la correspondiente área electroactiva en la Tabla 4.

Tabla 4 Corrientes aplicadas y áreas electroactivas para cada valor de fracción fr .

fr	Área electroactiva (m ²)	$i_{aplicada} = i_{fr}$ (mA)
0.05	0.057068	1.0024

0.25	0.12791	2.2468
0.5	0.21647	3.8022
0.75	0.30502	5.3577

La Fig. 3 muestra las curvas de descarga para distintas mezclas lmo/LMO, indicado por el cociente $\frac{fr}{(1-fr)}$ en la leyenda de la figura (los valores de los extremos $fr = 0$ y $fr = 1$ corresponden a los casos de partículas con tamaño uniforme de 1000 nm y 100 nm, respectivamente). Debe notarse que para todas las fracciones fr se observa la misma capacidad de celda, sin importar que la corriente total aplicada es más grande para los casos con mayor fr (a masa de electrodo y densidad de corriente constantes). Es aparente que corrientes más altas pueden aplicarse cuando la proporción de partículas chicas es más alta, porque la mayor área superficial por unidad de volumen compensa por las corrientes más elevadas. Como se observó previamente en casos con un único TdP, las corrientes más altas resultan en mayores sobrepotenciales y un menor voltaje de celda, en concordancia con estudios de cátodos de LMO con polidispersión de TdP, que mostraron que las regiones del material pobladas con partículas chicas presentan mayor acumulación de litio que las regiones con partículas grandes [25].

En la Fig. 4 se muestra la velocidad de corriente aplicada (en términos de “C-rate”) para una descarga de celda, y el trabajo eléctrico como una función del TdP. Mayores velocidades de descarga se pueden aplicar a electrodos con partículas más chicas, en detrimento del trabajo eléctrico que la celda pueda suministrar.

Sin embargo, pareciera existir un balance: tiene sentido tener partículas más chicas para elevar la máxima corriente que se puede aplicar, pero las partículas no deberían ser tan pequeñas que puedan disminuir el trabajo eléctrico generado por la celda. Electrodo con el 100% de sus partículas de tamaño chico harían que la celda suministre muy poco trabajo eléctrico. Una mejor performance puede obtenerse con partículas de 500 nm, y el trabajo eléctrico alcanza una meseta al valor obtenido para partículas de 1000 nm. Esto significa que las mezclas de partículas de tamaños entre 500 y 1000 nm probablemente tengan un buen equilibrio entre máxima corriente de descarga y trabajo eléctrico obtenido.

Los resultados de las simulaciones confirman que reducir el número de partículas grandes permite aumentar la corriente aplicada, enfatizando el hecho de que la microestructura del electrodo juega un rol muy importante en el desempeño de la batería, y que la proporción de partículas grandes debería minimizarse durante la preparación de cátodos de LMO.

Para entender cómo afecta la fracción másica de partículas chicas en la performance del dispositivo en el caso de distribución binaria de tamaños, comparamos los resultados obtenidos a distintas fracciones másicas de estos dos TdP, aplicados a la celda en las mismas condiciones que antes (es decir, con la misma corriente aplicada).

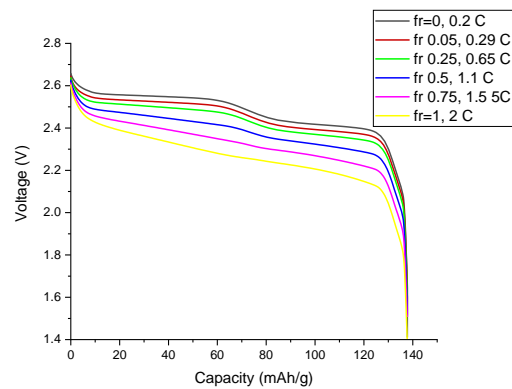


Figura 3: Curvas de descarga simuladas para distintas fracciones de partículas chicas (fr) en el electrodo de LMO.

La Fig. 5 muestra las curvas simuladas para una corriente constante de 6.91 mA, a diferentes fracciones másicas de partículas chicas, en el modelo binario. Nótese que el sobrepotencial a corriente constante muestra un umbral del 5% de partículas chicas. Las curvas para $fr = 0$ y $fr = 0.05$ se superponen con el sobrepotencial más grande, mientras que a $fr = 0.1$ hay un claro descenso del sobrepotencial.

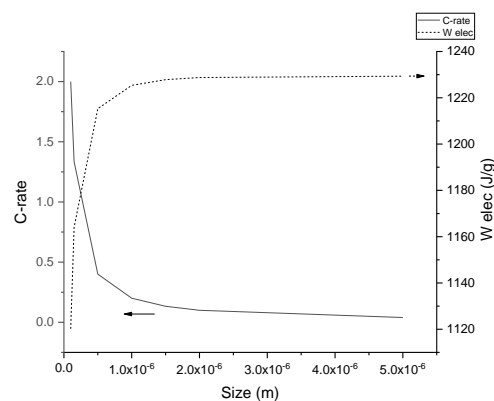


Figura 4: Velocidad de descarga (C-rate, línea llena) y trabajo eléctrico (línea punteada) como funciones del TdP.

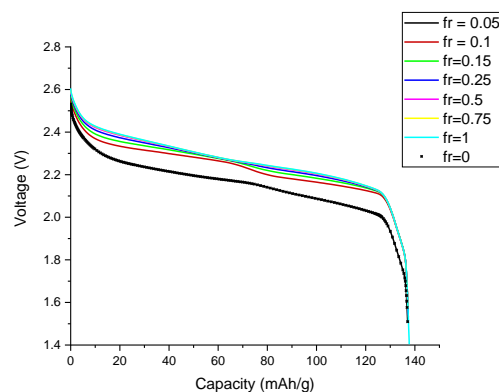


Figura 5: Curvas de descarga simuladas para distintos ratios de lmo/LMO (ver leyendas) a una corriente aplicada constante de 6.91 mA, para un electrodo de LMO de 24.6 mg.

Un pequeño efecto puede observarse a 30% y 70% del total de la capacidad, que puede estar asociado a los sitios tetraédricos llenos por la mitad de iones litio en la estructura cúbica del LMO [26].

Las partículas pequeñas ofrecen un camino de percolación de corriente con menor resistencia ya que la densidad de corriente local (corriente aplicada total dividida por el área electroactiva total de los cristales de LMO) resulta más pequeña en la interfase del LMO con el electrolito.

Conclusiones

En este trabajo se estudió el efecto del TdP en la capacidad, performance y sobrepotencial del electrodo de LMO en baterías de LTO-LMO. Se estudiaron materiales con un único TdP y con una distribución binaria de TdP (100 y 1000 nm), con diferentes corrientes aplicadas.

Introdujimos un enfoque diferente al modelado de distintos TdP dentro de un mismo material, adaptando un modelo multi-material para un electrodo, lo que permite el tratamiento de estos sistemas con COMSOL, software que no ofrece, en lo que concierne a los autores, herramientas de análisis de distribución de TdP dentro del módulo de baterías de ion Li.

La coexistencia de dos poblaciones de tamaños en un material representa más adecuadamente a un material real que un único TdP, ya que un tamaño uniforme es difícil de lograr desde el punto de vista de la síntesis de materiales. Mostramos que a mayores fracciones de partículas chicas se podían aplicar corrientes más altas, con mayores sobrepotenciales. También mostramos que el trabajo eléctrico se incrementa con el TdP en el sistema estudiado, como resultado de los menores sobrepotenciales. Esta tendencia parece aplacarse a los 1000 nm, lo que indicaría que no valdría la pena intentar aumentar el trabajo eléctrico de una celda mediante el incremento del TdP. Además, este trabajo muestra que existe un umbral de valores de fracción de partículas chicas por encima del cual las penalidades en sobrepotencial se ven disminuidas y no sería necesario invertir grandes esfuerzos en tener más de un 10% de partículas chicas dentro de un material para acceder a una buena performance.

Referencias

- [1] Du Pasquier, A.; Huang, C. C.; and Spitler, T.; (2009). Nano $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ - LiMn_2O_4 batteries with high power capability and improved cycle-life. *J. Power Sources* 186, 508–514.
- [2] Zaghbi, K.; Simoneau, M.; Armand, M.; and Gauthier, M.; (1999). Electrochemical study of $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ as negative electrode for Li-ion polymer rechargeable batteries. 300–305.
- [3] Du Pasquier, A.; (1999). Mechanism for Limited 55°C Storage Performance of $\text{Li}_{1.05}\text{Mn}_{1.95}\text{O}_4$ Electrodes. *J. Electrochem. Soc.* 146, 428.
- [4] Kumagai, N.; Komaba, S.; Kataoka, Y.; and Koyanagi, M.; (2000). Electrochemical behavior of graphite electrode for lithium ion batteries in Mn and Co additive electrolytes. *Chem. Lett.* 1154–1155.

- [5] Winter, M.; Besenhard, J. O.; Spahr, M. E.; and Novák, P.; (1998). Insertion Electrode Materials for Rechargeable Lithium Batteries. *Adv. Mater.* 10, 725.
- [6] Kavan, L.; Procházka, J.; Spitler, T. M.; Kalbáč, M.; Zukalová, M.; Drezen, T.; and Grätzel, M.; (2003). Li Insertion into $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ (Spinel). *J. Electrochem. Soc.* 150, A1000.
- [7] Amatucci, G.; Du Pasquier, A.; Blyr, A.; Zheng, T.; and Tarascon, J. M.; (1999). The elevated temperature performance of the $\text{LiMn}_2\text{O}_4/\text{C}$ system: Failure and solutions. *Electrochim. Acta* 45, 255–271.
- [8] Thackeray, M. M.; (1995). Lithiated Oxides for Lithium Ion Batteries. *J. Electrochem. Soc.* 142, 2558–2563.
- [9] Ohzuku, T.; (1995). Zero-Strain Insertion Material of $\text{Li}[\text{Li}_{1/3}\text{Ti}_{5/3}]\text{O}_4$ for Rechargeable Lithium Cells. *J. Electrochem. Soc.* 142, 1431.
- [10] Nordh, T.; (2014). thesis, *Lithium titanate as anode Mater. lithium-ion Batter. - A Surf. study*
- [11] Smith, M.; García, R. E.; and Horn, Q. C.; (2009). The Effect of Microstructure on the Galvanostatic Discharge of Graphite Anode Electrodes in LiCoO_2 -Based Rocking-Chair Rechargeable Batteries The Effect of Microstructure on the Galvanostatic Discharge of Graphite Anode Electrodes in LiCoO_2 -Based Rockin. *J. Electrochem. Soc.* 156, A896–A904.
- [12] Arico, A. S.; Bruce, P.; Scrosati, B.; Tarascon, J.-M.; and Van Schalkwijk, W.; (2005). Nanostructured materials for advanced energy conversion and storage devices. *Nat. Mater.* 4, 366.
- [13] Sinha, N. N. and Munichandraiah, N.; (2009). The effect of particle size on performance of cathode materials of Li-ion batteries. *J. Indian Inst. Sci.* 89, 381–392.
- [14] Fuller, T. F.; Doyle, M.; and Newman, J.; (1994). Simulation and Optimization of the Dual Lithium Ion Insertion Cell. *J. Electrochem. Soc.* 141, 1–10.
- [15] Doyle, M.; Newman, J.; Gozdz, A. S.; Schmutz, C. N.; and Tarascon, J.; (1996). Comparison of Modeling Predictions with Experimental Data from Plastic Lithium Ion Cells. *J. Electrochem. Soc.* 143, 1890–1903.
- [16] De, S.; Northrop, P. W. C.; Ramadesigan, V.; and Subramanian, V. R.; (2013). Model-based simultaneous optimization of multiple design parameters for lithium-ion batteries for maximization of energy density. *J. Power Sources* 227, 161–170.
- [17] Darling, R. and Newman, J.; (1997). Modeling a Porous Intercalation Electrode with Two Characteristic Particle Sizes. *J. Electrochem. Soc.* 144, 4201–4208.
- [18] Albertus, P.; Christensen, J.; and Newman, J.; (2009). Experiments on and Modeling of Positive Electrodes with Multiple Active Materials for Lithium-Ion Batteries. *J. Electrochem. Soc.* 156, A606.
- [19] Newman, J. and Thomas-Alyea, K.; (2004). *Electrochemical Systems*, 3rd ed., (2004)
- [20] Belharouak, I.; Sun, Y.-K.; Lu, W.; and Amine, K.; (2007). On the Safety of the $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}/\text{LiMn}_2\text{O}_4$ Lithium-Ion Battery System. *J. Electrochem. Soc.* 154, A1083.
- [21] Abraham, D. P.; Kawauchi, S.; and Dees, D. W.; (2008). Modeling the impedance versus voltage characteristics of $\text{LiNi}_{0.8}\text{Co}_{0.15}\text{Al}_{0.05}\text{O}_2$. *Electrochim. Acta* 53, 2121–2129.
- [22] Fuller, T. F.; Doyle, M.; and Newman, J.; (1994). Relaxation Phenomena in Lithium-Ion-Insertion Cells. *J. Electrochem. Soc.* 141, 982–990.
- [23] Li, Y.; El Gabaly, F.; Ferguson, T. R.; Bazant, M. Z.; and Chueh, W. C.; (2014). Current-induced

transition from particle-by-particle to concurrent intercalation in phase-separating battery electrodes. *Nat. Mater.* 13, 1149–1156.

- [24] Srinivasan, V. and Newman, J.; (2004). Discharge Model for the Lithium Iron-Phosphate Electrode. *J. Electrochem. Soc.* 151, A1517.
- [25] Chung, D.; Shearing, P. R.; Brandon, N. P.; Harris, S. J.; and Garc, R. E.; (2014). Particle Size Polydispersity in Li-Ion Batteries. *J. Electrochem. Soc.* 161, 422–430.
- [26] Marchini, F.; Williams, F. J.; and Calvo, E. J.; (2018). Electrochemical impedance spectroscopy study of the $\text{Li}_x\text{Mn}_2\text{O}_4$ interface with natural brine. *J. Electroanal. Chem.* 819, 428–434.

Desarrollo de aleaciones nanoestructuradas a base de aluminio para cojinetes planos

M. Lucchetta ^a, F. Saporiti ^a, F. Audebert ^{a,b}

^a Grupo de materiales avanzados, INTECIN (UBA-CONICET), Facultad de Ingeniería UBA

^b Department of Materials, University of Oxford, 16 Parks Road, Oxford, OX1 3PH, United Kingdom.

E-mail de contacto: mlucchetta@fi.uba.ar

Resumen

El uso de sistemas para ahorrar energía utilizados en los autobuses de última generación, tales como el conocido stop/start, aumentan la carga de fricción alternativa sobre los cojinetes. La lubricación entre el eje y el cojinete es normalmente del tipo hidrodinámica, cuando la capa de lubricante se reduce, la superficie del cojinete debe resistir los efectos de fricción principalmente en el arranque y la parada del motor. Por lo tanto, las aleaciones utilizadas deben resistir las cargas transferidas entre el eje y la bancada, tener buena resistencia a la fatiga, resistencia a la corrosión en el medio lubricante de trabajo, bajo coeficiente de fricción, alta resistencia al desgaste y buena conductividad térmica, entre otras propiedades. Actualmente, aleaciones de base Al-Sn están siendo utilizadas en cojinetes planos en diversas aplicaciones de ingeniería y en particular en motores de combustión interna. En este trabajo se busca desarrollar una aleación a base Al-Sn por solidificación rápida, con el fin de mejorar las propiedades mecánicas, tribológicas y aumentar la vida útil de los cojinetes planos en los sistemas stop/start. Se estudiaron muestras producidas con diferentes velocidades de enfriamiento belt casting, twin rolling y por solidificación rápida mediante la técnica Melt-Spinning. Se observó que el refinamiento de la microestructura produce un aumento de la dureza y mejora el mojado del lubricante en la superficie. En el caso del empleo de la técnica Melt Spinning se pueden obtener los espesores deseados de la aleación, reduciendo los pasos de laminación para reducir el espesor del material, según la producción actual y por lo tanto los costos.

Abstract

The use of energy saving systems used in the latest generation buses, such as the well-known stop / start, increases the alternative friction load on the bearings. The lubrication between the shaft and the bearing is normally hydrodynamic, when the oil layer is reduced,

the bearing surface must resist the friction effects, mainly in the start and stop of the engine most of the wear occurs during the start-ups and stops. Therefore, the alloys used must be resistant to the loads transferred between the shaft and the bench, have good fatigue resistance, corrosion resistance in the working lubrication medium, low friction coefficient, high wear resistance and good thermal conductivity, among other properties. Al–Sn based alloys are widely used as plain bearings in several engineering applications, particularly in internal combustion engines. The aim of this work is to develop an Al-Sn based alloy by rapid solidification in order to improve the mechanical and tribological properties and increase the service life of plain bearings in stop/start systems. Samples produced with different cooling speeds, belt casting, twin rolling and rapid solidification by Melt-Spinning technique were studied. It was observed that the refinement of the microstructure produces an increase in hardness and improves the wetting of the lubricant on the surface. With the Melt Spinning technique, the desired alloy thicknesses can be obtained, decreasing the rolling steps to reduce the thickness of the material, according to current production and therefore costs.

Palabras clave: Cojinetes – Aluminio – Nano estructuras – Solidificación Rápida

Introducción

Las demandas actuales de la industria automotriz se centran en mejorar la eficiencia de los motores y reducir el consumo de energía. Estos objetivos conducen al diseño de motores de combustión interna con ciclos térmicos de mayor presión y al uso de sistemas híbridos, con la tecnología “stop/start”[1], que producen un aumento en la carga de fricción alternativa en los rodamientos.

Por lo general, los materiales utilizados en los cojinetes planos deben poseer una combinación de propiedades: alta resistencia, alta dureza, resistencia a la fatiga, bajo coeficiente de fricción, y buena conformabilidad plástica, etc. Actualmente el material antifricción de los cojinetes planos está compuesto por una microestructura refinada con tamaño de grano pequeño, normalmente heterogénea conteniendo fases blandas y duras distribuidas en una matriz metálica. Las fases blandas proporcionan un bajo coeficiente de fricción, mientras que las fases duras soportan la carga contra el material del rodamiento. El comportamiento tribológico de estos materiales está determinado por la distribución, cantidad, tamaños, forma y propiedades de las partículas, así como por las propiedades mecánicas y físicas de la matriz. En este trabajo se busca desarrollar una aleación a base Al-Sn-Cu por solidificación rápida, para mejorar las propiedades con el fin de aumentar la vida útil de los cojinetes planos para los sistemas stop/start.

Las técnicas de solidificación rápida (SR) producen refinamiento de la microestructura y permiten obtener soluciones sólidas sobresaturadas con un alto grado de solutos, favoreciendo el endurecimiento mediante los mecanismos de Hall-Petch y Orowan [2].

Para aumentar la resistencia al desgaste mediante el refuerzo de partículas se estudiaron nuevas composiciones incorporando Ti y Zr que además de refinar la microestructura, inducen la precipitación de diferentes partículas en la matriz de aluminio del tipo Al₃Ti y Al₃Zr [3] con el fin de mejorar la resistencia, bajar el coeficiente de fricción y mejorar la resistencia al desgaste.

Actualmente, las aleaciones antifricción de los rodamientos se fabrican en forma de láminas gruesa mediante técnicas convencionales de colada continua y posteriormente se reduce el espesor mediante sucesivas laminaciones. Finalmente, la aleación del rodamiento se une por co-laminación al respaldo de acero y se utiliza una capa intermedia de Al puro, que tiene

una doble función de actuar como barrera de difusión y mejorar las condiciones de unión entre el soporte de acero y la aleación del rodamiento en la cara interna del mismo.

En este trabajo se produjeron mediante diferentes técnicas y por Melt Spinning (MS) a baja velocidad las siguientes aleaciones Al₂₀Sn₁Cu, Al₂₀Sn₁Cu₁Ti Al₁₀Sn₄Si₁Cu y Al₁₀Sn₄Si₁Cu₁Zr (% en peso) para obtener láminas con mejores propiedades mecánicas y superficiales para ser utilizados como materiales antifricción en cojinetes planos. Se busca alcanzar el espesor de la lámina mediante la técnica "Melt Spinning" para reducir el número de pasos de producción y, en consecuencia, el costo del mismos.

Se caracterizó la microestructura y se estudiaron las propiedades mecánicas y de superficie de las muestras y las muestras co-laminadas. Además, se estudió el efecto de la adición de Ti y Zr en la microestructura y las propiedades mecánicas y de superficie.

Método experimental

Se prepararon aleaciones madres con las siguientes composiciones nominales Al₂₀Sn₁Cu, Al₂₀Sn₁Cu₁Ti, Al₁₀Sn₄Si₁Cu y Al₁₀Sn₄Si₁Cu₁Zr (% en peso), mediante fusión por inducción de los elementos constitutivos, Al, Sn, Si, Cu, Zr (pureza del 99,99%) bajo atmósfera de argón. Todas las aleaciones se fundieron al menos 200 ° C por encima de su punto de fusión para lograr una buena homogeneidad química. Se produjeron muestras a partir de la aleación Al₂₀Sn₁Cu (% en peso) mediante diferentes técnicas: "Belt Casting" (BC), rodillo doble (TR) y "Melt spinning" (MS), las muestras SR se produjeron bajo atmosfera de He a dos velocidades tangenciales del rodillo 1,5 ms⁻¹ y a 0,75 ms⁻¹. Para las aleaciones que contienen Ti, Zr y Si solo se produjeron cintas por MS a una velocidad tangencial de la rueda de 0,75 ms⁻¹. En la tabla 1 se muestran los códigos utilizados, la composición química nominal (% en peso) y las velocidades tangenciales de la rueda utilizados en la técnica MS. El lado de las cintas que está en contacto con la superficie de la rueda y la que está en contacto con la atmosfera se denominaran WS y GS respectivamente. A fin de obtener un prototipo del cojinete con el espesor nominal actual, se utilizaron las cintas producidas a 0.75 m/s soldándolas por laminación con la cara GS en contacto con una placa de aluminio puro. Antes de la laminación tanto las cintas y la placa de aluminio se calentaron a 200 °C durante una hora, se realizó una sola pasada de laminación con una reducción de espesor del 40%,

La microestructura se caracterizó por microscopio electrónico de barrido con un equipo JEOL JSM6510LV equipado con un detector de energía dispersa de rayos X (EDX) Oxford Instrument. El tamaño de los granos de la matriz de Al se midió a partir de las micrografías SEM obtenidas de las muestras pulidas y atacadas con una solución NaOH al 10 % en peso.

Las mediciones de dureza se realizaron con un indentador de diamante Vickers en un microindentador Zwick Z3.2A con una carga de 300 g y 10 s de tiempo de permanencia. La dureza se midió en el espesor de las muestras BC y TR, mientras que en las cintas obtenidas por MS se realizaron en las superficies WS y GS, estas últimas fueron montadas en un sustrato de vidrio para poder realizar las mediciones. Para analizar la mojabilidad de las diferentes muestras se midió el ángulo de contacto (AC) con un equipo Krüss DSA 100, utilizando una gota sésil de agua destilada de 1 ml. Las mediciones del CA se llevaron a cabo en muestras pulidas mecánicamente con pasta de diamante de 1 μm para las muestras obtenidas por MS se midió el CA en ambos lados de las muestras.

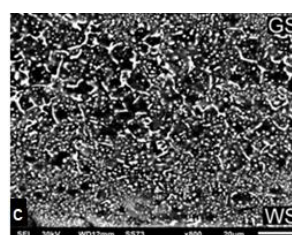
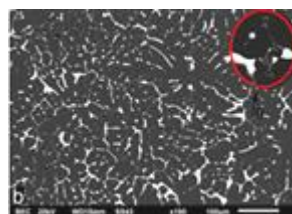
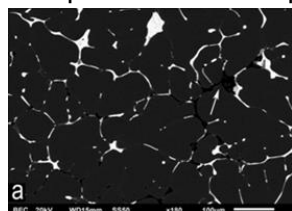
Las pruebas de desgaste se realizaron utilizando un tribómetro de alta temperatura CSM con una bola de acero 100Cr6 de 6 mm, 1 N de carga, 300 rpm para una longitud total de desgaste de 100 m a temperatura ambiente en las muestras laminadas.

Tabla 1: Código de la muestra, composición química nominal, técnica y velocidad tangencial de la rueda utilizada para producir las cintas.

Código muestra	Composición nominal (% en peso)	Técnica y velocidad (ms^{-1})
201-BC	Al20Sn1Cu	Belt casting
201-TR	Al20Sn1Cu	Twin Roller
201-SR0.75	Al20Sn1Cu	MS 0.75
201-SR1.5	Al20Sn-1Cu	MS 1.5
2011-SR0.75	Al20Sn1Cu1Ti	MS 0.75
1041-SR0.75	Al10Sn4Si1Cu	MS 0.75
10411-SR0.75	Al10Sn4Si1Cu1 Zr	MS 0.75

Resultados

La Figura 1(a) y (b) se observa la microestructura de las muestras 201-BC (a), y 201-TR (b), en ambos casos la microestructura está formada por una matriz de α -Al del tipo celular-dendrítica (contraste oscuro) con segregación interdendrítica de la fase β -Sn (contraste brillante), las imágenes fueron obtenidas por electrones retrodispersados (BEC). El tamaño de grano de la fase α -Al en las muestras 201-BC, 201-TR fue $(80 \pm 12) \mu\text{m}$ y $(37 \pm 1) \mu\text{m}$ respectivamente. La ampliación en la figura 1.b muestra pequeños precipitados con contraste gris oscuro en el espacio interdendrítico de la fase α -Al, se confirmó por análisis realizados por EDX que estos precipitados corresponderían a la fase θ -Al₂Cu. En la Figura 1(c) se observa un corte transversal de la muestra 201-SR1,5, la microestructura está compuesta también por una matriz α -Al (contraste oscuro) y una distribución de finas



partículas de β -Sn (contraste brillante). La microestructura depende de la distancia a la superficie de la cinta que está en contacto con la rueda, cuando la velocidad de enfriamiento es baja se observa segregación de Sn en las zonas interdendríticas de la matriz. Se puede observar que se produce un refinamiento de la microestructura desde la cara GS hacia el lado WS, esto se debe al aumento de la velocidad de enfriamiento en las zonas cercanas al lado WS.

Figura. 1. Imágenes de electrones retrodispersados de (a): Al₂₀Sn₁Cu-BC, (b): Al₂₀Sn₁Cu-TR (el recuadro muestra un precipitado de θ -Al₂Cu), (c) Al₂₀Sn₁Cu-SR1.5)

En la figura 2 se observa la dureza medida en la cara rueda/cinta en función de $d^{-1/2}$ donde d es el tamaño de grano de la matriz α -Al y la curva de correlación lineal del tipo Hall-Petch obtenida por cuadrados mínimos [4, 5]. Se logró un buen ajuste de la recta para los puntos de la aleación Al₂₀Sn₁Cu producidas por las diferentes técnicas. La dureza de la muestra 201-SR1.5 presentó una dureza un 86% superior respecto de la muestra 201-BC, esto se debe a la reducción del tamaño de grano de α -Al obtenido por la técnica MS respecto del método de tradicional BC.

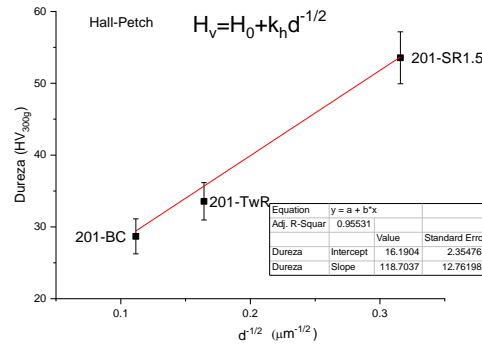


Fig. 2 Dureza Vickers vs tamaño de grano α -Al

En la figura 3 se observan los resultados de las mediciones del ángulo de contacto (CA) para las diferentes muestras Al20Sn1Cu en función del tamaño de grano de α -Al, para las muestras solidificadas rápidamente se midió el CA a ambos lados de las cintas WS y GS. Para evitar posibles efectos relacionados con las pequeñas diferencias entre el tamaño de gota en cada medición, se normalizó el diámetro de la gota en la superficie con el tamaño de grano de fase α -Al de cada muestra. Se puede observar que existe una tendencia a disminuir el ángulo de contacto a medida que disminuye el tamaño de grano de α -Al. Además, podemos notar que en CA en la superficie WS de la muestra 201-SR1.5 mostró un valor más alto respecto del medido en la superficie GS. Esto podría deberse a pequeñas diferencias en la microestructura de las superficies. El CA medido en Sn 99,9% y Al 99,9% fueron $64^\circ \pm 2^\circ$ y $83^\circ \pm 2^\circ$ respectivamente. El CA parecería depender de la morfología, tamaño orientación cristalográfica y distribución de la fase, para una rugosidad constante de las aleaciones estudiadas, además parecería que no hay un efecto químico importante sobre el CA porque todas las aleaciones tienen una composición química muy similar y todas están compuesta por una fase mayoritaria α -Al y una fase minoritaria β -Sn.

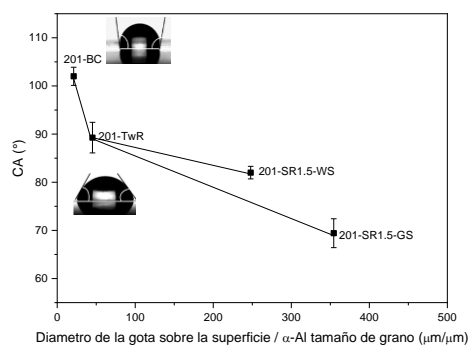


Figura 3. Ángulo de contacto en función del diámetro de la gota en la superficie / tamaño de grano de α -Al.

En la Fig. 4 se muestran las micrográficas correspondientes a cortes transversales de las cuatro muestras (a) 201-SR 0.75, (b) 1041-SR 0.75, (c) 2011-SR0.75 y (d) 10411-SR 0.75 as-cast obtenidas por BEC. La microestructura en todas las muestras se compone por una matriz rica en α -Al (contraste oscuro) y la fase β -Sn (contraste brillante). El tamaño y distribución de las fases presentes varía en función de la distancia a la superficie de la cinta en contacto con la rueda. El tamaño de las fases presentes en las zonas cercanas a la cara WS es menor respecto de las zonas GS.

La Fig.4 (a) muestra una segregación de Sn en las zonas interdendríticas de la matriz y también se observan partículas de Sn aproximadamente circulares de diferentes tamaños

para la muestra 201-SR0.75. El diámetro promedio de las partículas de Sn varía entre $0.6 \mu\text{m} \pm 0.01 \mu\text{m}$ cerca del lado WS a $2.58 \pm 0.06 \mu\text{m}$ en el lado GS (valores obtenidos a partir de 513 mediciones). El tamaño de grano medio de fase $\alpha\text{-Al}$ es de $(14 \pm 0,25) \mu\text{m}$ medido en la sección transversal cerca de la superficie WS.

En la muestra 1041-SR0.75 (Fig.4 (b)) se observa segregación interdendrítica de las fases $\alpha\text{-Si}$ y $\beta\text{-Sn}$, y partículas circulares de $\beta\text{-Sn}$ con diámetros que varían entre $(0,53 \pm 0,028) \mu\text{m}$ y $(1,91 \pm 0,028) \mu\text{m}$ (381 mediciones) y el tamaño medio de grano de la fase $\alpha\text{-Al}$ es de $(12,5 \pm 0,1) \mu\text{m}$ en la sección transversal.

La microestructura de la muestra 2011-SR0.75 (Fig.4 (c)) presenta una segregación interdendrítica de la fase $\beta\text{-Sn}$ y también en los bordes de grano (BG) se observan partículas facetadas de $\gamma\text{-Al}_3\text{Ti}$ gris claro (ver imagen ampliada) de forma irregular cuyo segmento más largo varía entre $(0.37 \pm 0,06) \mu\text{m}$ y $(1.2 \pm 0,08) \mu\text{m}$. El tamaño medio de grano de $\alpha\text{-Al}$ es de $(2 \pm 0,1) \mu\text{m}$ en la sección transversal.

En la fig. 4 (d) muestra la microestructura de la muestra 10411-SR0.75 similar a la muestra 2011 pero en este caso las partículas en los BG de la matriz corresponden a la fase $\lambda\text{-Al}_3\text{Zr}$ que son de forma y tamaño irregular el segmento más largo varía entre $0,1 \pm 0,05$ y $1,34 \pm 0,08 \mu\text{m}$, Fan y colaboradores presentó un resultado similar en la respecto a la morfología en que precipitan las partículas de Al_3Zr [7]. El tamaño de grano de $\alpha\text{-Al}$ es de $(3 \pm 0,1) \mu\text{m}$ en la sección transversal.

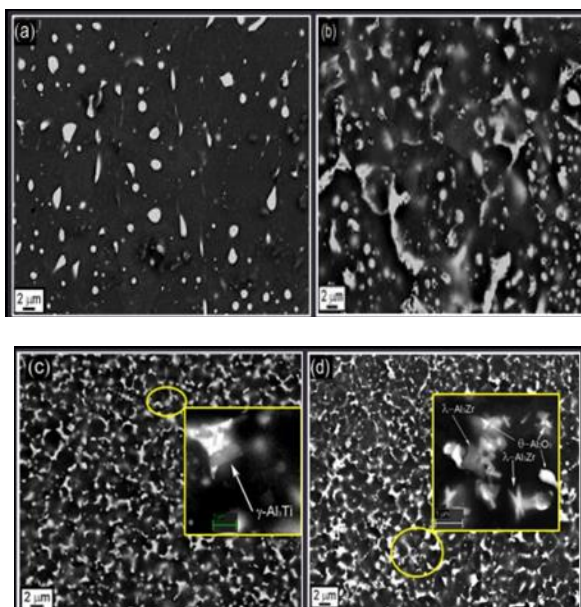


Figura 4. Micrografías SEM de las cintas en condición “as-spun” cerca de la CR: (a) $\text{Al}_{20}\text{Sn}_1\text{Cu}$, (b) $\text{Al}_{10}\text{Sn}_4\text{Si}_1\text{Cu}$, (c) $\text{Al}_{20}\text{Sn}_1\text{Cu}_1\text{Ti}$ y (d) $\text{Al}_{10}\text{Sn}_4\text{Si}_1\text{CuZr}$ obtenida con electrones BEC

En la figura 5 se observan las micrografías SEM de las secciones transversal de todas las muestras obtenidas por co-laminación. La microestructura de estas muestras es similar a las muestras no laminadas. Sin embargo, en la dirección de la laminación (según indica la flecha en la imagen) se observaron granos de $\alpha\text{-Al}$ y del Sn segregado ligeramente deformados. La mayor parte de las partículas de Sn, Si y Al_3Ti se transforman en finos precipitados esféricos en la muestra laminada $\text{Al}_{10}\text{Sn}_4\text{Si}_1\text{Cu}$ y $\text{Al}_{20}\text{Sn}_1\text{Cu}_1\text{Ti}$.

En las muestras laminadas de composiciones $\text{Al}_{20}\text{Sn}_1\text{Cu}$ y $\text{Al}_{10}\text{Sn}_4\text{Si}_1\text{Cu}_1\text{Zr}$, se observa que una gran fracción de granos de Al y del Sn segregado están altamente deformados en la dirección de laminación.

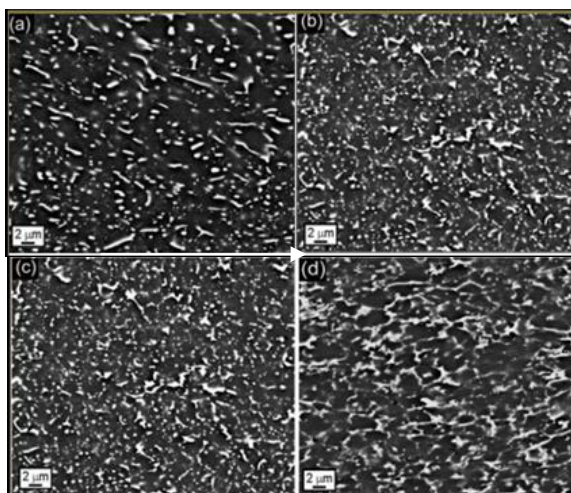


Figura 5. Micrografías SEM de un corte transversal de las cintas unidas por co-laminación (a) Al₂₀Sn₁Cu, (b) Al₁₀Sn₄Si₁Cu, (c) Al₂₀Sn₁Cu₁Ti y (d) Al₁₀Sn₄Si₁Cu₁Zr

En la Tabla 2 se observan: el espesor de las muestras, el tamaño de grano de α -Al, dureza Vickers y el tamaño de partículas de las cuatro muestras producida SR a 0.75 m/s y las muestras laminadas, todas las mediciones se realizaron en la superficie WS. Se observa que a medida que disminuye el tamaño de grano de α -Al de las muestras, aumenta la dureza. Después de la laminación, todas las muestras tienen un mayor número de partículas y una reducción en el tamaño de las mismas. Comparativamente, la dureza de las muestras laminadas presenta una dureza más alta que las sin laminar y esto es consistente con lo que se observa en la microestructura.

Tabla 2: Espesor de la muestra, tamaño de grano de α -Al, dureza Vickers y tamaño de partículas (Sn - Al₃Ti - Al₃Zr) en WS en las cintas y muestras unidas.

Aleación	Espesor de las cintas (μm)	Tamaño de grano α -Al (μm) en WS	Dureza (HV _{0.3}) en WS	Tamaño de Partícula - μm (total de Mediciones con WS)
Al ₂₀ Sn ₁ Cu	380±30	12.3±0.1	48±5	0.6 (513)
Al ₂₀ Sn ₁ Cu ₁ Ti	470±30	2.2±0.04	64±5	0.53 (67)
Al ₁₀ Sn ₄ Si ₁ Cu	600±35	9±0.05	71±5	0.56 (381)
Al ₁₀ Sn ₄ Si ₁ Cu ₁ Zr	570±20	2.5±0.02	99±6	0.5 (298)
Al ₂₀ Sn ₁ Cu laminada	150±20	10.13±5	58±5	0.4 (723)
Al ₂₀ Sn ₁ Cu ₁ Ti laminada	165±10	4.3±2	123±9	0.28 (1594)
Al ₁₀ Sn ₄ Si ₁ Cu laminada	77±15	2.42±1	88±7	0.32 (1065)
Al ₁₀ Sn ₄ Si ₁ Cu ₁ Zr laminada	150±20	2±1	103±4	0.24 (631)

La Fig. 6 muestra las curvas exponenciales utilizadas para el ajuste de los datos experimentales de los coeficientes de fricción en función del tiempo de deslizamiento (s) para todas las muestras co-laminadas a temperatura ambiente. Se observa que en las muestras 201-SR0.75, 1041-SR0.75 y 10411-SR0.75 laminadas presentan un periodo transitorio de 100 s seguido de un estado estacionario, mientras que para la muestra con Ti este período es de 300s. El coeficiente de fricción se mantiene constante con pequeñas fluctuaciones en el estado estacionario, estas variaciones que se producen en el coeficiente de fricción en el estado estacionario podrían ser el resultado de la formación de residuos y productos debido al desgaste. El coeficiente de fricción reportado es el valor que toma en el estado estacionario. La aleación que contiene Ti muestra un coeficiente de fricción menor que su análoga sin Ti durante las pruebas de desgaste. La adición de Zr a la aleación Al10Sn4SiCu produjo un leve aumento del coeficiente de fricción.

La muestra 201-SR0.75 laminada presento un coeficiente de fricción mayor al registrado por otros autores para la misma composición [6] con que técnica.

Rosa y col. [8] obtuvieron que el coeficiente de fricción de películas delgadas de composición Al20Sn (% en peso) depositada por pulverización catódica con magnetron es de $0,35 \pm 0,05$ y Liu et al. [9] obtuvo un valor de 0.4 ± 0.05 para una aleación AlXSn con una microestructura formada por una matriz nanocristalino de Al y una fina distribución homogénea de partículas de Sn, el tamaño típico de ambas fases es menores a 100 nm.

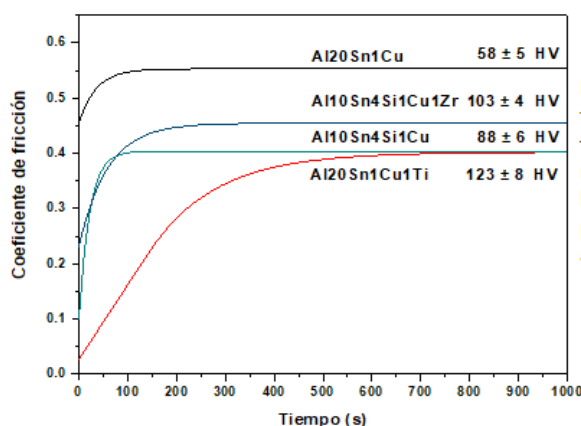


Figura 6: Coeficiente de fricción en función del tiempo deslizamiento (s.) de las muestras después de la co-laminación.

Discusiones

El efecto de refinamiento del Ti sobre los comportamientos de desgaste en la aleación Al-20Sn-1Cu

La adición de 1% en peso de Ti a la aleación Al20Sn1Cu reduce el tamaño de grano en aproximadamente un 18% y se formaron partículas Al₃Ti en los bordes del grano, todos estos cambios microestructurales produjeron un aumento del 33% en la dureza respecto de la muestra sin Ti. Después del co-laminado, se observa un aumento en el número y reducción del tamaño de partículas en la microestructura de la muestra con Ti. Estas variaciones en la microestructura produjeron un aumento de la dureza de casi el 100% y una reducción del coeficiente de fricción respecto de la muestra Al20Sn1Cu laminada.

El efecto de la adición de Zr en la aleación Al-10Sn-4Si-1Cu

La adición de Zr (como Ti) produce un refinamiento en la microestructura, reduciendo el tamaño de grano y favoreciendo la precipitación de partículas de Al₃Zr. En la muestra Al10Sn4Si1Cu1Zr, el tamaño de grano se redujo en un 25% respecto de la muestra análoga sin Zr y se incrementó la dureza. No se observó un cambio significativo en el tamaño de grano en las muestras laminadas respecto de las no laminadas. La laminación en la muestra sin Zr produjo un aumento del número de partículas y una reducción de su tamaño, esto no se observa en la muestra laminada con Zr. Aunque la dureza de la aleación Al10Sn4Si1Cu1Zr es mayor, esto no produjo una reducción del coeficiente de fricción respecto de la muestra sin Zr.

Conclusiones

La dureza de las muestras (BC, TR y SR1.5) sigue una relación Hall-Petch con el tamaño de grano de α -Al. El uso de la técnica de SR a una velocidad de rueda de 1.5 m/s permite aumentar en un 86% la dureza de la aleación Al₂₀Sn₁Cu respecto a la BC (fig. 1 y 2). La mojabilidad de una gota de agua destilada en las muestras Al₂₀Sn₁Cu aumenta a medida que disminuye el tamaño de grano de α -Al (fig. 3).

El agregado de Ti y Zr a la aleación de Al₂₀Sn₁Cu y Al₁₀Sn₄Si₁Cu respectivamente (fig. 4 y 5) redujo en 20% el tamaño de grano del α -Al, y generó una distribución homogénea de partículas de Al₃Ti y Al₃Zr en la matriz de Al, provocando un aumento de la dureza, pero se observa que el coeficiente de fricción disminuye solo para la aleación con adición de Ti (fig. 6).

Referencias

- [1] M. Prucka, Development of an Engine Stop/Start at Idle System, SAE Technical Paper 2005-01-0069 (2005).
- [2] H. Jones, The status of rapid Solidification of Alloys in research and application. Journal of materials Science, 1984. Springer.
- [3] L. F. Mondolfo, Aluminium Alloys: Structure and Properties. Butterworth, London, 1976.
- [4] E.O. Hall, The Deformation and Ageing of Mild Steel: III Discussion of Results Proc. Phys. Soc. B 64 (1951) 747.
- [5] N.J. Petch, The Cleavage Strength of Polycrystals, J. Iron Steel Inst. 174 (1953) 25-28.
- [6] A.B. Gurcan, T.N. Baker, Wear behaviour of AA6061 aluminium alloy and its composites, Wear, Volume 188, Issues 1–2, 1995, Pages 185-191, ISSN 0043-1648. [https://doi.org/10.1016/0043-1648\(95\)06639-X](https://doi.org/10.1016/0043-1648(95)06639-X).
- [7] Fan, Y., Precipitation Strengthening of Aluminum by Transition Metal Aluminides. (2015). Retrieved from <https://digitalcommons.wpi.edu/etd-dissertations/209>
- [8] H. Rosa, G. Cardus, E. Broitman, R. Zimmerman, Structural properties of Al–Sn thin films deposited by magnetron sputtering, Journal of Materials Science Letters 20 (2001) 1365–1367.
- [9] X. Liu, M.Q. Zeng, Y. Ma, M. Zhu, Promoting the high load-carrying capability of Al–20wt%Sn bearing alloys through creating nanocomposite structure by mechanical alloying, Wear, Volumes 294–295, 2012, Pages 387-394, ISSN 0043-1648. <https://doi.org/10.1016/j.wear.2012.07.021>.

33

Simulación termo-mecánica del enderezado en la colada continua: cuantificación del riesgo de falla y comparación con resultados industriales

Poltarak, Guillermo^a; Ferro, Sergio^a

^a *TenarisSiderca SAIC, Centro de Investigación Industrial, Campana*
gpoltarak@gmail.com

Resumen

Cerca del 90% de la producción mundial de acero se realiza mediante el proceso de colada continua. En este artículo, se desarrolla una metodología para determinar riesgos de fisuración en el enderezado de barras de acero de sección circular, campo en el cual existen pocos antecedentes. La metodología desarrollada consiste en una simulación termo-mecánica de barras en solidificación, seguida de la codificación de criterios de falla. Para determinar el comportamiento del material, se realizan mediciones de ductilidad en caliente en un equipo Gleeble. Luego, se lleva a cabo un análisis de sensibilidad ante cambios en la velocidad de colada, la composición de acero y el diámetro de la barra. Por último, los resultados del modelo se contrastan con mediciones reales de defecto en una planta industrial, para evaluar su predictibilidad. Esta comparación muestra que el índice de defecto asociado a la colada continua sigue la misma tendencia obtenida en los escenarios modelados. El tema en estudio provee de herramientas de análisis orientadas tanto a la mejora en la calidad del producto como a la productividad de una acería.

Palabras clave: colada continua, enderezado, modelo, fisuración

Abstract

About 90% of the world's steel production is carried out by the continuous casting process. In this article, a methodology is developed in order to determine the cracking risk in the straightening of round bars, a field in which there is little precedent. The developed

methodology consists of a thermo-mechanical simulation of solidifying bars, followed by the codification of failure criteria. Hot ductility measurements are performed on a Gleeble system in order to determine the behavior of the material. Then, a sensitivity analysis is carried out by changing casting speed, steel composition and bar diameter. Finally, model results are compared with real defect measurements in an industrial plant, to evaluate their predictability. This comparison shows that the defect index associated with continuous casting follows the same trend obtained in the modeled scenarios. The subject under study provides analysis tools aimed at both improving the quality of the product and the productivity of a steel-shop.

Keywords: continuous casting, straightening, model, cracking.

Introducción

La colada continua es un proceso industrial a través del cual el acero solidifica en forma de barras o planchones. El acero fundido se vierte en un molde de cobre, en contacto con el cual se comienza a formar una cáscara sólida, la cual se extrae mediante rodillos, se enfría con sprays de agua y finalmente se corta. En la actualidad, cerca del 90% de la producción mundial de acero se realiza mediante este proceso. Históricamente, la mayor parte de las investigaciones se han centrado en el análisis de productos de sección rectangular, tales como planchones o barras cuadradas, cuya problemática está asociada a efectos que no son apreciables en el caso de barras de sección circular, campo en el cual hay pocos antecedentes.

Existen distintos tipos de máquina de colada continua. Las máquinas horizontales, si bien requieren poca altura de construcción, necesitan de un aporte de energía para extraer las barras. Además, la solidificación en un molde horizontal acarrea complicaciones para secciones grandes. Las máquinas verticales hacen uso del peso del acero producido para extraer las barras, es decir que no necesitan energía adicional para este fin. Las desventajas de estas máquinas es que requieren de una gran altura de construcción (alrededor de 30 m), de complejos mecanismos de evacuación de barras, y la velocidad de colada se encuentra limitada por la altura disponible.

Las máquinas curvas reúnen virtudes de las máquinas horizontales y de las verticales: hacen uso del peso del acero para extraer las barras, no necesitan de una altura de construcción excesiva (alrededor de 15 m) ni de complejos mecanismos de evacuación. La desventaja de este tipo de máquinas es que el eje de la barra, originalmente curvo, debe transformarse en recto, en un proceso que se denomina "enderezado". Este cambio de forma puede provocar fisuras internas o superficiales. La simulación del enderezado cobra relevancia cuando se diseña o modifica una máquina de colada continua, y cuando se hacen cambios en las prácticas operativas.

En este trabajo se desarrolla un modelo termo-mecánico para el enderezado de barras de sección circular, se codifican indicadores de fisuración y se llevan a cabo ensayos de laboratorio para cuantificar la respuesta del material. Por último, se contrastan los resultados del modelo con mediciones empíricas, obtenidas del análisis de la producción en una planta industrial. La metodología desarrollada es aplicable en escenarios de incremento de productividad y control de la calidad del producto.

Desarrollo

La metodología de análisis del proceso de enderezado está compuesta por distintos modelos y criterios de falla. En primera instancia, se modela la transferencia de calor en la

barra de colada continua para determinar la distribución de temperaturas y fases en el material. Esa información se ingresa en un modelo mecánico que calcula tensiones y deformaciones. Estos parámetros sirven para alimentar criterios de falla interna y superficial, cuyo objetivo es determinar índices de fisuración que cuantifiquen numéricamente cuán crítica resulta una situación determinada.

Proceso de enderezado

Las máquinas de colada continua de barras redondas parten generalmente de un plano de colada horizontal, donde se ubica el molde de cobre, que ya tiene la curvatura del primer sector circular. El radio de este sector definirá la deformación final en la barra,

$$\varepsilon_{sf} = \frac{1}{2} \frac{d}{R_0} \quad (1)$$

donde ε_{sf} es la deformación superficial final, d es el diámetro de la barra y R_0 es el primer radio de la máquina (Fig. 1).

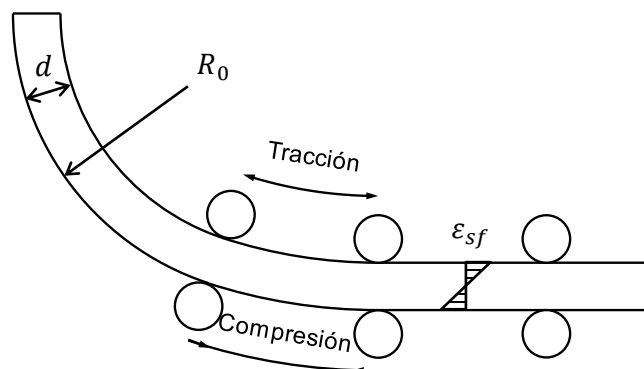


Figura 1: Esquema de máquina de colada continua curva.

De la ec. 1 podemos deducir que, cuanto más grande sea el radio de la máquina, menor será la deformación final en la barra. Pero al incrementarse este radio, aumenta consecuentemente el costo de la planta, al requerirse una mayor altura de construcción. Al salir del sector curvo, la barra pasa por las jaulas extractoras, cuyas funciones son enderezarla, evitar su deslizamiento y controlar la velocidad de colada.

Antiguamente, las máquinas se construían con un único radio, es decir que la barra se enderezaba abruptamente en un punto, generándose una alta velocidad de deformación, crítica para el material. Estos cambios bruscos de curvatura deben minimizarse. Una posibilidad es emplear múltiples puntos de enderezado, distribuyendo entre ellos el salto entre las curvaturas original y final. Las deformaciones parciales en cada cambio de curvatura serán entonces:

$$\varepsilon_{sn} = \left(\frac{1}{R_{n-1}} - \frac{1}{R_n} \right) \frac{d}{2} \quad (2)$$

donde ε_{sn} es la deformación superficial parcial en el punto de enderezado n , ubicado al pasar del radio R_{n-1} al radio R_n . Si bien la deformación final coincidirá con la calculada en la ec. 1, el hecho de distribuir el salto de curvatura generará menores velocidades de deformación. Tanto la curvatura como la deformación pueden estimarse en base a expresiones analíticas simples. El cálculo de la velocidad de deformación es más complicado puesto que se necesita conocer la distribución exacta de las deformaciones a lo largo de la barra o, lo que es equivalente, asumir una ley de variación de la curvatura. En este trabajo, se ha empleado un modelo termo-mecánico con el cual se pueden calcular tanto deformaciones como velocidades de deformación. Este modelo se detalla en el siguiente apartado.

La velocidad de deformación puede reducirse aún más si se continúan agregando radios de enderezado. La condición ideal se da cuando la curvatura disminuye de manera lineal, sin discontinuidades. En ese caso, estamos en presencia del "enderezado continuo". El eje de la barra llega al punto de enderezado con un radio R_0 , y luego va aumentando el radio de manera gradual hasta llegar a enderezarse (radio infinito). Existen diversas alternativas para el abordaje analítico del enderezado continuo [1]-[4].

Modelo térmico

La simulación térmica se lleva a cabo con un modelo desarrollado internamente que resuelve la transferencia de calor en la barra [5], asumiendo que la conducción en la dirección longitudinal es despreciable frente a la que se produce en la dirección radial. Por ende, el dominio de cálculo es una sección transversal que circula a lo largo de la colada, en la que se resuelve la ecuación de transferencia de calor transitoria bidimensional,

$$\frac{d\mathcal{H}}{dT} \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (k \nabla T) \quad (3)$$

donde \mathcal{H} es la entalpía volumétrica y k la conductividad térmica. El calor volumétrico producido por los cambios de fase se tiene en cuenta a través de la derivada $d\mathcal{H}/dT$. La ec. 3 tiene las siguientes condiciones de contorno:

$T = T_0$ temperatura inicial en el menisco

$\underline{q} \cdot \underline{n} = q_m$ flujo de calor en el molde [6]

$\underline{q} \cdot \underline{n} = h(T - T_{amb})$ convección y radiación al ambiente

donde $\underline{q} = -k \nabla T$ es el flujo de calor de acuerdo a la Ley de Fourier. El flujo de calor convectivo se utiliza para simular las pérdidas de calor al ambiente y las producidas por los sprays de agua, pero también para simular la radiación al ambiente, a través de la aplicación

de un coeficiente de convección equivalente h que tiene en cuenta ambos efectos. La ec. 3 se resuelve numéricamente por medio del método de elementos finitos, utilizando una integración temporal implícita. Las no linealidades tales como cambios de fase y parámetros dependientes de la temperatura requieren de la implementación de un algoritmo iterativo.

Este modelo térmico fue utilizado para optimizar variables operativas de la colada continua [7] y fue validado con mediciones hechas en distintas plantas industriales [8], [9].

Modelo mecánico

La simulación mecánica se lleva a cabo mediante un modelo euleriano tridimensional de elementos finitos [10] que considera al metal como un fluido visco-plástico. Se modelan distintas fases del material, tales como el acero líquido, la zona “mushy”, el material sólido y el aire al cambiar el valor de la viscosidad a lo largo de la barra. La malla permanece fija mientras que la superficie libre del material queda definida por una variable auxiliar llamada pseudo-concentración, la cual se actualiza mediante la ecuación de transporte.

Luego de determinar la posición de la superficie del material, el campo de velocidades debe satisfacer las ecuaciones de equilibrio. La ecuación de conservación de la energía interna de deformación lleva al principio de las potencias virtuales:

$$\int_V \underline{\underline{\sigma}} : \delta \underline{\underline{\dot{\epsilon}}} dV = \int_V \underline{\underline{f}}^V \cdot \delta \underline{\underline{u}} dV + \int_{S\sigma} \underline{\underline{t}} \cdot \delta \underline{\underline{u}} dS \quad (4)$$

donde V es el dominio de cálculo, $\underline{\underline{\sigma}}$ el tensor de tensiones de Cauchy, $\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}$ el tensor gradiente de deformaciones, $\underline{\underline{f}}^V$ el vector de fuerzas volumétricas, $\underline{\underline{u}}$ el vector de velocidades, $S\sigma$ el contorno del dominio, y $\underline{\underline{t}}$ el vector de fuerzas superficiales. La entrada del modelo se define imponiendo la velocidad de colada y la pseudo-concentración de acuerdo a la sección circular de la barra. Los rodillos se consideran como superficies rígidas. Como el material no puede pasar a través de ellos, se impone una velocidad nula en la dirección del rodillo. Se asume que la sección de salida es completamente sólida, con lo cual se impone allí una velocidad uniforme.

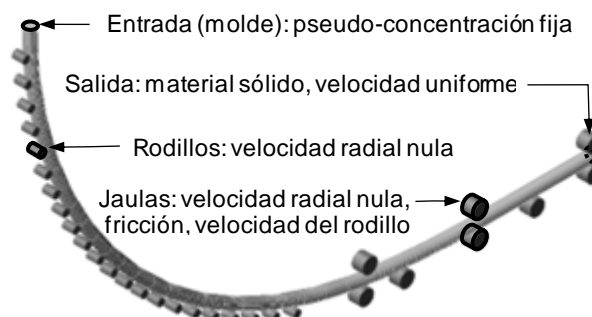


Figura 2: Condiciones de contorno del modelo mecánico.

En este modelo se emplea una ley de material propuesta por Kozlowski [11] para el rango austenítico, es decir, cuando las temperaturas son inferiores a la temperatura correspondiente a un contenido de 10% ferrita- δ (o ferrita de alta temperatura) y una ley propuesta por Thomas [12] para el rango ferrítico, es decir, cuando la temperatura es mayor a dicho valor. Las leyes constitutivas utilizadas expresan tensiones en función de deformación, velocidad de deformación, temperatura y contenido de carbono. El campo de temperaturas calculado en el inciso anterior se ingresa al modelo mecánico como dato de entrada. Las temperaturas de solidus, liquidus, y cambios de fase se extraen de un modelo de segregación desarrollado previamente [13], en función de la composición química de cada acero.

Fisuración interna

Las fisuras internas son defectos que se forman en el frente de solidificación cuando éste se ve sometido a esfuerzos de tracción. El objetivo de los criterios de fisuración en caliente es cuantificar el riesgo de falla al que está expuesta la barra en una situación operativa determinada. Si bien puede encontrarse una variedad de criterios en la literatura, la mayoría de los autores coincide en afirmar que la fisuración en caliente tiene lugar cuando la deformación efectiva supera un determinado valor crítico, el cual es función de la composición química y de la velocidad de deformación. Won [14] propuso una expresión analítica,

$$\varepsilon_C = \frac{\varphi}{\Delta T_B^n \dot{\varepsilon}^m} \quad (5)$$

donde ε_C es la deformación crítica, ΔT_B es el rango frágil de temperaturas, $\dot{\varepsilon}$ es la velocidad de deformación, y φ , n y m son constantes de ajuste. Este rango ΔT_B está comprendido entre las temperaturas de ductilidad nula ZDT , correspondiente a una fracción sólida de 1.0, y la temperatura en la que el líquido no puede penetrar entre dendritas LIT . Estas temperaturas varían en función de la composición del acero y se encuentran entre los 1400 y 1500 °C. Cualquier tracción que reciba el material en esta fase tendrá altas posibilidades de generar una fisura que no pueda ser rellenada con acero líquido.

La deformación efectiva para la formación de fisuras ε_e es aquella que tiene lugar entre las temperaturas ZDT y la temperatura de resistencia nula ZST , correspondiente a una fracción sólida de 0.8 [15]. Deformaciones que se produzcan fuera de este rango no generarán riesgo de fisuración en caliente dado que, si el material está más caliente que ZST la deformación será absorbida por el líquido, y si el material está más frío que ZDT habrá solidificado completamente, en una fase que puede deformarse de manera dúctil. Por último, calculamos el indicador de riesgo de falla interna haciendo

$$L_{int} = \frac{\varepsilon_e}{\varepsilon_C} \quad (6)$$

Aquí, si $L_{int} > 1$, las deformaciones en la barra han superado a la deformación crítica y por ende hay alto riesgo de fisuración, mientras que valores de $L_{int} < 1$ indican bajo riesgo de fisuración.

Este criterio de fisuración interna fue validado analizando macroataques de muestras fisuradas, a través de la compresión diametral de barras redondas [16].

Fisuración superficial

Los mecanismos de fisuración predominantes en el acero sólido entre los 700 y 1000 °C se originan con la precipitación en borde de grano de ferrita- α (o ferrita de baja temperatura). Esta fase más blanda promueve fisuras intergranulares, efecto que se incrementa al incorporarse compuestos como carbonitruros de Nb y nitruros de Al, y que macroscópicamente se manifiesta como una pérdida de ductilidad. El ensayo de reducción de área en función de la temperatura (ensayo RA- T) permite medir este fenómeno, y consiste en someter una probeta a tracción y registrar la sección final que queda luego de la rotura, manteniendo controladas temperatura y velocidad de deformación. La deformación crítica que el material es capaz de absorber antes de la rotura se encuentra estrechamente relacionada con la reducción de área.

Schwerdtfeger [17] desarrolló un criterio de falla que, basándose en la información provista por ensayos RA- T , determina la deformación crítica que el material es capaz de resistir. Para la tesis, se llevaron a cabo ensayos de laboratorio que permitieron ajustar curvas RA- T para aceros de composiciones específicas. Particularmente, se ensayaron aceros al niobio, titanio y vanadio, analizando la influencia de estos micro-aleantes en el pozo de ductilidad. Una vez que obtenemos la función de ajuste RA- T para el grado de acero en estudio, Schwerdtfeger propone calcular la deformación crítica que el material puede resistir sin fisurarse haciendo,

$$\varepsilon_c = \frac{0.4}{f_{grain} f_{segreg} f_{notch}} \frac{RA}{100} \quad (7)$$

donde f_{grain} , f_{segreg} y f_{notch} son parámetros que dependen del tamaño de grano, segregación de solutos en borde de grano y marcas de oscilación, y RA es la reducción de área en cada punto. Finalmente, se calcula una "integral de daño" que tiene en cuenta el daño acumulado que va recibiendo cada fibra de la barra,

$$L_{sup} = \sum_{i=1}^n \frac{|\Delta\varepsilon_i|}{\varepsilon_{c i}} \quad (8)$$

donde $i = 1, 2, \dots, n$ representa cada instante de tiempo, $|\Delta\varepsilon_i|$ es el incremento en la deformación en el instante i , y $\varepsilon_{c i}$ es la deformación crítica que el material es capaz de resistir en ese mismo instante, de acuerdo a la ec. 7. Análogamente a lo descrito en el punto anterior para fisuración interna (ec. 6), si L_{sup} alcanza el valor de 1 hay riesgo de fisuración superficial.

Ensayos de laboratorio

Con el objetivo de cuantificar la pérdida de ductilidad que presentan aceros de distintas composiciones durante el pasaje de la fase austenítica a una predominantemente ferrítica, se llevaron a cabo ensayos de reducción de área en función de la temperatura y de la velocidad de deformación. Se ensayaron probetas cilíndricas de 10 mm de diámetro y 116 mm de longitud en un equipo Gleeble 3500.

El ciclo de calentamiento y enfriamiento empleado en estos ensayos intenta reproducir las condiciones a las cuales se somete al material durante la colada continua. Se calienta la probeta a 1.5 °C/s hasta alcanzar 1350 °C, manteniéndose en esa temperatura durante 5 minutos. Esto produce que el material se austenice completamente, formándose granos más grandes compatibles con los que se obtienen en la barra de colada continua luego de solidificar. Luego, se enfría la probeta a una velocidad de 1.5 °C/s, también compatible con la velocidad de enfriamiento que ocurre durante el colado. Una vez alcanzada la temperatura de ensayo, se mantiene durante otros 5 minutos. A continuación, se somete la probeta a tracción a una velocidad de deformación controlada hasta la rotura. Por último, se mide el área de la probeta en su sección de rotura, comparándola con la sección inicial de la misma. Esta reducción de área cuantifica la ductilidad del material.

Si la probeta sufre una gran estricción, la sección final es chica y se trata de un material dúctil que es capaz de absorber una alta deformación. Si, por el contrario, la sección final es similar a la inicial, se trata de un material frágil que rompe bruscamente. En otras palabras, la deformación crítica que el material es capaz de absorber antes de la rotura se encuentra estrechamente relacionada con la reducción de área.

Para este trabajo, se llevaron a cabo ensayos de laboratorio que permitieron ajustar curvas RA-*T* para aceros de composiciones específicas. Particularmente, se ensayaron aceros con contenido de niobio, titanio y vanadio, y se analizó la influencia de estos aleantes en el pozo de ductilidad. La composición química de estos aceros se detalla en la Tabla 1.

Tabla 1: Composición química de los aceros ensayados en Gleeble (% en peso)

Acero	C	Mn	Si	V	Nb	Ti
A (sin Nb)	0.12	1.05	0.25	0.04	0.00	0.02
B (con Nb)	0.11	1.10	0.25	0.07	0.03	0.00

Se seleccionaron temperaturas de ensayo entre 700 y 1100 °C pues el pozo de ductilidad ocurre en ese rango. La velocidad de deformación se fijó en principio en 10^{-3} s^{-1} , compatible con los valores que ocurren durante el enderezado. Además, se realizaron ensayos a velocidades de deformación de 10^{-1} y 5 s^{-1} , a una temperatura fija de 800 °C, con el objetivo de capturar la dependencia de RA con la velocidad de deformación. Los resultados de los ensayos se ajustaron con una función beta asimétrica [18] y se muestran en la Fig. 3.

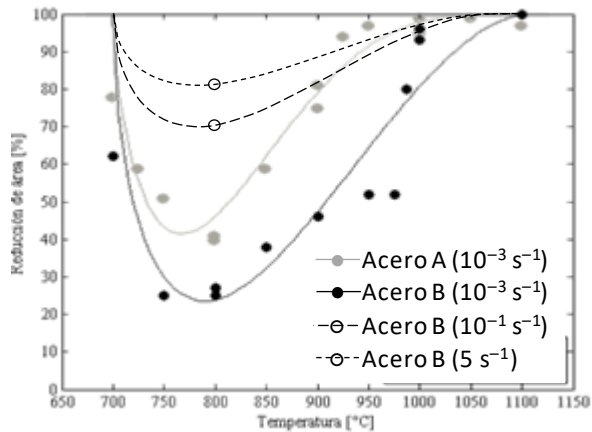


Figura 3: Curvas RA-T para aceros A y B, ajustadas con función beta asimétrica, para velocidad de deformación 10^{-3} s^{-1} (línea llena). Se grafican además las mediciones para acero B a $800 \text{ }^{\circ}\text{C}$, a mayores velocidades de deformación (punteado).

Las dependencia de las curvas RA-T con la velocidad de deformación se ajustó usando una función tangente hiperbólica. En la Fig. 4 se grafica este ajuste para el acero B a una temperatura fija de $800 \text{ }^{\circ}\text{C}$.

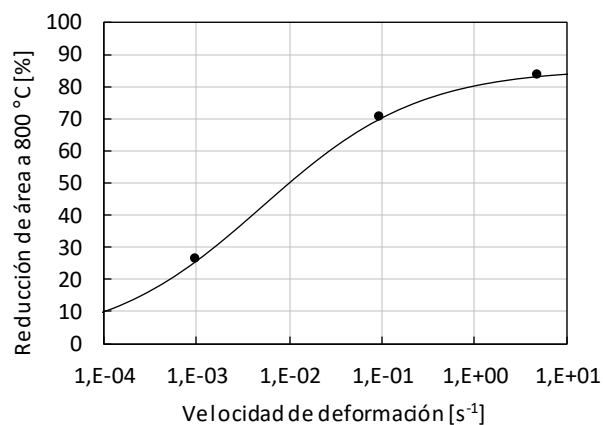


Figura 4: resultados de RA-T en función de la velocidad de deformación para el acero B, a una temperatura fija de $800 \text{ }^{\circ}\text{C}$. Se ajustan los datos con una función tangente hiperbólica.

Análisis de un caso industrial

En este apartado, se estudia la influencia de distintos parámetros operativos en el riesgo de falla superficial debido al enderezado. La planta analizada cuenta con una máquina curva de 3 radios, que cuela barras de sección circular de 148 a 330 mm de diámetro. Estas barras se laminan conformando tubos sin costura, y toda la producción se inspecciona a través de ensayos no destructivos. Cada vez que se detecta un defecto, se lo clasifica de acuerdo a un conjunto de reglas pre-establecidas. Esta clasificación ayuda a determinar en qué parte del proceso de fabricación se podría haber generado (fabricación de acero, colada, laminación, tratamiento térmico, etc.). En este caso, se compilan los resultados de la inspección de más de 5000 coladas, evaluándose particularmente la influencia de

composición del acero, velocidad de colada y diámetro de la barra en la ocurrencia de defectos. Se calcula el riesgo de falla superficial previamente desarrollado y se contrastan estos resultados con el análisis de defectología, para evaluar la predictibilidad del modelo.

Para cada calibre, se considera una velocidad de colada estándar, y una velocidad reducida en un 30%, de acuerdo con la práctica definida para el inicio de secuencia. Se evalúan los aceros indicados en la Tabla 1. El acero A no contiene Nb (comportamiento más dúctil) mientras que el acero B contiene Nb (comportamiento más frágil).

Como primer paso, se determina la distribución de temperaturas con el modelo descrito anteriormente. En la Fig. 5 se muestra la temperatura superficial para todos los diámetros colados a velocidad estándar, en función de la distancia al menisco.

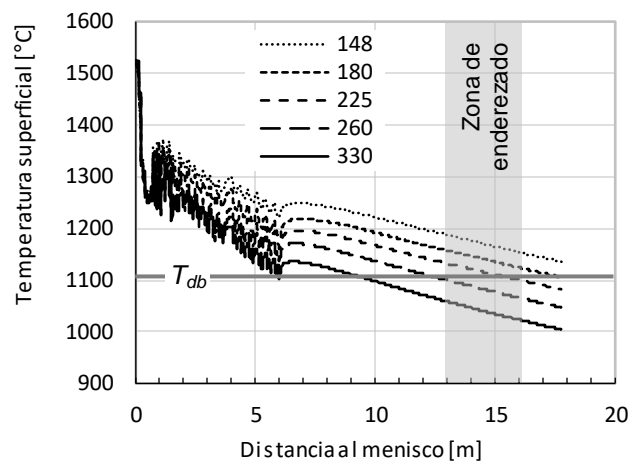


Figura 5: Distribución de la temperatura superficial para barras de distinto diámetro (acero B).

Tal como se vió en los ensayos de laboratorio, el límite superior del rango frágil de temperaturas T_{db} para los aceros A y B se halla alrededor de los 1100 °C. Puede apreciarse que barras de mayor diámetro presentan menores temperaturas, pues las secciones más grandes cuelan más lento. En particular, las secciones de diámetro 260 y 330 mm llegan al enderezado con temperaturas menores a T_{db} , es decir que se esperaría un mayor riesgo de fisuración superficial en esos casos.

Luego de la simulación térmica, se lleva a cabo el modelado mecánico para determinar los campos de tensiones y deformaciones. Por último, los resultados del modelo termo-mecánico y la información de ensayos de ductilidad se procesan en forma conjunta para estimar el riesgo de fisuración superficial, tal como se explicó en la sección "Fisuración superficial". El procedimiento descrito se repite para todas las combinaciones de diámetro de barra, velocidad de colada y grado de acero, obteniéndose un valor de riesgo de fisuración superficial para cada caso. Los resultados se resumen en la Fig. 6.

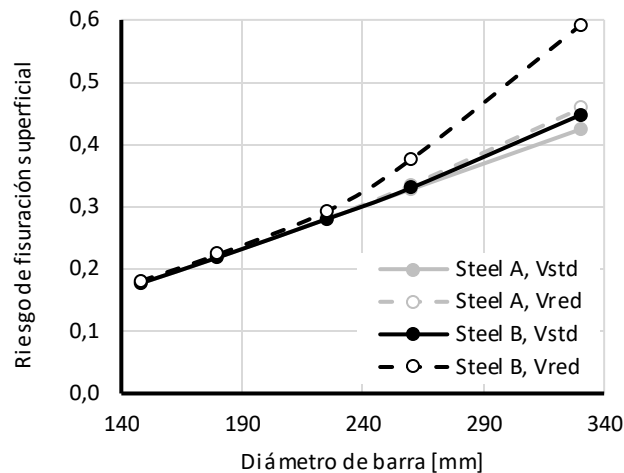


Figura 6: Resultados de riesgo de fisuración superficial en función del diámetro de barra, composición de acero (A sin Nb, y B con Nb) y velocidad de colada (estándar y reducida).

Se observa un claro incremento en el riesgo de fisuración al aumentar el diámetro de la barra. En calibres pequeños, la velocidad de colada y el tipo de acero no tienen un efecto apreciable. Pero en barras más grandes, los aceros aleados al Nb presentan una condición más desfavorable. Este efecto es más evidente a baja velocidad de colado.

Comparación de resultados

Se compilaron y analizaron resultados de inspección en tubos provenientes de una gran cantidad de coladas. En principio, se analizó la influencia del diámetro de barra y posición de la colada en la secuencia. En la Fig. 7, se observa que, conforme aumenta el diámetro de la barra, también lo hace el índice de defecto. Esta tendencia concuerda con los resultados del modelo indicados en la Fig. 6, y se produce porque en mayores secciones se generan deformaciones más grandes en la superficie de la barra.

La primera colada en una misma secuencia suele colar más lento que las siguientes ya que, por razones operativas, la velocidad en el arranque se aumenta gradualmente. Menores velocidades de colada producen que la temperatura al enderezado sea más baja, con lo cual puede alcanzarse T_{db} , incrementándose el riesgo de fisuración. Esto se verifica en las simulaciones llevadas a cabo, pues se obtiene un incremento en el índice de fisuración al reducir la velocidad un 30%. Las secciones más chicas se cueban a mayor velocidad, de manera que la temperatura al enderezado se mantiene relativamente alta (Fig. 5), y este efecto es menos apreciable (Fig. 6).

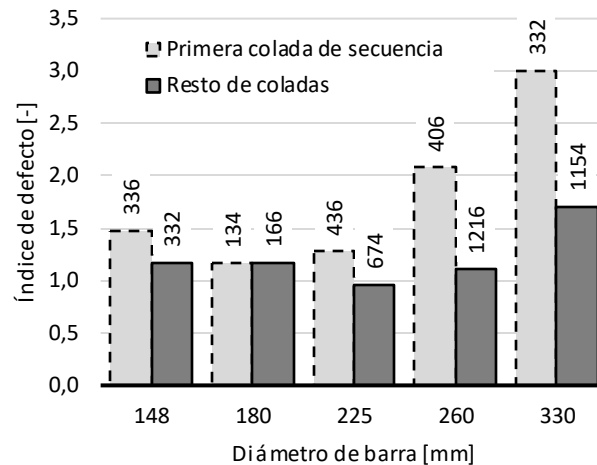


Figura 7: Índice de defecto para todos los diámetros de barra, agrupado según se trate de la primera colada de una secuencia (habitualmente a menor velocidad, en gris claro) y el resto de las coladas en la secuencia (gris oscuro). Sobre cada barra se muestra la cantidad de coladas analizadas en cada caso.

Con el objetivo de estudiar el efecto de la composición química en el índice de defecto, se conforman 2 grupos de aceros, uno con niobio y el otro sin niobio. Se seleccionaron aceros de bajo carbono. Como los aceros al niobio se cuelean más frecuentemente en calibres grandes, se consideran solo barras de 225, 260 y 330 mm de diámetro para hacer la comparación. Tal como se observa en la Fig. 8, los aceros al niobio muestran un mayor índice de defecto, en correspondencia con las predicciones del modelo expuestas en la Fig. 6.

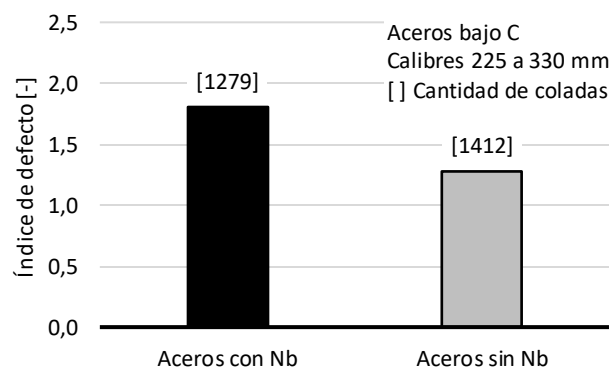


Figura 8: Efecto del niobio en el índice de defecto para calibres 225, 260 y 330 mm. Los colores de las barras se eligieron de acuerdo a los de la Fig. 5, ya que la barra gris puede asociarse al acero A (sin niobio) y la negra al acero B (con niobio).

Por último, se analiza el impacto del tipo de máquina en el índice de defecto. Para este análisis, se comparan grados de acero similares (bajo carbono, con niobio), de igual sección (330 mm) pero en dos máquinas diferentes (una curva y una recta). Como se muestra en la

Fig. 9, el índice de defecto es mayor en la producción de la máquina curva, lo cual confirma la influencia del enderezado en la formación potencial de defectos.

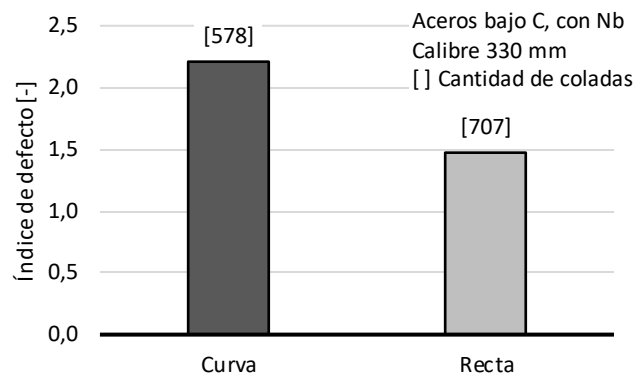


Figura 9: Influencia del tipo de máquina en el índice de defecto.

Conclusiones

Se desarrolló una metodología que permite cuantificar los riesgos de fisuración interna y superficial en barras de colada continua. Esta metodología consiste de una simulación termo-mecánica seguida de la codificación de criterios de falla.

Se llevaron a cabo ensayos de laboratorio en distintos aceros para ajustar el criterio de fisuración superficial. Los resultados de estos ensayos mostraron que los aceros aleados (particularmente al niobio) presentaron un pozo de ductilidad más amplio y profundo.

La metodología de modelación descrita fue utilizada para analizar un caso industrial, en el cual se determinó el índice de fisuración superficial debido al enderezado. Se evaluó la influencia de distintos parámetros de producción en el índice de falla.

Las simulaciones llevadas a cabo mostraron que el riesgo de fisuración superficial es mayor conforme aumenta el diámetro de la barra, ya que secciones más grandes se encuentran sujetas a mayor deformación superficial y menor temperatura a momento de ser enderezadas. Ambos efectos son críticos para el material. Para barras de igual tamaño, una reducción en la velocidad de colada puede incrementar el riesgo de fisuración superficial ya que la superficie de la barra presenta menores temperaturas, y puede ingresar en el pozo de ductilidad durante el enderezado. Como las secciones más chicas usualmente se cuelan a mayores velocidades, la temperatura de enderezado permanece relativamente alta, con lo cual este efecto no es significativo. Sin embargo, una reducción de velocidad puede tener un efecto perjudicial en secciones grandes. Este efecto se hizo más evidente en aceros aleados al niobio.

Los resultados de las simulaciones fueron contrastados con indicadores de calidad en el producto final (en este caso, tubos sin costura). Esta evaluación mostró que el índice de defectos superficiales relacionados a la colada continúa siguió la misma tendencia que se obtuvo al modelar estos casos.

Referencias

- [1] Horn, B.K.P. (1983) The curve of least energy. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 9(4), 441-460.
- [2] Moreton, H.P. (1992) *Minimum Curvature Variation Curves, Networks and Surfaces for Fair Free-Form Shape Design*. PhD thesis, University of California, Berkeley, California.
- [3] Levien, R.L.; Séquin, C.H. (2009) Interpolating Splines: Which is the fairest of them all? *Computer-Aided Design & Applications*, 6(1), 91-102.
- [4] Poltarak, G.; Ferro, S. (2019) A continuous straightening formulation based on minimum curvature variation. *International Journal of Materials and Product Technology*. 58(1), 71-84.
- [5] Gonzalez, M.; Goldschmit, M.B.; Assanelli, A.P.; Dvorkin, E.N.; Fernández Berdaguer, E. (2002) Modeling of the solidification process in a continuous casting installation for steel slabs. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 34(4), 455-473.
- [6] Savage, J.; Pritchard, W.H. (1954) The problem of rupture of the billet in the continuous casting of steel. *Journal of the Iron and Steel Institute*, 178, 269-277.
- [7] Vazquez, M.; Poltarak, G.; Ferro, S.; Campos, A.; Cicutti, C. (2014) Application of mathematical models to optimize operating conditions during the continuous casting of round bars. *8th ECCO*, Graz, Austria.
- [8] Ristorto, I.; Vazquez, M.; Fuhr, F.; Alicandro, J.; Sabugal, J.; Campos, A. (2014) Improvements in the Continuous Casting Process in Tenaris Siderca. *20th IAS Steel Conference*, Rosario, Argentina.
- [9] Ferro, S.; Cardozo, M. (2013) Estimation of effective thermal conductivity for continuous casting thermal models. *5th SteelSim*, Ostrava, Czech Republic.
- [10] Dvorkin, E.N.; Toscano, R.G. (2003) A new rigid-viscoplastic model for simulating thermal strain effects in metal forming processes. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 58, 1803-1816.
- [11] Kozłowski, P.F.; Thomas, B.G.; Azzi, J.A.; Wang, H. (1982) Simple constitutive equations for steel at high temperature. *Metallurgical Transactions A*, 23A, 903-918.
- [12] Li, C.; Thomas, B.G. (2004) Thermomechanical Finite-Element Model of Shell Behavior in Continuous Casting of Steel. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 35B(6), 1151-1172.
- [13] Cicutti, C.; Boeri, R. (2006) Analysis of solute distribution during the solidification of low alloyed steels. *Steel Research International*, 77(3), 194-201.
- [14] Won, Y.M.; Yeo, T.J.; Seol, D.J.; Oh, K.H. (2000) A new criterion for internal crack formation in continuously cast steels. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 31, 779-794.
- [15] Yamanaka, A.; Nakajima, K.; Okamura, K. (1995) Critical strain for internal crack formation in continuous casting. *Ironmaking and Steelmaking*, 22(6), 508-512.
- [16] Poltarak, G.; Ferro, S.; Cicutti, C. (2017) Estimation of Internal Cracking Risk in the Continuous Casting of Round Bars. *Steel Research International*. 88(4), 1600223.
- [17] Schwerdtfeger, K.; Spitzer, K.H. (2009) Application of Reduction of Area-Temperature Diagrams to the Prediction of Surface Crack Formation in Continuous Casting of Steel. *ISIJ International*, 49(4), 512-520.
- Olver, F.W.J.; Olde Daalhuis, A.B.; Lozier, D.W.; Schneider, B.I.; Boisvert, R.F.; Clark, C.W.; Miller, B.R.; Saunders, B.V.; Cohl, H.S.; McClain, M.A. editores. *NIST Digital Library of Mathematical Functions*. Versión 1.1.2 del 15-Jun-2021. Recuperado de: <https://dlmf.nist.gov/5.12>

34

Estudio por técnicas calorimétricas de las transformaciones involucradas en calcogenuros para dispositivos de memoria

Rocca, J. A. ^{a,b,d,e}, Ureña, M. A. ^{a,b,c,e}, Fontana, M. R. ^{a,b,d,e}

^a Universidad de Buenos Aires. Facultad de Ingeniería. Laboratorio de Ablación Láser. Paseo Colón 850, Buenos Aires, Argentina

^b Universidad de Buenos Aires. Facultad de Ingeniería. Laboratorio de Sólidos Amorfos. Paseo Colón 850, Buenos Aires, Argentina

^c Universidad de Buenos Aires. Facultad de Ingeniería. Departamento de Química. Paseo Colón 850, Buenos Aires, Argentina

^d Universidad de Buenos Aires. Facultad de Ingeniería. Departamento de Física. Paseo Colón 850, Buenos Aires, Argentina

^e CONICET - Universidad de Buenos Aires. Instituto de Tecnologías y Ciencias de la Ingeniería "Hilario Fernández Long" (INTECIN). Buenos Aires, Argentina.

jarocca@fi.uba.ar

Resumen

Los calcogenuros se encuentran entre los materiales promisorios para la fabricación de dispositivos de memoria no volátil. Presentan el fenómeno de realizar un cambio de fase inducido por un pulso eléctrico y pasar de una estructura amorfa a una cristalina disminuyendo en varios órdenes de magnitud su resistencia eléctrica (*phase change materials*). Este proceso puede revertirse aplicando un pulso mediante el cual el material se funde, luego se enfría rápidamente (en la configuración geométrica adecuada) volviendo al estado amorfo y permitiendo el ciclado de la memoria.

Hemos comprobado en trabajos previos que películas delgadas de $\text{Sb}_{70}\text{Te}_{30}$ presentan el fenómeno de cambio de fase. Según la bibliografía, el agregado de metales mejora el desempeño de las memorias. En este trabajo hemos estudiado la influencia del agregado de estaño y de plata en el sistema $\text{Sb}_{70}\text{Te}_{30}$ en el proceso de cristalización y fusión mediante calorimetría diferencial de barrido (DSC). Se fabricaron películas delgadas de composición $\text{Me}_{7,5}(\text{Sb}_{70}\text{Te}_{30})_{92,5}$ (Me: Ag o Sn) mediante la técnica de deposición por ablación láser. Para realizar las experiencias calorimétricas, se extrajo el material de las películas depositadas y se realizaron barridos en temperatura con velocidades entre 10 y 80 °C/min. Se determinaron las temperaturas de cristalización y fusión, así como también las entalpías involucradas en dichos procesos. También se determinó la energía de activación para la cristalización. De los resultados obtenidos se observa que el agregado de metales retarda el proceso de cristalización en 15-20 °C y aumenta su energía de activación.

Abstract

Chalcogenides glasses are among the most promising materials for the fabrication of non-volatile memory devices. They present the phenomenon of phase change induced by an electrical pulse so that they evolve from an amorphous to a crystalline structure and their electrical resistance decreases by several orders of magnitude (phase change materials). This process can be reverted by applying a pulse that melts the material. Then if it is rapidly cooled (in the proper geometric configuration), it returns to the amorphous state, allowing memory cycling.

We have found in previous work that thin films of $\text{Sb}_{70}\text{Te}_{30}$ exhibit the phase change phenomenon. According to the bibliography, the addition of metals improves memory performance. In this work, we have studied the influence of the addition of tin and silver in the $\text{Sb}_{70}\text{Te}_{30}$ system for the crystallization and fusion process by means of differential scanning calorimetry (DSC). Thin films of composition $\text{Me}_{7.5}(\text{Sb}_{70}\text{Te}_{30})_{92.5}$ (Me: Ag or Sn) were manufactured by the laser ablation deposition technique. To carry out the calorimetric experiments, the material was extracted from the deposited films and temperature scans were carried out with speeds between 10 and 80 °C/ min. The crystallization and melting temperatures were determined, as well as the enthalpies involved in these processes. The activation energy for crystallization was also determined. From the obtained results, it is observed that the addition of metals delays the crystallization process by 15 to 20 °C and increases its activation energy.

Palabras clave: Materiales de cambio de fase (PCM), vidrios calcogenuros, DSC

Introducción

Los materiales de cambio de fase (PCM) usados en dispositivos de almacenamiento de datos suelen estar basados en calcogenuros (elementos de la columna VI de la tabla periódica, esto es S, Se o Te). Particularmente las aleaciones PCM obtenidas como películas delgadas exhiben propiedades físicas excepcionales: transformaciones de fase rápidas y reversibles cuando se cambia entre los estados cristalino y amorfo. En consecuencia, las propiedades ópticas y eléctricas en estos estados son notablemente diferentes [1, 2]. La fase amorfa exhibe una resistividad eléctrica alta, en contraste con la fase cristalina, caracterizada por una resistividad esencialmente menor. Estas propiedades sobresalientes son la base del enfoque distintivo utilizado en esta nueva tecnología de almacenamiento de datos.

Uno de los materiales más adecuados para el almacenamiento no volátil es el de composición $\text{Sb}_{70}\text{Te}_{30}$ [2]. Y se espera que la introducción de átomos de impurezas metálicas como aluminio, cobre, plata o estaño en los vidrios calcogenuros mejore el desempeño de las memorias basadas en PCM [3].

Como se ha demostrado anteriormente, $\text{Sb}_{70}\text{Te}_{30}$ cristaliza en una estructura de grupo espacial trigonal $P-3m1$ y recientemente, se ha encontrado que el dopaje con Sn conduce a distorsiones estructurales de la celda unitaria, que pueden describirse mediante el grupo espacial monoclinico $C2/m$ tanto en forma volumétrica como cuando se cristalizan películas delgadas [4, 5].

Como motivación de esta investigación, comprender la particularidad de la evolución cinética de la transición amorfo-cristal en estos materiales es de vital importancia. En este trabajo hemos estudiado la influencia del agregado de estaño y de plata en el sistema $\text{Sb}_{70}\text{Te}_{30}$ en el proceso de cristalización y fusión mediante calorimetría diferencial de barrido (DSC).

Experimental

Se prepararon películas delgadas mediante deposición con láser pulsado (PLD) a partir de blancos de vidrios calcogenuros con las siguientes composiciones (expresadas como porcentaje atómico) $Sb_{70}Te_{30}$, $Sn_{7,5}(Sb_{70}Te_{30})_{92,5}$ y $Ag_{7,5}(Sb_{70}Te_{30})_{92,5}$; estas composiciones son denominadas según lo indicado en la Tabla 1. Inicialmente se prepararon muestras en volumen de estas composiciones por síntesis directa a partir de elementos puros (4N) en ampollas de cuarzo evacuadas y selladas [6]. Las muestras así obtenidas fueron cortadas y pulidas para ser utilizadas como blancos en el proceso de PLD. Se depositaron películas delgadas sobre sustratos estáticos (portaobjetos de vidrio de microscopio limpiados químicamente) a temperatura ambiente dentro de una cámara de vacío. El proceso de PLD se realizó utilizando un láser pulsado de Nd:YAG (Spectra-Physics Quanta-Ray Lab-150) con tiempos de deposición de 60-75 minutos, operando a una longitud de onda de 355 nm, con una duración de pulso de 5 ns y una frecuencia de repetición de 10 Hz. La densidad de energía utilizada fue de 4,0 a 5,8 J / cm² [7].

El material depositado fue extraído mecánicamente para ser analizado por técnicas calorimétricas.

El análisis térmico se llevó a cabo en un calorímetro de barrido diferencial Perkin Elmer Pyris 1 bajo atmósfera dinámica de Ar utilizando cazuelas de aluminio selladas. La masa de las muestras que se encontraba entre 2,0 y 4,5 mg fue determinada con precisión de 10 µg. Se realizaron experimentos de calentamiento continuo a velocidades de barrido $\beta = 10, 20, 40$ y 80 K/min.

Tabla 1: Nombre empleado para las aleaciones estudiadas.

Composición	Nombre
$Sb_{70}Te_{30}$	<i>Sb₇₀Te₃₀</i>
$Ag_{7,5}(Sb_{70}Te_{30})_{92,5}$	<i>AST-7,5</i>
$Sn_{7,5}(Sb_{70}Te_{30})_{92,5}$	<i>SST-7,5</i>

Resultados y discusión

La Figura 1 muestra la señal calorimétrica normalizada por la masa y la velocidad de calentamiento $\frac{dH}{dT}$ de las muestras obtenidas en régimen de calentamiento continuo con $\beta = 40$ K/min en un rango de temperaturas de 80 a 230 °C. Las curvas calorimétricas muestran una, o más transformaciones exotérmicas (dependiendo de la muestra) que ocurren sucesivamente al aumentar la temperatura. La muestra binaria $Sb_{70}Te_{30}$ tiene un único pico simétrico que nos permite inferir que el mismo podría asociarse a un único proceso, mientras que las muestras ternarias exhiben situaciones más complejas. En particular, en la muestra AST-7,5 se ven claramente tres transformaciones exotérmicas superpuestas que se resuelven observándose las respectivas temperaturas de pico, mientras que en SST-7,5 se observa un pico asimétrico que puede ser indicio de la existencia de más de un proceso involucrado. Este hecho es confirmado cuando se realizan los diferentes barridos en velocidad como puede verse en la Figura 2. A bajas velocidades se observan claramente al menos dos procesos superpuestos asociadas al pico exotérmico principal, que no se resuelven a velocidades mayores.

La Figura 3 muestra las curvas DSC de la muestra $Sb_{70}Te_{30}$ para todas las velocidades de calentamiento. El comportamiento observado al cambiar la velocidad de calentamiento en

esta figura es representativo de un único proceso de transformación y vemos que el pico mantiene la forma para todas las velocidades tratadas. Los cambios en las temperaturas de pico de cristalización de la muestra binaria T_p determinadas para los diferentes valores de β se presentan en la Tabla 2. Las temperaturas de pico de las transformaciones de las muestras ternarias, así como las temperaturas de fusión $T_{fusión}$, las entalpías de cristalización ΔH_{crist} y de fusión $\Delta H_{fusión}$ de todas las muestras también se muestran en la Tabla 2. Un resultado importante es que el agregado de Sn o Ag al binario retrasa el proceso de cristalización en 15-25 °C.

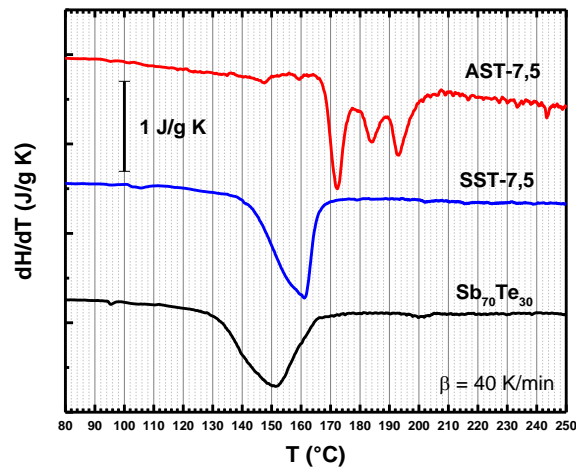


Figura 1: Curvas DSC (dH/dT vs T) obtenidas para la cristalización a una velocidad de 40 K/min.

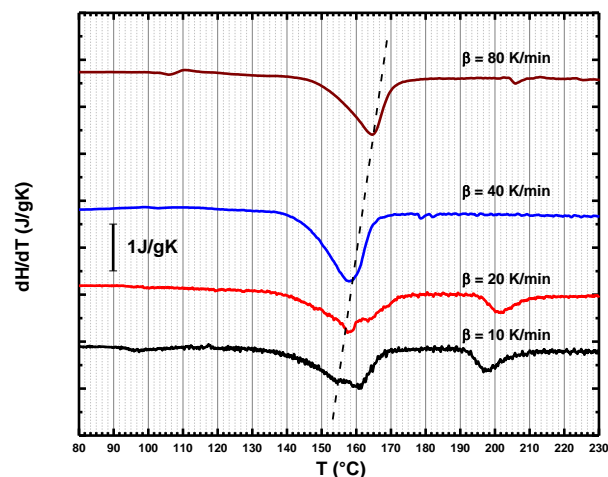


Figura 2: Curvas DSC (dH/dT vs T) de la muestra SST-7,5 a diferentes velocidades de calentamiento. Se muestra con una línea de puntos la posición del pico que estaría asociado al primer proceso.

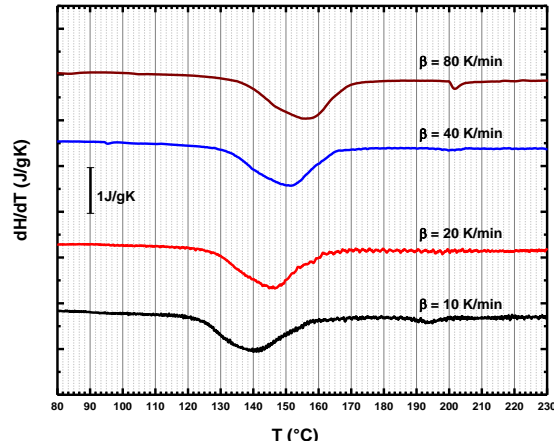


Figura 3: Curvas DSC (dH/dT vs T) de la muestra $Sb_{70}Te_{30}$ a diferentes velocidades de calentamiento

Como se observa en las figuras 2 y 3, al aumentar β , las transformaciones se desplazan a temperaturas más altas, mostrando la naturaleza térmicamente activada del proceso. La energía de activación E_a se puede determinar por el método de Kissinger [8]:

$$\ln\left(\frac{\beta}{T_p^2}\right) = \frac{E_a}{RT_p} + cte \quad (1)$$

siendo R la constante universal de los gases ideales y T_p la temperatura en la cual se alcanza el mínimo del pico de cristalización.

Por lo tanto, la energía de activación E_a se obtiene de la pendiente de la recta en el gráfico $\ln(\beta/T_p^2)$ versus $1000/T_p$. En la figura 4 se muestran estos gráficos para el pico principal de cada muestra estudiada. Los resultados obtenidos de la energía de activación se muestran en la Tabla 2. El agregado de un tercer elemento a la composición binaria produce un aumento en el valor de la energía de activación para la cristalización.

El hecho de que la transformación observada para la muestra binaria sea debida a un único proceso permite hacer un análisis más profundo de la cinética de cristalización y se puede determinar para cada velocidad de calentamiento la dependencia con la temperatura de la velocidad de transformación dx/dt y la fracción transformada x a partir de la relación [9]:

$$x(T) = \frac{\Delta H(T)}{\Delta H_{crist}} = \frac{\int_{T_o}^T \frac{dH}{dT} dT}{\int_{T_o}^{T_f} \frac{dH}{dT} dT} \quad (2)$$

Donde $\Delta H(T)$ es el área parcial desde T_o hasta la temperatura T de la señal calorimétrica normalizada por la masa y la velocidad de calentamiento, T_o y T_f son las temperaturas de comienzo y fin del pico.

En Figura 5 se muestran x y su derivada respecto a la temperatura dx/dT para la cristalización de la muestra binaria en función de la velocidad de calentamiento β .

Tabla 2: Magnitudes térmicas de las transformaciones de las muestras estudiadas.

Sb₇₀Te₃₀		
$T_{\text{fusión}} (^{\circ}\text{C})$	540	
$\Delta H_{\text{fusión}} (\text{J/g})$	138	
Primer pico de cristalización		
E_a (kJ/mol)	191 ± 16	
β (K/min)	T_p	$\Delta H_{\text{crist}} (\text{J/g})$
10	140,1	17,1
20	146,5	17,8
40	151,3	17,8
80	155,4	19,1
$\Delta H_{\text{crist}} (\text{J/g})$ (total)	18	

AST-7,5		
$T_{\text{fusión}} (^{\circ}\text{C})$	515	
$\Delta H_{\text{fusión}} (\text{J/g})$	130	
Primer pico de cristalización		
E_a (kJ/mol)	209 ± 10	
β (K/min)	T_p	$\Delta H_{\text{crist}} (\text{J/g})$
10	162,7	7,6
20	166,8	7,5
40	172,3	7,7
80	178,2	12,2
Segundo pico de cristalización		
E_a (kJ/mol)	188 ± 26	
Tercer pico de cristalización		
E_a (kJ/mol)	141 ± 44	
$\Delta H_{\text{crist}} (\text{J/g})$ (total)	17	

SST-7,5		
$T_{\text{fusión}} (^{\circ}\text{C})$	546	
$\Delta H_{\text{fusión}} (\text{J/g})$	146	
Primer pico de cristalización		

E_a (kJ/mol)	312 ± 10	
β (K/min)	T_p	ΔH_{crist} (J/g)
10	154,4	14,8
20	157,4	13,9
40	161,1	16,4
80	164,7	15,2
Segundo pico de cristalización		
E_a (kJ/mol)	--	
ΔH_{crist} (J/g) (total)	15	

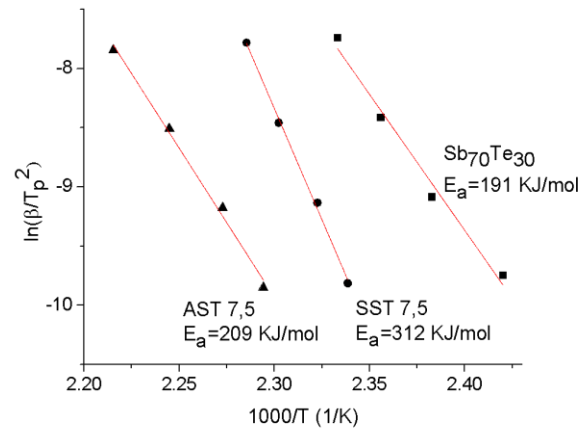


Figura 4: Método de Kissinger para las diferentes composiciones

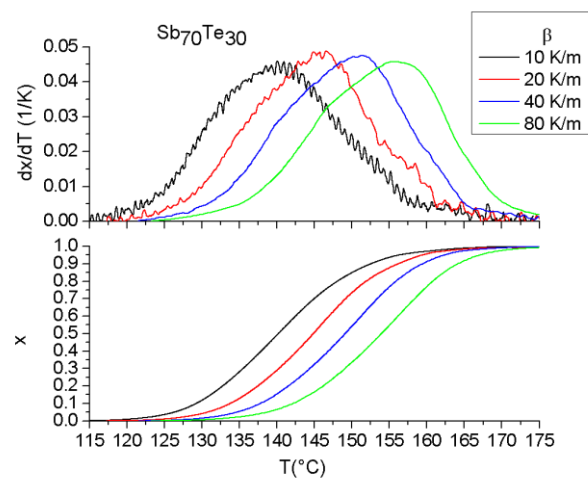


Figura 5: Fracción transformada y dx/dT para la cristalización de la muestra binaria para distintos β

En el caso de las composiciones ternarias la comprensión de la cinética de transformación es más difícil debido a que en estos casos la señal de DSC está asociada a dos o más procesos superpuestos. Esto implica que para realizar un procesamiento adecuado se deben seguir metodologías adicionales de carácter experimental con el agregado de simulaciones numéricas que permitan separar cada uno de los procesos. Esto es imposible de realizar con la información experimental obtenida. Sin embargo, se puede asumir que los primeros pasos de la transformación registrada por calorimetría se deben a un único primer proceso y que la superposición con otros procesos ocurre posteriormente. Bajo esta hipótesis pueden modelarse los primeros pasos de cristalización para las tres composiciones estudiadas en este trabajo y construirse empíricamente los diagramas de transformación. Los diagramas TvCT (Temperatura - velocidad de Calentamiento - Transformación) y TTT (Temperatura - Tiempo - Transformación). Estos son determinados usando las siguientes expresiones [9]:

$$\beta(T, x) = \frac{R T^2 K_o \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right)}{E_a \left(\int_0^x \frac{dx}{f(x)}\right)} \quad (3)$$

$$t(T, x) = \left(\int_0^x \frac{dx}{f(x)}\right) \frac{\exp\left(\frac{E_a}{RT}\right)}{K_o} \quad (4)$$

Donde $f(x)$ es la función que indica el mecanismo de reacción de la transformación y K_o es el factor pre-exponencial de la constante de velocidad $K(T)$ en la ley de Arrhenius, que está dada por la siguiente ecuación [9]:

$$K(T) = K_o \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \quad (5)$$

En las ecuaciones (3) y (4) la integral de la función del mecanismo de reacción $f(x)$, que es en general desconocida, se determina experimentalmente usando que para una determinada velocidad de calentamiento β_1 elegida, la temperatura experimental T_1 corresponde a un valor de fracción transformada x_1 elegida (en este trabajo se utilizó $x_1 = 0,1$ y $\beta_1 = 40$ K/min). A tal efecto se empleó la siguiente relación:

$$\int_0^{x_1} \frac{dx}{f(x) K_o} = \int_0^{T_1} \frac{\exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right)}{\beta_1} dT \quad (6)$$

El miembro de la derecha se calcula numéricamente para poder determinar el miembro de la izquierda y utilizarlo en las ecuaciones (3) y (4).

En las ecuaciones (3), (4) y (6) la energía de activación fue determinada usando el método de múltiples barridos [9], para una fracción transformada de $x = 0,1$, aplicando la siguiente relación:

$$\ln\left(\frac{dx}{dt}\right) = C(x) - \frac{E_a}{RT}$$

(7)

Donde $C(x)$ es una constante si x se mantiene constante.

En la Figura 6, se muestran los diagramas de transformación TvCT y TTT para las tres composiciones en los primeros estadios de cristalización, así como los datos experimentales de calentamiento continuo.

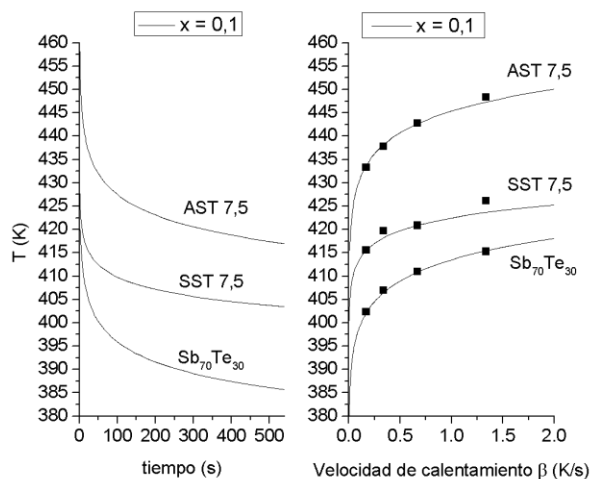


Figura 6: Diagramas de transformación TTT y TvCT para las tres composiciones estudiadas en las primeras etapas de cristalización ($x = 0,1$). También se indican los datos experimentales de calentamiento continuo.

Conclusiones

En este trabajo se analizó la evolución térmica de películas delgadas obtenidas por ablación láser de composiciones $Me_{7,5}(Sb_{70}Te_{30})_{92,5}$ (Me: Ag o Sn) y se las comparó con el binario $Sb_{70}Te_{30}$. El agregado de un tercer elemento metálico, Ag o Sn, genera un retraso en la temperatura de cristalización y un aumento de la energía de activación para la cristalización. Este hecho implica que el estado amorfo es más estable por lo que mejora las propiedades para las aplicaciones en memorias no-volátiles, ya que amplía su rango térmico.

Se calcularon los diagramas de transformación TTT y TvCT para las primeras etapas de la cristalización lo que permite predecir cómo se comportarán estas aleaciones para otras evoluciones térmicas diferentes a las realizadas en este trabajo.

Agradecimientos

Los autores agradecen a la Universidad de Buenos Aires y a la Agencia Nacional de Promoción Científica y Técnica por la financiación de la presente investigación.

Referencias

- [1] Liu G, Wu L, Zhu M, Song Z, Rao F, Song S, Cheng Y. (2017). The investigations of characteristics of Sb_2Te as a base phase-change material, *Solid State Electron*, 135, 31-36.

- [2] Wuttig M, Yamada N. (2007). Phase-change materials for rewriteable data storage. *Nature Materials*, 6, 824-832.
- [3] Xu J, Rao F, Song Z, Xia M, Peng C, Gu Y, Zhu M, Wu L, Liu B, Feng S. (2012). High speed phase change memory based on SnTe-doped Ge₂Sb₂Te₅ material. *Electrochem. Solid State Lett.* 15(3), H59-H61.
- [4] Rocca J, Bilovol V, Errandonea D, Gil Rebaza VA, Mudarra Navarro AM, Medina Chanduví HH, Errico LA, Arcondo B, Fontana M, Cuellar Rodríguez O, Ureña MA. (2019) Structural and Mössbauer study of (Sb_{0.70}Te_{0.30})_{100-x} Sn_x alloys with x = 0, 2.5, 5.0 and 7.5. *Journal of Alloys and Compounds* 795, 27-33
- [5] Bilovol V, Fontana M, Rocca J, Medina Chanduví HH, Mudarra Navarro AM, Gil Rebaza AV, Errico LA, Liang A, Errandonea D and Ureña MA. (2020). Structural, vibrational and electronic properties in the glass crystal transition of thin films Sb₇₀Te₃₀ doped with Sn. *Journal of Alloys and Compounds*, 845, 156307.
- [6] Ureña MA, Fontana M, Arcondo B, Clavaguera-Mora MT. (2003). Crystallization processes of Ag–Ge–Se superionic glasses. *Journal of Non Crystalline Solids*, 320 (1-3),151-167.
- [7] Rocca J, García JL, Ureña MA, Fontana M, Arcondo B (2019). Temperature dependence of electrical resistance in Ge-Sb-Te thin films. *Materials Research* 22(2), 1-7.
- [8] Kissinger HE (1957). Reaction Kinetics in differential thermal analysis. *Anal. Chem*, 29, 11, 1702–1706
- [9] Clavaguera N, Clavaguera-Mora MT, Fontana M. (1998). Accuracy in the Experimental Calorimetric Study of the Crystallization Kinetics and Predictive Transformation Diagrams: Application to a Ga-Te Amorphous Alloy. *Journal of Materials Research* 13, 3, 744-753.

Interacciones fluidodinámicas entre pacientes conectados a un dispositivo de ventilación mecánica compartida.

Pedro Garcia Eijo * ¹, Juan D'Adamo ¹, Arturo Bianchetti ¹,
Thomas Duriez ¹, Juan M. Cabaleiro ¹, Guillermo Artana ¹.

¹ *Laboratorio de Fluidodinámica, Facultad de Ingeniería, Universidad de Buenos Aires. CONICET. Buenos Aires, Argentina.*

Mail: pgarciae@fi.uba.ar

Se estudian en el presente trabajo aspectos fluidodinámicos del dispositivo de ventilación mecánica compartida denominado "Ampliación de la Capacidad del Respirador Artificial". En particular, se hace especial foco en la dinámica generada dentro del denominado tubo de bypass o compensador conectado entre las ramas inspiratorias y espiratorias de los circuitos pacientes. Este tubo se utiliza a los efectos de lograr evitar el disparo de alarmas de obstrucción en los sistemas de ventilación compartida. Como contraparte su uso podría aumentar el riesgo de contaminación cruzada entre pacientes. Tal riesgo desaparece si se incluye una válvula unidireccional en el circuito compensador. Sin embargo, esta última opción agrega componentes y complejidad al dispositivo. En este estudio se evalúa la posibilidad de suprimir esta válvula y se analizan las posibles interacciones para diferentes pares de pacientes. Para tal fin, se desarrolló un modelo 1D utilizando las librerías hidráulicas y mecánicas de Simulink y se consiguió su validación a través de ensayos experimentales de distintas condiciones de trabajo. Los resultados muestran que la posibilidad de flujo entre ramas depende particularmente de la diferencia entre las presiones máximas del ventilador y las presiones máximas inspiratorias de los pacientes. Cuanto menor sean dichas diferencias, menor será el riesgo. También, se observó una baja dependencia con los parámetros de los pacientes (resistencias y complianzas). Se comprueba entonces que una válvula unidireccional no es mandatoria ya que mediante el correcto dimensionamiento del tubo de compensación y adecuada operación del dispositivo, la contaminación cruzada es evitada.

Fluidynamic aspects of a shared mechanical ventilation device called ACRA are studied in the present work. In particular, special focus is placed on the dynamics generated within the bypass or compensator tube, connected between the inspiratory and expiratory branches of the ventilator. The aim of this tube is to avoid ventilator obstruction alarms in shared ventilation systems but its use could increase the risk of cross contamination between

patients. If a one-way valve is included in the compensating circuit this risk could be mitigated. However, this last option adds components and complexity to the device. In this study, the possibility of suppressing this valve is evaluated and the possible interactions for different pairs of patients are analyzed. For this purpose, a 1D model was developed using Simulink's hydraulic and mechanical libraries and its validation was achieved through experimental tests of different working conditions. Results showed that the possibility of flow between branches depends particularly on the difference between the maximum ventilator pressure and the maximum inspiratory pressures of the patients. The smaller these differences, the lower the risk. Also, a low dependence on the parameters of the patients (resistance and compliances) was observed. It is then verified that a unidirectional valve is not mandatory since by means of the correct sizing of the compensation tube and proper operation of the device, cross contamination is avoided.

Palabras clave: Ventilación mecánica compartida, dinámica exhalatoria, COVID 19 - Simulink

Introducción

La experiencia de la presente pandemia del COVID 19 nos enseña que los Sistemas de Salud de distintos países pueden llegar a colapsar ante situaciones críticas locales. En tales circunstancias, puede suceder que los centros de atención médica necesiten proveer respiración asistida a un número de pacientes superior a la cantidad de respiradores artificiales a disposición. En ocasiones, se precisará dar tiempo a la distribución adecuada de equipos de la red sanitaria. Otro factor que define a estas crisis es el número total de respiradores en toda una red nacional, que dado su elevado costo, puede ser limitado.

Como último recurso, se han propuesto soluciones denominadas de *respiradores compartidos* o bien de *ventilación dual*, tal como se estudió en el año 2000 [1] y fue reconsiderado más tarde por distintos autores[2],[3]. A lo largo del contexto de pandemia, varios países sufrieron escasez de recursos y se vieron obligados a tomar medidas de urgencia para optimizar el uso de respiradores. Surgieron así normativas para la implementación de la ventilación dual en Europa (protocolo CHRU, Brest, Francia, Comisión Ingeniería Médica y Sanitaria, Madrid, España) y en Estados Unidos (protocolos de hospitales de Nueva York). En este último, la Administración de Medicamentos y Alimentos autorizó el uso de emergencia en dispositivos que facilitaban el uso compartido de respiradores. De acuerdo con estudios previos (por ejemplo [4]) algunas Sociedades Médicas norteamericanas recomendaron en contra del uso de esta solución debido a problemas de seguridad, desafíos técnicos y éticos. Ante las situaciones límite que se atravesaron, sin disponibilidad de equipos, su propuesta fue seleccionar a los pacientes con mayores chances de supervivencia [5].

Las principales objeciones a la ventilación dual que aparecen en los documentos se pueden resumir: 1) incapacidad de controlar adecuadamente variables como volumen tidal (V_T) y presión positiva al final de la espiración (PEEP) para cada paciente; 2) ausencia de autonomía, dado que cambios en la mecánica respiratoria de un paciente afectaría adversamente al otro; 3) posibilidad de contaminación entre pacientes.

Estas legítimas observaciones son válidas a la hora de considerar circuitos que consisten en simples divisores del flujo, como los que se presentan en [6]. Al mismo tiempo, una cantidad importante de grupos multidisciplinarios en el mundo [7-10] acuerda en que las objeciones pueden superarse mediante la incorporación de válvulas adecuadas en las ramas de inspiración y espiración respectivamente.

Los sistemas de respiración compartida atendieron las objeciones y nuevos diseños, ensayados sobre pulmones mecánicos permitieron verificar que: 1) la presión de inspiración *pico* puede ajustarse a cada paciente; 2) válvulas PEEP ajustables permiten establecer valores distintos para cada paciente; 3) la curva de presión y volumen de respiración puede monitorizarse para cada individuo; 3) el sistema retiene las alarmas de alta presión y puede fijarse una señal de alarma para controlar el caudal de ventilación.

Aún con las mejoras, este tipo de sistema tiene sus condicionamientos: 1) modos de respiración limitados (el modo por control de presión es el más seguro; 2) los pacientes deben ser paralizados; 3) los parámetros como frecuencia de respiración y tasa de inspiración-espriación deben compartirse; 4) no se han desarrollado aún métodos para individualizar la fracción de oxígeno; 5) se incrementa el volumen compresible del sistema; 6) aumenta el riesgo de situaciones de auto PEEP (flujo de aire al fin de la exhalación) 7) uso fuera de norma de los ventiladores mecánicos e incremento de la complejidad del circuito de respiración; 8) Un tubo extra de dimensiones reducidas denominado *bypass* o compensador debe ser incorporado de manera adicional entre las salidas de inspiración y espiración del ventilador estabilizando el funcionamiento del mismo al prevenir la activación indebida de la alarma identificatoria de oclusiones. Este tubo procura compensar las presiones entre la rama inspiratoria y espiratoria de modo tal que no exista durante la inspiración una diferencia entre ambas ramas. Una diferencia significativa entre el registro de los sensores de presión ubicados en ambas ramas del ventilador puede ser interpretada como una oclusión en el circuito y provocar el disparo de una alarma o la eventual búsqueda de corrección a través del lazo cerrado de control. En este último caso el funcionamiento del ventilador se puede volver inestable. En este contexto, desarrollamos nuestra propuesta de ventilación dual denominada "ACRA" (Ampliación de la Capacidad del Respirador Artificial) que funciona con un respirador seteado en el modo de presión controlada y que provee presiones inspiratorias individualizadas y control del PEEP para dos pacientes. En un trabajo previo [11], realizamos el estudio experimental y de determinación de modelos numéricos para el dispositivo. Los modelos nos permitieron caracterizar con detalle el comportamiento bajo distintas condiciones de trabajo.

En este trabajo, abordamos en particular aspectos relacionados a la posibilidad de contaminación cruzada entre pacientes. Este riesgo toma lugar debido a la incorporación del tubo compensador para asegurar un funcionamiento confiable [13,14]. Para lograr compensar las presiones se debe procurar por diseño que los flujos involucrados sean prácticamente nulos en la dirección indeseada.

En este contexto se analiza la efectiva necesidad de incorporar una válvula unidireccional en el circuito compensador que anula directamente la posibilidad de flujos cruzados indebidos. El estudio complementa anteriores caracterizaciones realizadas en [11], y contribuye a un uso racional y cuidadoso del dispositivo pensado para situaciones de emergencia sanitaria.

Métodos

Se realizaron pruebas experimentales y numéricas para estudiar los efectos producidos al incorporar un tubo entre la rama inhalatoria y exhalatoria de un ventilador mecánico cuando el mismo es utilizado en conjunto con un dispositivo de ventilación compartida.

Presentamos en esta sección el set-up de laboratorio utilizado para relevar distintas medidas experimentales. Luego, se introduce el modelo numérico utilizado para estudiar la influencia del tubo compensador. Por último, se realiza la validación y calibración del mismo comparando los resultados numérica y experimentalmente.

Dispositivo experimental

Los datos experimentales de ventilación dual se adquirieron utilizando la interface "ACRA" conectada a un ventilador mecánico en modo de presión controlada. Se utilizaron dos pulmones de prueba ACCU LUNG (Fluke Biomedical) y dos pulmones SmartLung 2000 (análisis IMT) para imitar a los pacientes. Además, las medidas de presiones y caudales se obtuvieron a través de un sensor de Placa Orificio y un monitor FluxMed (MBMed). En la Figura 1 se muestra un diagrama simplificado de la configuración experimental.

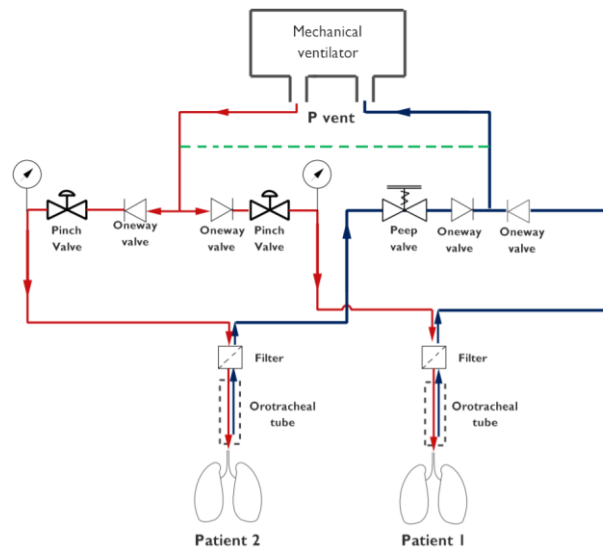


Figura 1: Esquema unifilar del dispositivo experimental. Los circuitos de inspiración y expiración están coloreados en rojo y negro respectivamente. Una línea verde discontinua representa un tubo de compensación de pequeño diámetro.

Modelo numérico

El modelo numérico que se describe a continuación nos permitió realizar diferentes ensayos midiendo en detalle las diferentes etapas en las cuales el flujo ocurre en el tubo compensador y determinar el impacto del mismo dentro del esquema de un dispositivo de ventilación mecánica compartida. El modelo numérico fue desarrollado en Matlab Simulink utilizando bibliotecas hidráulicas y mecánicas. El código utilizado se encuentra disponible en [<https://github.com/ACRA2020>]. En la Figura 2, se presenta el diagrama de bloques considerado. Nuestro esquema utiliza el esquema de un dispositivo ACRA, pero se puede adaptar fácilmente a otro circuito de ventilación dual. El mismo está compuesto por: (a) el ventilador, (b) las partes del circuito común: tubo inspiratorio, tubo expiratorio y tubo de compensación, (c) el circuito de flujo inspiratorio individualizado, (d) el circuito de flujo espiratorio individualizado, y (e) los modelos de pulmones del paciente 1 y 2.

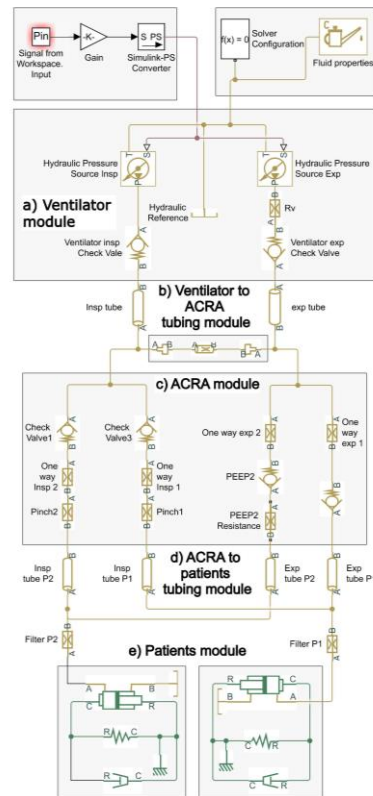


Figura 2: Esquema en Simulink del circuito ACRA.

A continuación, se describen las partes en detalle:

(a) Módulo ventilador: las propiedades del fluido y una señal de presión periódica definen dos fuentes de presión hidráulica, que dan cuenta de las fases inspiratoria y exhalatoria. La señal de entrada consta de una función subamortiguada para la inspiración y una función tipo sigmoidea para la exhalación respectivamente.

b) Ventilador a ACRA: Para hacer compatible el funcionamiento de Dispositivo ACRA con cualquier Ventilador, se introduce un tubo de silicona flexible (tubo compensador) entre las ramas de inspiración y espiración. Su diámetro y longitud son $D = 6$ mm y $L = 15$ cm respectivamente. El tubo es modelado utilizando un elemento Resistivo Hidráulico en el cual las pérdidas de carga son computadas utilizando la ecuación de Darcy. Por otro lado, las tabuladoras del circuito son modeladas con Tuberías Hidráulicas que incorporan, no solo pérdidas de carga, sino también interacción fluido-estructura considerando valores típicos de complianza en las tabuladoras de 1 mL/cmH₂O [14]. Además, la longitud y el diámetro interno de los tubos utilizados en este módulo son $L = 1$ m y $D = 20$ mm respectivamente.

(c) Módulo ACRA: una bifurcación del circuito inspiratorio del ventilador dentro del ACRA divide al flujo en dos ramas diferentes. Cada rama tiene una válvula unidireccional para forzar el sentido de flujo y una válvula Pinch controla el caudal. Las pérdidas de presión generadas por estos elementos se calculan utilizando una resistencia local, tal que: $\Delta P_i = K_i V_{Li}^2$. Donde K_i es el coeficiente local de pérdida de carga determinado experimentalmente. El circuito exhalatorio es similar al inspiratorio. La diferencia entre ellos radica en la presencia de una PEEP externa o válvula de umbral (modelada con una válvula de retención) la cual se utiliza para controlar el valor de PEEP del paciente 2. La pérdida de

carga asociada a dicha válvula PEEP es modelada como una pérdida localizada. El valor de K_{PEEP} es determinado en forma experimental.

(d) Módulo de tubería ACRA para pacientes: este módulo es similar al módulo que va desde el Ventilador hacia el ACRA. La longitud y el diámetro interno de Las tabuladoras utilizadas en este módulo son $L = 1$ m y $D = 20$ mm respectivamente.

(e) Módulo de Pacientes: Un sistema mecánico que consta de un resorte, un amortiguador y un pistón se utilizó para representar los pulmones de los pacientes 1 y 2, respectivamente.

Es importante mencionar que el modelo permite incorporar elementos no lineales, atendiendo a las particularidades mecánicas respiratorias. La posición y la velocidad del pistón (parámetros mecánicos) corresponden al desplazamiento de volumen y caudal en el circuito hidráulico.

En la Figura 3, se muestra la validación del modelo con resultados típicos para pruebas realizadas para dos Driving Pressures diferentes, 20 y 10 cm H₂O. Se confirma una notable concordancia entre los datos obtenidos con el modelo y las medidas.

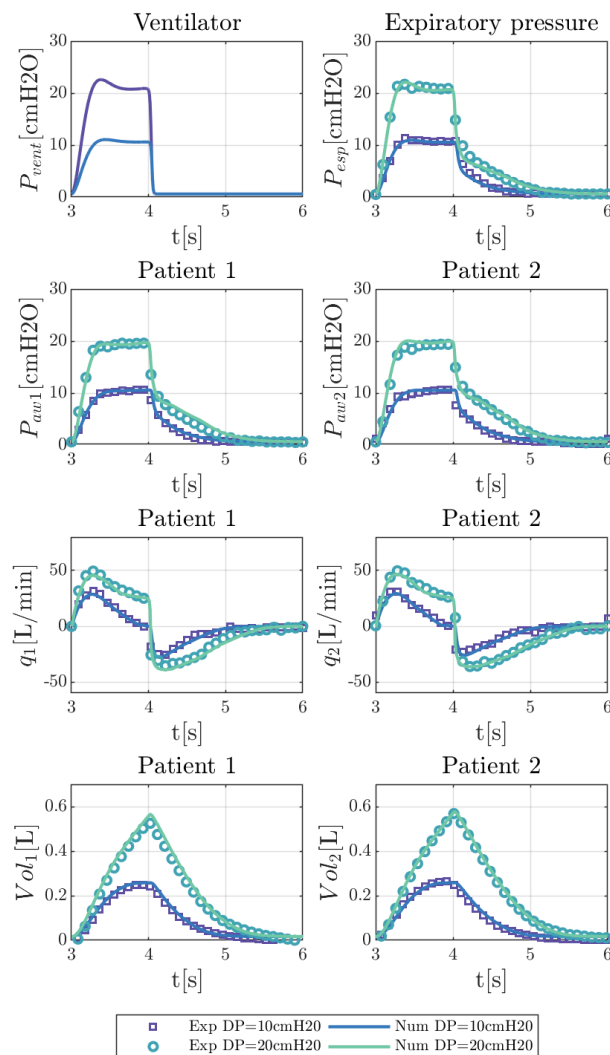


Figura 3: Test de validación para dos driving pressures diferentes.

Resultados y discusión

En esta sección se estudia la dinámica que ocurre en el circuito compensador en cada ciclo respiratorio y se evaluará la posibilidad de contaminación cruzada entre pacientes. En una primera etapa se presentan los resultados obtenidos para un caso base de pacientes típicos iguales. Luego, se presenta un mapeo con el fin de analizar los resultados para diversas condiciones de presiones pico inspiratorias (PIP) y pacientes disímiles.

Análisis de situación típica:

Para esta primera parte, los parámetros a utilizar en nuestro modelo son:

$$R_1 = R_2 = 5 \text{ cm H}_2\text{O (L/s)}^{-1}, C_1 = C_2 = 35 \text{ mL (cm H}_2\text{O)}^{-1}, PEEP_1 = PEEP_2 = 5 \text{ cm H}_2\text{O},$$

$$P_{MAX} = 32 \text{ cm H}_2\text{O},$$

$$DP_1 = 15 \text{ cm H}_2\text{O},$$

$$t_{ins} = 1 \text{ s},$$

$$BR = 18 \text{ min}^{-1}$$

Donde, R son los valores de resistencias y C las complianzas de cada paciente. Pmax representa la presión máxima alcanzada por el ventilador y DP corresponde a las driving pressures utilizadas para cada paciente. tins corresponde al tiempo de inspiración y BR al ritmo respiratorio.

En la Figura 4 se presenta un recorte de la Figura 1 detallando las ramas que entran y salen del tubo compensador para 4 etapas diferentes dentro de un mismo ciclo respiratorio. En la parte inspiratoria, se nombra Vent Insp a la rama inspiratoria del ventilador, CC Insp al nodo inspiratorio del tubo compensador y ACRA Insp a la rama inspiratoria de entrada al dispositivo ACRA. De la misma forma, se procede a nombrar la rama exhalatoria.

También, se presentan flechas que representan las direcciones de los flujos en cada una de las ramas para cada una de las etapas. Para comprender las direcciones de las flechas mostradas es necesario ver la Figura 5. En la Figura 5a, se detallan los flujos que circulan por cada una de las ramas que rodean al bypass y en la Figura 5b el flujo que atraviesa el tubo compensador. Las leyendas de la Figura detallan el origen del flujo y hacia dónde se dirige. Por ejemplo: Ventl-CCI, indica: Flujo desde la inspiración del ventilador hacia el nodo del circuito inspiratorio.

En la figura 5c, se presenta la curva tipo de presión del ventilador utilizada como input en el modelo, la presión alveolar del paciente 1 y la presión alveolar del paciente 2. Las presiones picos de cada uno de los pacientes es regulada mediante las posiciones de las Pinch Valves correspondientes.

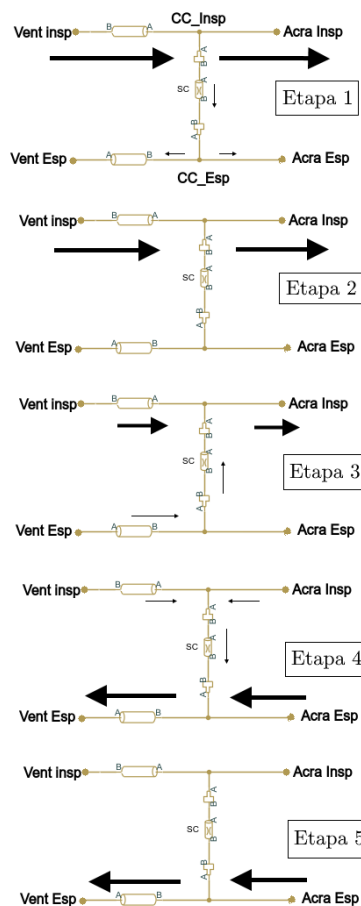


Figura 4: Detalle de dirección de flujos que rodean al tubo compensador.

Descripción detallada de las etapas

Para describir cada una de las etapas se utiliza la Figura 5a, 5b y 5c. Además, en esta sección se explican las direcciones de los flujos esquematizados en la Figura 4 para cada una de las etapas.

1) La etapa n°1 corresponde a la fase inspiratoria. La amplia mayoría del flujo pasa del ventilador hacia los pacientes. Sin embargo, debido a que las tubuladuras son flexibles parte del flujo principal se utiliza para llenar los tubos de las ramas exhalatorias, generando un flujo desde la inspiración hacia la exhalación en el tubo compensador. Finalizado el llenado de dichos tubos, se inicia la etapa n°2.

2) La etapa n°2 corresponde, al igual que la anterior, a la fase inspiratoria y en este caso, todo el flujo que sale del ventilador se dirige hacia los pacientes. No hay flujo a través del tubo compensador.

3) La etapa n°3 comienza cuando se inicia el descenso de la presión del ventilador. En esta etapa, los tubos en las ramas exhalatorias presurizados en la etapa n°1 se vacían generando un flujo desde las ramas exhalatorias hacia las ramas inhalatorias. El flujo en el circuito compensador alcanza su valor mínimo (ver Figura 5b) cuando la presión del ventilador se iguala a la presión alveolar del paciente con mayor presión máxima de inspiración (en este caso el paciente 2). Luego, el flujo comienza a reducirse hasta volver a

cero instantes antes de que la presión alveolar del otro paciente (en este caso el paciente 1) iguale la presión del ventilador.

4) Cuando la presión del ventilador alcanza un valor intermedio entre ambas presiones alveolares, ocurre el inicio de la fase exhalatoria y comienza la etapa n°4 (ver Figura 4c). En este caso, las tubuladuras de la rama inhalatoria que se encontraban presurizadas comienzan a vaciarse haciéndolo a través del tubo compensador y enviando aire fresco hacia el puerto exhalatorio del ventilador.

5) Finalmente, una vez que la presión del ventilador se estabiliza en el valor de PEEP se produce el vaciado normal de los pulmones sin flujo en el tubo compensador.

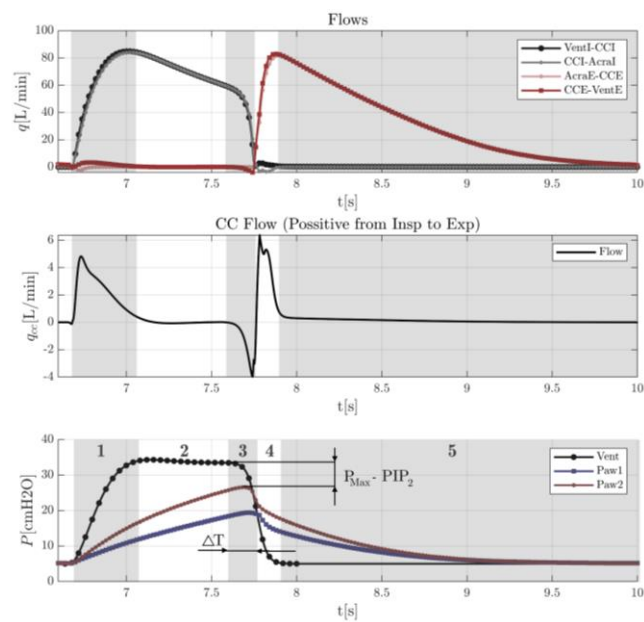


Figura 5: a) Flujos en cada una de las ramas mostradas en la Figura 4. b) flujo en la rama del tubo compensador. c) Presión de ventilador, presión alveolar 1 y presión alveolar 2.

Debido a que la posibilidad de contaminación cruzada ocurre cuando existe un flujo proveniente de la exhalación hacia la inspiración, la etapa 3 es de importante interés. En dicha etapa, el volumen desplazado de aire surge de integrar el área bajo la curva de flujo del tubo compensador para dicho intervalo. Si se define la variable R como el cociente entre el volumen desplazado y el volumen del tubo del tubo compensador $\rho = Vol_{CC}/Vol_{SC}$, cuando dicho ratio supere a la unidad, habrá aire contaminado en las ramas inspiratorias. A pesar de que dicho aire es luego barrido en la etapa 4 cuando las tubuladuras inspiratorias se despresurizan, es importante que la dimensión de dicho tubo genere un ratio ρ inferior a la unidad para evitar la contaminación cruzada.

En función de esto, y con el objetivo de generalizar los resultados para diversas combinaciones de pacientes y presiones, se propone definir los ratios R_2/R_1 y C_2/C_1 y realizar un mapeo donde para cada cociente se calcule el valor de ρ . Se toma como referencia los parámetros del paciente 1 con $R_1 = 5 \text{ cm H}_2\text{O (L/s)}^{-1}$; $C_1 = 35 \text{ mL (cm H}_2\text{O)}^{-1}$.

Además, en lo que respecta a las presiones, se mantienen constantes los valores de presión máxima del ventilador, y PEEP y Driving Pressure del paciente 1. Para la construcción de cada mapeo se fija una presión inspiratoria pico del paciente 2 (PIP₂). Luego, se realiza un ensayo para cada valor de resistencia 2 y complianza 2 que varían entre 2 y 8 $\text{cm H}_2\text{O} (\text{L/s})^{-1}$ y 27.5 y 42.5 $\text{mL} (\text{cm H}_2\text{O})^{-1}$ respectivamente. Luego, para cada ensayo, se calcula el Ratio ρ . Finalmente, utilizando un gráfico de contorno coloreado se grafica el Ratio ρ en función del cociente R_2/R_1 y C_2/C_1 para 3 valores de PIP₂ (3 mapeos diferentes) presentados en la Figura 6. A partir de los resultados obtenidos, se observa que los cocientes R_2/R_1 y C_2/C_1 generan variaciones en los ratios inferiores al 25%. En cambio, se observa que variaciones en las presiones pico del paciente 2 generan un alto impacto en el ratio ρ . En este caso, a medida que la diferencia entre la Pmax del ventilador y la presión pico inspiratoria PIP₂ aumenta, también lo hace de manera notoria el ratio ρ .

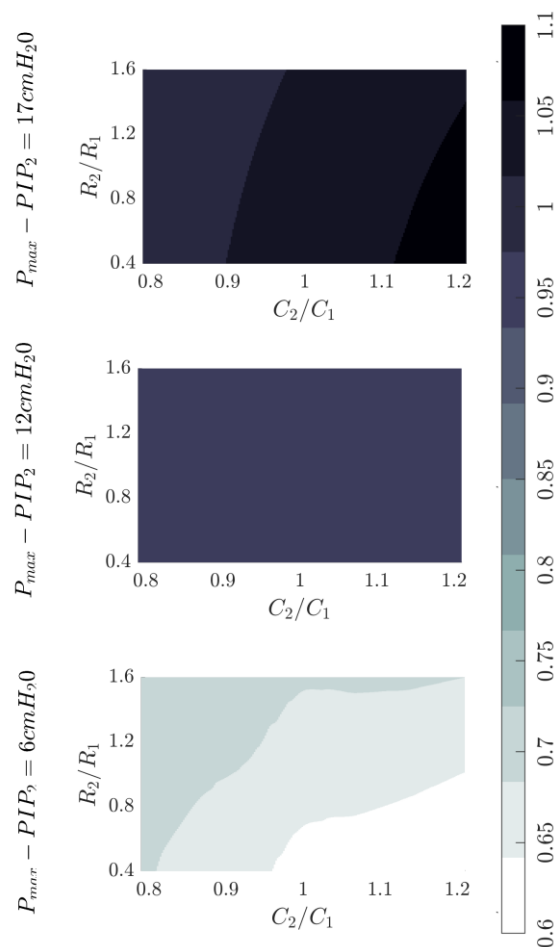


Figura 6: Mapeo de ratios ρ para diferentes combinaciones de pacientes y presiones.

Conclusiones

Hemos presentado en el presente trabajo las características principales de la dinámica de un sistema de ventilación dual. A partir de un modelo simple, se identifican los parámetros adimensionales que son relevantes para definir los requisitos respiratorios y las condiciones para dos pacientes conectados a un respirador a través de la interfaz ACRA. Se trata de un modelo unifilar cuya implementación numérica fue validada a través de experimentos en laboratorio. En particular, caracterizamos el fenómeno del flujo en el conducto compensador del sistema. Una condición para garantizar un uso seguro del dispositivo es establecer la presión del ventilador de modo tal que la diferencia de presiones entre la presión del

respirador y la presión inspiratoria de al menos uno de los pacientes no supere el umbral de 5 cmH₂O. En tales condiciones el sistema no requiere de una válvula adicional en el circuito de bypass y el riesgo de contaminación cruzada es prácticamente nulo.

Referencias

1. Darowsk, Mi and Englisz, M, Artificial ventilation of the lungs for emergencies. *Frontiers of medical and biological engineering*, 10:177–183, 2000.
2. Srinivasan, S, Ramadi, K.B., Vicario, F, Gwynne, D, Hayward, A, Langer, R, Frassica, J J, Baron, R B and Traverso, G, Individualized system for augmenting ventilator efficacy (isave): A rapidly deployable system to expand ventilator capacity. [Preprint] *bioRxiv*, 2020.
3. Kheyfets, V, Lammers, S, Wagner, J, Bartels, K and Smith, B, PEEP/FIO₂ ARDSNet scale grouping of a single ventilator for two patients: Modelling tidal volume response. *Respiratory Care*, 65:1094–1103, 2020
4. Branson, R and Rubinson, L, A single ventilator for multiple simulated patients to meet disaster surge. *Academic emergency medicine : official journal of the Society for Academic Emergency Medicine*, 13:1352–1353, 2007.
5. Single ventilator use to support multiple patients. ECRI, *Clinical Evidence Assessment*, 2020.
6. Neyman, G and Babcock Irvin, C., A single ventilator for multiple simulated patients to meet disaster surge. *Academic emergency medicine*, 13:1246–1249, 2006.
7. Herrmann, J, Cruz, A, Hawley, M, Branson, R and Kaczka, D, Shared ventilation in the era of covid-19: A theoretical consideration of the dangers and potential solutions. *Respiratory Care*, 65:932–945, 2020.
8. Clarke, A. L., Stephens, A. F., Liao, S., Byrne, T. J. and Gregory, S. D., Coping with covid-19: ventilator splitting with differential driving pressures using standard hospital equipment, *Anaesthesia*, 75: 872–880, 2020.
9. Han, J S, Mashari, A, Singh, D, Dianti, J, Goligher, E, Long, M, Ng, W, Wasowicz, M, Preiss, D and Vesely, A, Personalized ventilation to multiple patients using a single ventilator: Description and proof of concept. *Critical Care Explorations*, 2:e0118, 2020.
10. Solís-Lemus, J A, Costar, E, Doorly, D, Kerrigan, E C, Kennedy, C H, Tait, F, Niederer, S, Vincent, P E, and Williams, S E, A simulated single ventilator/dual patient ventilation strategy for acute respiratory distress syndrome during the covid-19 pandemic. *Royal Society Open Science*, 7:200585, 2020.
11. *García Eijo, P. M., D'Adamo, J., Bianchetti, A., Duriez, T., Cabaleiro, J. M., Irrazabal, C., ... & Artana, G. (2021). Exhalatory dynamic interactions between patients connected to a shared ventilation device. Plos one, 16(5), e0250672.*
12. *Inline Positive End-Expiratory Pressure Valves: The Essential Component of Individualized Split Ventilator Circuits. Critical Care Explorations, 2020.*
13. *Pressure-Regulated Ventilator Splitting (PReVentS) – A COVID-19 Response Paradigm from Yale University. MedRxiv, 2020.*
14. Verheecke, G and Gilbertson, A, Compliance of the tubing compartment of lung ventilators. *Intensive care medicine*, 7:309–310,

36

Análisis de Estrategias de Transferencia Tecnológica en Argentina y América Latina

Willson, Victoria; Caracciolo Néstor;
Boeykens Susana Patricia

*Laboratorio de Química de Sistemas Heterogéneos (LaQuíSiHe), Instituto de Química Aplicada a la Ingeniería (IQAI), Facultad de Ingeniería de la Universidad de Buenos Aires. Av. Paseo Colón 850, C1063ACV, CABA, Argentina.
e-mail: vwillson@fi.uba.ar*

Resumen

Por su desarrollo y contexto geopolítico, social y económico del último siglo, América Latina ha pasado por grandes dificultades y desafíos para aumentar y valorizar su desarrollo tecnológico, dificultades cuyas secuelas aún hoy se evidencian en la mayoría de los países de la región en términos de gestión del conocimiento y transferencia tecnológica. El objetivo de este trabajo es analizar estrategias de transferencia tecnológica en América Latina, haciendo hincapié en el contexto argentino, para identificar las prácticas más idóneas para la actualidad y la coyuntura regionales. Mediante una revisión sistemática de la literatura existente, se analizaron artículos de revistas indexadas, documentos de redes científicas, informes y publicaciones de entidades nacionales, datos estadísticos de organizaciones mundiales, entre otros, para luego contrastarlos con los diferentes resultados obtenidos para la región estudiada en materia de desarrollo y transferencia tecnológicos respecto a cada recurso o estrategia utilizados. Se concluye que el enfoque regional en primera instancia deberá estar más orientado hacia el fortalecimiento de las oficinas de vinculación, la calidad de su infraestructura y las políticas adaptadas a cada país por sobre el enfoque cuantitativo como lo son las prácticas basadas exclusivamente en la generación de patentes. También se elaboran conclusiones sobre la vinculación entre la universidad, la empresa y el Estado en un escenario como el argentino.

Abstract

Due to its development and geopolitical, social and economic context of the last century, Latin America has gone through great difficulties and challenges to increase and value its technological development; difficulties whose consequences are still visible today in most countries of the region in terms of knowledge management and technology transfer. The objective of this work is to analyze technology transfer strategies in Latin America, focusing

on the Argentine context, to identify the most suitable practices for the current regional situation. Through a systematic review of the existing literature, articles from indexed journals, documents from scientific networks, reports and publications of national entities, statistical data from world organizations, among others were analyzed and then compared with the different results obtained for the region studied in technology development and transfer matter regarding each resource or strategy used. It is concluded that the regional approach at a first instance should be more oriented towards the strengthening of the technology transfer offices, the quality of their infrastructure and the public policies adapted to each country over the quantitative approach, such as practices based exclusively on the generation of patents. Conclusions are also drawn on the link between university, companies and the State in Argentine technology transfer scene.

Palabras clave: transferencia tecnológica, desarrollo latinoamericano, vinculación universidad empresa-estado.

Introducción

Pasado el período de segunda posguerra, la transferencia de conocimientos técnicos y científicos que se habían producido a raíz del enfrentamiento bélico generaron un significativo debate como consecuencia de los progresos industriales y posindustriales que ya en tiempos de paz se dirigieron a la elaboración de productos y la prestación de servicios. El conocimiento generado por los países triunfantes, en especial

Estados Unidos, produjo un avance significativo en las comunicaciones, la producción industrial y tecnológica; un fenómeno que se dio en llamar revolución científica-tecnológica o tecnocrónica. Esta se expandió, especialmente, a los países europeos y Japón. En efecto, hacia los años '70, las regiones globalmente más desarrolladas eran Norteamérica, Europa Occidental y Japón [1].

El gran interrogante dentro del debate se centraba en entender cuál sería, en adelante, el principal factor de crecimiento económico de los países, o en qué medida este desarrollo se difundiría a escala global. Evidentemente el desarrollo ya no provenía solamente ni de la acumulación de capital ni de la de recursos humanos. El factor tecnológico se había convertido en el principal generador de la riqueza de las naciones. Por eso mismo era necesario que el Estado organizase, a través de prácticas, planes y concertaciones entre los miembros de la comunidad científica, empresarial y la burocracia estatal, las medidas que se tomarían para encauzar el progreso devenido de este desarrollo científico y técnico. De esta forma se dio el nacimiento de la política científica [2].

No obstante, el desarrollo tecnológico no se difundió de la misma manera en todo el mundo. Los países latinoamericanos manifestaron un significativo atraso con respecto al desarrollo de su política científica. Esto fue también debatido por una extensa literatura. En líneas generales, el círculo vicioso del subdesarrollo también se hacía presente en el campo tecnológico [3] y Latinoamérica seguía siendo fundamentalmente productora de materias primas. A pesar del comienzo de su proceso de industrialización a principios del siglo XX, este desarrollo fue dirigido a la producción de sustitutos de importación, básicamente, industria liviana que constaba de recursos humanos de poca calificación. En la medida en que las demandas por productos de mayor valor agregado, como las comunicaciones, los fármacos, las maquinarias, entre otros, se hicieron más necesarias, el mercado latinoamericano se hizo más dependiente de la producción de tecnología extranjera y se recluyó hacia los tímidos intentos de desarrollo local en universidades y centros de investigación. En las empresas multinacionales, los productos innovadores se importaron de las casas matrices y el sistema científico y técnico local se limitó a la

adaptación de esas tecnologías [4].

En otras palabras, la subordinación continuó siendo igual. Aunque los países latinoamericanos ya no dependían de los productos manufacturados ni de algunos productos de capital, la producción de alta tecnología local todavía era muy incipiente y solo se podía llevar a cabo a través de una fuerte política científica que encauzara los esfuerzos mancomunados de la academia, el Estado y las empresas.

En los años '60, a partir de las conceptualizaciones sistémicas que ofrecen el Triángulo de Sábato [5] y la Triple Hélice [6], se explicaron la vinculación universidad, empresa y Estado o el triángulo de relaciones entre ciencia y tecnología, estructura productiva y Estado. La idea de estos científicos de las ciencias duras y las ciencias sociales, Sábato y Botana, que pertenecían a lo que se dio en llamar la Escuela de Pensamiento Latinoamericano en Ciencia, Tecnología, y Desarrollo [7], era que el conocimiento generado en la universidad no podía estar separado del mundo productivo y que el Estado debía fomentar esta vinculación. Era ineludible que las tres instituciones debían unirse para lanzar el desarrollo de los países de la región. Esto comenzó a realizarse en América Latina y tuvo como beneficiarios a los países líderes del momento: Argentina y Brasil, especialmente a través de la inversión pública.

A partir de los años '80, la confirmación de que la universidad, la empresa y el Estado no podían convertirse en compartimentos estancos que obraran autónomamente fue reformulándose con la aparición de las teorías que referían a la sociedad del conocimiento [8].

Si bien en aquel momento aún se conservaban capacidades para producir y dar servicios en Latinoamérica, la corriente neoliberal de los 90 produjo un desmantelamiento de esas capacidades, quedando las actividades de I+D confinadas en buena medida a las universidades.

En este contexto, las universidades latinoamericanas –que, siguiendo a Sábato, pueden ser concebidas como fábricas de tecnologías–, se enfrentan ante el desafío de operar en contextos locales de débil absorción de los resultados de investigación, siendo principalmente las empresas transnacionales las que explotan la difusión de los conocimientos, fenómeno que hemos denominado como transferencia tecnológica ciega [9].

Desde hace algunas décadas se inició una discusión teórica sobre el papel del conocimiento como motor del desarrollo de una sociedad. En ese sentido, se develaba que la riqueza de una nación no dependía de su desarrollo tecnológico per se, sino de la evolución del conocimiento de esa sociedad. El conocimiento producía trabajadores y profesionales calificados, desarrollo de nuevas tecnologías, reingeniería gerencial y descubrimientos científicos que podían ser utilizados para la creación de nuevos productos [10].

El interés por analizar América Latina se ve incrementado por la heterogeneidad que caracteriza la senda seguida por la región en materia de innovación, que se hace palpable en el ámbito de la apertura, la estructura industrial y las capacidades de absorción. Estos aspectos trascienden lo estrictamente económico y quedan indisolublemente unidos tanto a las estrategias como a las decisiones y puesta en práctica de las políticas [11].

Aunque no es objeto de este trabajo definir la transferencia de tecnología, se entiende esta actividad como un proceso complejo en el que personas, valores, conocimientos y artefactos fluyen entre quienes producen y utilizan la tecnología. Este es el marco desde el que se intenta comprender los modos en los que las universidades latinoamericanas (y como caso particular, las argentinas) proponen nuevos arreglos institucionales para abordar los cambios que la sociedad del conocimiento trae aparejados, que se constituyen

en intermediarias entre los distintos elementos pertenecientes a los entornos que componen el sistema de innovación y que podemos concebir como Oficinas de Transferencia Tecnológica (OTT) [12].

Luego de lo expuesto, el objetivo de este trabajo es analizar estrategias de transferencia tecnológica en América Latina, haciendo hincapié en el contexto argentino, para identificar aquellas más idóneas para la actualidad y la coyuntura regionales.

Desarrollo

Mediante una revisión sistemática de la literatura existente, se analizaron artículos de revistas indexadas, documentos de redes científicas, informes y publicaciones de entidades nacionales, entre otros, para luego contrastarlos con los diferentes resultados obtenidos para la región estudiada en materia de desarrollo y transferencia tecnológicos respecto a cada recurso o estrategia mencionados.

La vinculación entre la universidad y el sector productivo en América Latina

El desarrollo de las universidades en América Latina presenta un conjunto de matices diferenciadoras respecto al de los países desarrollados, en los que las universidades han tenido una tradición más dilatada y una vinculación más fuerte con el sector productivo. En la región, la evolución de la universidad que se deriva del Movimiento de Reforma Universitaria (MRU) de la primera mitad del siglo XX coadyuvó a la redefinición de sus funciones de formación e investigación, y extensión, apostando por una mayor contribución hacia la resolución de las problemáticas sociales [12].

La escasa demanda de conocimiento científico y tecnológico por parte del sector productivo ha sido identificada como uno de los factores fundamentales que han dificultado la utilización de la política científica y tecnológica como instrumento de desarrollo en la región [2].

Algunos de los modelos generalmente utilizados para analizar y promover la interrelación entre la academia, el sector productivo, y el sector social y gubernamental, se han concebido y son reflejo de realidades propias de los países industrializados, y no necesariamente reflejan la realidad latinoamericana [13].

Si bien ha habido un modelo de política de ciencia, tecnología e innovación (CTI) para la región, que en buena medida responde a las recomendaciones de los organismos internacionales, los países han seguido diferentes dinámicas en su diseño e implementación, y han mostrado distintos grados de independencia con respecto a esas recomendaciones [14]. A pesar de que ha habido mucha experimentación, los programas ejecutados representan fundamentalmente adaptaciones de programas exitosos en otras regiones, que fueron diseñados para diferentes condiciones iniciales, con una composición más equilibrada de los actores. Las especificidades y características estructurales, económicas y sociales, y los sistemas políticos de la región, no han sido suficientemente tenidos en cuenta.

Perfiles de desarrollo de los países de América Latina

Los autores Dutrénit, Natera, Puchet y Vera Cruz [15] realizaron un análisis de los perfiles de desarrollo de los países de América Latina, desde 1970 hasta 2010. Para ello, partieron de una caracterización que comprende distintas dimensiones de sus Sistemas Nacionales de Innovación (SNI), y en la que no solo se consideran las características tecnoeconómicas,

sino que además se introduce la evolución de las variables sociopolíticas como una esfera igualmente importante. De esta manera, se presentan tres perfiles diferenciados:

Perfil I. Con sesgo hacia lo tecnoeconómico, carente de desarrollo sociopolítico: México, Brasil y Chile. Estos países están sesgados hacia indicadores tecnoeconómicos en los que la productividad laboral tiene un impacto positivo en el PIB per cápita, y carece de una presencia de la dimensión sociopolítica (poco impacto positivo de estos indicadores en el PIB per cápita).

Perfil II. Con sesgo hacia el desarrollo sociopolítico, carente de lo tecnoeconómico: Guatemala, Ecuador, Paraguay y Perú. Los países se inclinan hacia una influencia positiva de lo sociopolítico, pero con un bajo impacto de estos indicadores en el PIB per cápita, y carecen de una presencia favorable de la dimensión tecnoeconómica.

Perfil III. Sistemas más equilibrados: Uruguay, Costa Rica, Argentina, Colombia y Panamá. Países con sistemas más equilibrados entre ambas esferas. Tienen el mejor desempeño en términos de crecimiento en el PIB per cápita.

Caracterización y análisis del SNI argentino

Actualmente en Argentina el SNI opera en tres niveles de roles funcionales, que simplificados son representados por: a) el nivel de formulación de políticas, en el que el MINCyT es el principal actor, b) el nivel de promoción, en el que se encuentran el Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET) y la Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica (ANPCyT), y c) en el tercer nivel, de ejecución de proyectos y programas científicos y tecnológicos están diferentes grupos de instituciones del sistema científico y tecnológico, entre las que se encuentran las universidades, las empresas, instituciones públicas autárquicas dependientes de otros ministerios, el CONICET a través de sus institutos y grupos de I+D, etc. En el nivel de promoción, con la puesta en marcha de la ANPCyT se dio un paso importante en el ordenamiento de los instrumentos de fomento a la innovación que se encontraban dispersos en distintas dependencias públicas y la generación de nuevos instrumentos de promoción científica y tecnológica. Así se dio origen a cuatro fondos de financiamiento dependiente de la ANPCyT: el Fondo para la Investigación Científica y Tecnológica (FONCyT), el Fondo Tecnológico Argentino (FONTAR), el Fondo Fiduciario de Promoción de la Industria del Software (FONSOFT) y el Fondo Argentino Sectorial (FONARSEC). Cada uno de estos fondos tiene por objetivo financiar actividades científicas, de desarrollo tecnológico y de innovación a través de mecanismos de competencia de proyectos por calidad y pertinencia. La búsqueda de desarrollo de un SNI en Argentina se sintetizó en la reorganización del sistema científico y tecnológico, la creación de nuevos mecanismos e instrumentos de fomento a la innovación y la incorporación de nuevos actores al sistema (especialmente las empresas).

A través de un exhaustivo estudio de las OTT de universidades nacionales argentinas, Malizia [16] ayuda a describir sus diferentes aspectos respecto a financiamiento, estructura, mecanismos de gestión, entre otros. Los resultados indican, en primer lugar, que el 77% de las OTT de universidades nacionales tienen estructuras de menos de 10 personas (7 personas promedio): 62% profesionales y 38% administrativo. Es decir, se trata de estructuras relativamente pequeñas y de carácter técnico profesional. En segundo lugar, los distintos mecanismos utilizados para gestionar formalmente la relación entre el sector científico tecnológico y el productivo se centran en acuerdos contractuales (de I+D, de servicios técnicos, consultorías, capacitación de recursos humanos, comercialización tecnológica, entre otros posibles). Por último, el origen de los fondos que gestionan las

OTT se distribuye en el 43% venta de servicios y 57% presupuesto institucional, mostrando una equilibrada dependencia entre recursos propios y generados por actividades de comercialización. A su vez, la demanda externa surge del ámbito local inmediato en un 47%, del ámbito provincial en un 24% de los casos, y solo en un 2% del extranjero, mostrando un enfoque mayoritariamente territorial.

Desafío para el Sistema de Educación Superior argentino

El Sistema de Educación Superior (SES) se enfrenta al problema del sostenimiento de la propiedad intelectual en el tiempo, en la medida que la industria no se desarrolle armónicamente junto al resto del sistema. En la actualidad, el licenciamiento no constituye una fuente de ingresos relevante para el SES. Esta realidad se sustenta más en las particularidades de la estructura económica del país que en la forma en que las instituciones orientan la comercialización de las patentes. Basados en Codner et. al. [17], sólo el 29% opta por proteger de manera formal los resultados obtenidos en las actividades de innovación. Esto atenta contra las posibilidades de relacionarse que posee el SES con el sistema productivo, debido a la característica idiosincrática que presenta el empresariado.

Existe un alto grado de concentración respecto de las universidades que consiguen patentar un desarrollo propio. En base a la información suministrada por la Dirección de Información Científica del MINCyT [18], el cinco por ciento de las universidades concentran el 68% de las patentes concedidas del SES, es decir que seis de las ciento catorce instituciones aglutinan dos de cada tres patentes otorgadas. Esta situación, de gran concentración, es similar a la que se presenta en las publicaciones científicas.

Discusión y resultados

Contexto regional

En términos generales, entre las características comunes que presentan los sistemas nacionales de innovación en América Latina [14], cabe reseñar el escaso volumen de recursos financieros y la pequeña dimensión media de la comunidad científica. Además, se cuenta con pocos incentivos para llevar a cabo investigaciones orientadas a problemas nacionales [19]. A ello se suma que el sector público sigue siendo la principal fuente de financiación y que la concentración geográfica e institucional de las capacidades es elevada. Por su parte, las empresas hacen un reducido esfuerzo en I+D, y el que realizan en actividades de innovación sigue sin ser plenamente capturado por las metodologías actuales para medir la innovación. Los vínculos entre diferentes agentes del sistema presentan fuertes limitaciones. Además, existe una fuerte distorsión en la estructura de incentivos, y persiste la combinación de instituciones que se originaron a partir del modelo de industrialización basado en las importaciones, junto a otras instituciones de nueva creación bajo una lógica diferente.

La evidencia sugiere que los países difieren en términos de sus perfiles de desarrollo y, en particular, en el equilibrio entre ambas dimensiones. Por lo tanto, en lugar de tener un marco analítico general para generar recomendaciones similares para todos los países, el diseño de la política de CTI debe tener en cuenta estas diferentes condiciones iniciales.

Cabe reseñar tres lecciones aprendidas que emergen de este análisis. En primer lugar, los países siguen enfrentando, en diferentes grados, una serie de problemas que socavan los

procesos de creación de capacidades tales como las limitaciones en la demanda, las limitaciones de oferta, una baja inversión del sector privado, la escasez de capital de riesgo público y privado, y la ruptura de las cadenas productivas domésticas, entre otras. El diseño de la política de CTI debe tener en cuenta estas particularidades y su conexión, así como las especificidades de los agentes del SNI para poder diseñar programas eficientes en términos económicos, sociales e innovadores.

En segundo lugar, la evidencia muestra un equilibrio débil entre ambas dimensiones. Si bien el objetivo final del desarrollo se materializa en amplios objetivos socioeconómicos nacionales, el objetivo final de la política de CTI en América Latina sigue siendo únicamente el desarrollo de capacidades, especialmente en innovación, que satisfaga la productividad, la competitividad y el crecimiento económico.

Finalmente, en tercer lugar, se necesitan diferentes tipos de estrategias políticas de acuerdo con los perfiles de desarrollo de los países (I, II, III), en lugar de un único modelo de política de CTI para América Latina, lo que a su vez hará más factible la construcción de capacidades domésticas más fuertes:

– Para los países del Perfil III, que tienen sistemas más equilibrados, el enfoque supondría aumentar la productividad y mejorar el desempeño de la innovación para acercarse a la frontera tecnológica y, al mismo tiempo, podría incluir la atención a la solución de los problemas nacionales.

– Para los países del Perfil II —que tienen un sesgo hacia el desarrollo sociopolítico y carecen de capacidades en lo tecnoeconómico—, el enfoque implicaría promover el aprendizaje, la imitación, la adaptación y una variedad de actividades de innovación, considerando las demandas locales.

– Para los países del Perfil I —con un alto rendimiento tecnoeconómico pero débil desarrollo en lo socio-político—, la atención a los problemas nacionales debe estar en el centro de la política de CTI. El desafío es cómo combinar el aumento de la productividad con la solución de los problemas nacionales.

Para dar respuesta a estos desafíos, es necesario que los países cuenten con capacidades internas que les permitan avanzar en la producción de conocimiento y en la apropiación del mismo [20].

Los derechos de propiedad intelectual como medida de avance

Park y Lippoldt [21] han desarrollado un análisis empírico de la influencia de la fuerza de los derechos de propiedad intelectual (DPI) en la transferencia de tecnología a los países en desarrollo. Se utiliza el análisis de regresión para examinar la relación entre varias medidas de transferencia de tecnología y un conjunto de índices que cuantifican la fortaleza de los DPI basados en leyes en los libros, mientras se controlan otros factores. Para este propósito, los autores han reunido un conjunto de datos que cubrió una amplia variedad de países en desarrollo durante un período de tiempo ampliado (1990-2015).

La conclusión principal resultó ser que los DPI por sí solos no determinan el éxito tecnológico o incluso un mayor acceso a la tecnología. De hecho, el análisis de regresión está condicionado a que otros factores se mantengan constantes. Es importante señalar que los DPI no operan en el vacío. Existen factores complementarios que ayudan a facilitar la transferencia de tecnología, como la calidad de la infraestructura, las políticas y regulaciones gubernamentales y la estructura del mercado, entre otros. También hay factores complementarios que afectan específicamente la innovación y la difusión de tecnología, como la calidad de las instituciones del conocimiento (la universidad, institutos

públicos de investigación o centros de investigación industrial como parques científicos), el sistema financiero (acceso a capital social, crédito y capital de riesgo), disponibilidad de capital humano capacitado y redes para la colaboración o la interacción en la investigación (la colaboración en la investigación entre la universidad y la industria o la colaboración internacional), entre otros.

La importancia de los responsables de las OTT en Argentina

En la mayoría de los casos relevados de las OTT de universidades argentinas, se observaron mejores resultados en las que hay un nivel de autonomía importante del responsable de la OTT para la elaboración de estrategias y la toma de decisiones. Esto se evidencia en la construcción de agendas específicas para los temas de transferencia que no estaban necesariamente definidas de antemano por la institución. Dos tipos de desafíos principales son percibidos por los responsables de la OTT: a) Internos: relacionados a manejos de recursos, disputas por autonomía de los espacios institucionales (gobernanza), el crecimiento de sus estructuras de OTT y el desarrollo de sus capacidades para la TT, b) Relacionales: convergen desafíos que remiten a un mejoramiento de los vínculos con espacios internos y externos a la OTT (generación de confianza hacia el interior y el exterior), sincronización de las agendas de I+D y académicas, introduciendo problemas del territorio, desarrollo de capacidades de comercialización (negocios con los gobiernos (B2G) o cuando se esfuerzan por desarrollar productos, licencias y/o nuevas empresas de base tecnológica (B2B)).

Vulnerabilidades detectadas en el esquema argentino

En términos generales, el SNI de Argentina se caracteriza por un bajo grado de coordinación entre sus distintos elementos. Su desarticulación es un punto importante a destacar dentro de sus debilidades, no sólo en lo referente a la articulación de las políticas públicas, sino también en cuanto a la vinculación con el entorno productivo. En el primer caso, la desarticulación disminuye la eficiencia del gasto público por el efecto duplicación, mientras que, en el segundo caso, la falta de vinculación limita la potencialidad de la transferencia de conocimientos científico tecnológicos al sector productivo. Para enfrentar este problema, en los últimos años el Gobierno introdujo ciertos cambios institucionales y nuevos instrumentos de vinculación que tienen como propósito estimular un mayor grado de cohesión en las políticas públicas y en la relación público privada. El impacto de estos cambios aún no es mensurable.

La fuerte presencia de empresas transnacionales (ET) en el mercado local también forma parte de la explicación de la baja participación privada en los esfuerzos en I+D. Como es bien conocido, la deslocalización de las actividades de producción de las ETs no ha sido acompañada de la descentralización de los gastos en I+D. En general, estas empresas conservan en su casa matriz las actividades de producción de conocimiento, lo cual aumenta la participación del sector privado en los gastos en I+D en los países desarrollados y limita los derrames potenciales de estas empresas en el mercado huésped.

Al analizar el período de generación científica entre 2000 y 2015, el crecimiento en las publicaciones tiene como contracara un decrecimiento, del 16% durante el período analizado, del número de patentes solicitadas así

como en la proporción de patentes solicitadas por residentes. Es posible explicar este fenómeno de desaceleración del patentamiento a partir de la histórica y estructural “no” demanda de conocimientos desde el sector industrial local, a pesar que durante el período de análisis se ha ingresado nuevamente a un proceso de sustitución de importaciones.

Puede afirmarse que las universidades han tenido bastante éxito en materia de patentamiento. Sin embargo, la dificultad de comercialización vía licenciamiento es evidente. Es muy difícil conseguir licenciar o intentar producir con las nuevas tecnologías en una economía primarizada y un contexto industrial nacional, históricamente dependiente de tecnologías importadas. A pesar de ello, existen interesantes posibilidades en segmentos de desarrollo como el biotecnológico en el campo de la salud, los alimentos y la mitigación medioambiental.

Aquellas naciones que como Argentina se apegaron a los postulados de la CEPAL y pudieron desarrollar políticas de Ciencia y Tecnología; en consonancia con los intereses nacionales, incluyendo el manejo de las transferencias tecnológicas, hoy muestran indicadores económicos muy favorables y los mejores indicadores de la región en cuanto a ciencia y tecnología.

Conclusiones

En muchas ocasiones, se han asumido como propios determinados factores que promueven las relaciones universidad-empresa y que son una reinterpretación de acciones que han funcionado bien en otras latitudes. Pero no se han tenido en cuenta el nivel de las posibilidades del sector universitario de la región, las características de un sector productivo que se ubica principalmente en las industrias tradicionales, además de las consideraciones del territorio, las demandas sociales, la inestabilidad económica o la baja inversión en CTI. Todos estos factores son fundamentales dado que la relación universidad empresa se caracteriza por la complejidad de los vínculos que establece y el contexto en el que se quiere desarrollar y hacer perdurar. La falta de una política industrial articulada con la CTI no permite vencer los condicionantes estructurales que impiden el establecimiento de los vínculos entre los actores.

Con el ánimo de alentar el diseño de políticas tendientes a fortalecer el rol de las OTT, y asociado con la dificultada participación de estos organismos como nexos para el acercamiento entre el ámbito académico y el productivo, se pueden mencionar ciertas debilidades adicionales. Entre ellas, la escasa participación de profesionales con capacidad para comprender la tecnología desarrollada por el investigador y al mismo tiempo identificar la oportunidad de negocio a través del contacto con potenciales sectores productivos o empresas interesadas en el conocimiento disponible. Esta escasa participación de profesionales especializados puede ser consecuencia de la falta de oferta de recursos humanos calificados para la tarea. Por otra parte, en ciertos casos, las OTT carecen de margen presupuestario para ampliar su estructura organizativa (en referencia a infraestructura y personal experto) y con ello fortalecer la calidad de los servicios prestados en torno las actividades de vinculación y transferencia de tecnologías. Estas debilidades inciden en la capacidad de las OTT para llevar a cabo o fortalecer el desarrollo de actividades sofisticadas y complejas como aquellas que integran en set de las denominadas “actividades de gestión del conocimiento”.

La transferencia de tecnología como modelo de adquisición-asimilación-difusión requiere de un Estado capaz de contribuir con su estrategia, además de su política científica y tecnológica, precisa también de la creación de una infraestructura industrial avanzada, a la flexibilidad de la gestión empresarial, y a la articulación adecuada del sistema productivo investigativo y educacional en función de los objetivos estratégicos y tácticos que requieren las necesidades prioritarias del país, para acceder a niveles superiores en el bienestar económico y social de la población.

Referencias

- [1] Núñez, J. (1999). *La ciencia y la tecnología como procesos sociales*. Félix Varela, La Habana.
- [2] Alborno, M. (2001). Política científica y tecnológica: Una visión desde América Latina. *Revista Iberoamericana de Ciencia, Tecnología, Sociedad e Innovación*, 1.
- [3] Maloney, W., & Perry, G. (2005). Hacia una política de innovación eficiente en América Latina. *Revista de la CEPAL*, 87, 25 - 44.
- [4] Halty Carrere, M. (1975). ¿Hacia un nuevo orden tecnológico? *Estudios Internacionales*, 8(32).
- [5] Sabato, J. y Botana, N. (1968). La ciencia y la tecnología en el desarrollo futuro de América Latina. *INTAL*, Buenos Aires, Año 1, 3, 15-36.
- [6] Etzkowitz, H. y Leydesdorff, L. (1997). *Universities in the Global Economy: A Triple Helix of University-Industry-Government Relations*. Casell Academic, London.
- [7] Martínez Vidal, C. y Manuel, M. (2002). La Escuela Latinoamericana de Pensamiento en Ciencia, Tecnología y Desarrollo. Notas de un Proyecto de Investigación. *Revista Iberoamericana de Ciencia, Tecnología, Sociedad e Innovación*. Organización de Estados Americanos. 4, 65-90.
- [8] Marrero, A. (2007). La sociedad de conocimiento: una revisión teórica de un modelo de desarrollo posible para América Latina. Universidad de la república, Uruguay.
- [9] Codner, D., Becerra, P. y Díaz, A. (2012). Blind Technological transfer or Technological Leakage: a Case Study from the South. *Journal of Technology Management and Innovation*, 7 (2), 184-194.
- [10] Giuliadori, D. y Giuliadori, R. (2012). Incentivos tributarios para la I+D+i en Argentina. Una evaluación de las políticas recientes. Banco Interamericano de Desarrollo, División de Competitividad e Innovación. BID.
- [11] Castellaci, F. y Natera, J. M. (2016). Innovation, absorptive capacity and growth heterogeneity: Development paths in Latin America 1970-2010. *Structural Change and Economic Dynamics*. 37, 27-42.
- [12] Vega Jurado, J., Manjarres Henríquez, L., Castro Martínez, E. y Fernández de Lucio, I. (2011). Las relaciones Universidad-Empresa: tendencias y desafíos en el marco del Espacio Iberoamericano del conocimiento. *Revista Iberoamericana de Educación*. 57, 109-124.
- [13] Codner, D., Baudry, G., y Becerra, P. (2013). Las oficinas de transferencia de conocimiento como instrumento de las universidades para su interacción con el entorno. *Revista Universidades*, 58, 24-32.
- [14] Dutrénit, G. (2012). Innovación para el desarrollo en América Latina: dónde estamos respecto a las masas críticas de capacidades. *Innovación y desarrollo: retos para una sociedad global*, 173-202.
- [15] Dutrénit, G., Natera, J. M., Anyul, M. P. y Vera cruz, A. O. (2018). Development profiles and accumulation of technological capabilities in Latin America *Technological Forecasting and Social Change*.
- [16] Malizia, A.I., Sánchez-Barrioluengo, M., Lombera, G. y Castro-Martínez, E. (2013). Análisis de los Mecanismos de Transferencia Tecnológica entre los Sectores Científico tecnológico y Productivo de Argentina. *Journal of Technology Mng. and Innov.* 8(4). [17] Codner, D., Becerra, P., Lugones, G. y Britto, F. (2014). Estudio de necesidades de las empresas del Sur del Conurbano Bonaerense. *Innovación y articulación con la Universidad Nacional de Quilmes*. *Revista Universidades*. 58, 43-57.

- [18] MINCYT. Anuarios de Indicadores de Ciencia y Tecnología. Ministerio de Ciencia, Tecnología e Innovación Productiva, Ediciones 2001, 2002, 2003, 2004, 2005, 2006, 2007, 2008, 2009 y 2010, Buenos Aires.
- [19] Natera, J. M., Rojas-Rajs, S., Dutrénit, G. y Vera-cruz, A. O. (2019). National health problems and useful knowledge: lessons from public funding of diabetes research in Mexico. *Innovation and Development*. 9(2), 205-224.
- [20] Álvarez, I., Fischer, B. y Natera, J. M. (2013). Internationalization and technology in Mercosur countries. *Cepal Review*. 109, 41- 56.
- [21] Park, W. y Lippoldt, D. (2008). *Technology Transfer and the Economic Implications of the Strengthening of Intellectual Property Rights in Developing Countries*. OECD Trade Policy Papers, 62, OECD Publishing, Paris.
- [https://doi.org/10.1016/0043-1648\(95\)06639-X](https://doi.org/10.1016/0043-1648(95)06639-X)
- [7] Fan, Y., *Precipitation Strengthening of Aluminum by Transition Metal Aluminides*. (2015). Retrieved from <https://digitalcommons.wpi.edu/etd-dissertations/209>
- [8] H. Rosa, G. Cardus, E. Broitman, R. Zimmerman, Structural properties of Al–Sn thin films deposited by magnetron sputtering, *Journal of Materials Science Letters* 20 (2001) 1365–1367.
- [9] X. Liu, M.Q. Zeng, Y. Ma, M. Zhu, Promoting the high load-carrying capability of Al–20wt%Sn bearing alloys through creating nanocomposite structure by mechanical alloying, *Wear*, Volumes 294–295, 2012, Pages 387-394, ISSN 0043-1648. <https://doi.org/10.1016/j.wear.2012.07.021>.